

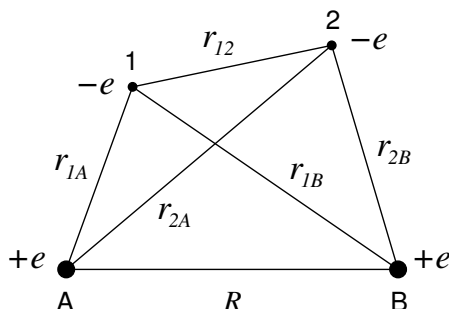
F6150 Pokročilé numerické metody – zadání úloh

1. Variační řešení molekuly H_2

Molekula vodíku je nejjednodušší neutrální molekulou obsahující pouze dva protony a dva elektrony. Měříme-li vzdálenosti v Bohrových poloměrech ($a_0 \approx 0.0529$ nm) a energii v jednotce Hartree (1 Ha ≈ 27.21 eV), má Hamiltonián obzvláště jednoduchý tvar

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{2B}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}.$$

Jednotlivé vzdálenosti jsou znázorněny v obrázku:



Odhadněte závislost energie základního stavu molekuly H_2 na vzdálenosti jader R variačním postupem se zkušební funkcí

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_A(1)\phi_B(2) + \phi_B(1)\phi_A(2) + \lambda[\phi_A(1)\phi_A(2) + \phi_B(1)\phi_B(2)].$$

Spinová část zkušební funkce je singlet $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Ve výrazu pro Ψ jsou

$$\phi_A(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_A} \quad \phi_B(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_B}$$

škálované vlnové funkce základního stavu atomu vodíku na pozici jádra A a B . Nejlepší výsledek lze získat současnou minimalizací vůči škálovacímu parametru α a parametru λ určujícím zapojení ionizovaných stavů, kdy pro každou vzdálenost jader stanovíme

$$E(R) = \min_{\alpha\lambda} \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$

Porovnejte získanou křivku $E(R)$ s postupy

- $\lambda = 1, \alpha = 1$ – molekulární orbital
- $\lambda = 1, \alpha$ volné – škálovaný molekulární orbital
- $\lambda = 0, \alpha = 1$ – Heitlerova-Londonova aproximace
- $\lambda = 0, \alpha$ volné – Heitlerova-Londonova aproximace se škálováním

Můžete též prověřit, jak vypadá výsledek pro nulovou vzdálenost jader (systém je pak ekvivalentní atomu hélia), a limitu velkého R , kdy bychom měli dojít ke dvěma izolovaným atomům vodíku.

Pomocné integrály, užito označení $w = \alpha R$, $C = 0.57722$ (Eulerova konstanta), $E_1(x) = \int_x^\infty e^{-t}/t dt$:

$$\begin{aligned}
\int \phi_A(1) \nabla_1^2 \phi_A(1) &= -\alpha^2 \\
\int \phi_A(1) \frac{1}{r_{1A}} \phi_A(1) &= \alpha \\
\int \phi_A(1) \phi_B(1) &= S(w) = e^{-w} \left(1 + w + \frac{w^2}{3} \right) \\
\int \phi_A(1) \frac{1}{r_{1B}} \phi_A(1) &= \alpha \left[\frac{1}{w} - e^{-2w} \left(1 + \frac{1}{w} \right) \right] \\
\int \phi_A(1) \frac{1}{r_{1B}} \phi_B(1) &= \alpha e^{-w} (1 + w) \\
\int \phi_A(1) \nabla_1^2 \phi_B(1) &= -\alpha^2 e^{-w} \left(1 + w - \frac{w^2}{3} \right) \\
\iint \phi_A^2(1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A^2(2) &= \frac{5}{8} \alpha \\
\iint \phi_A^2(1) \frac{1}{r_{12}} \phi_B^2(2) &= \alpha \left[\frac{1}{w} - e^{-2w} \left(\frac{1}{w} + \frac{11}{8} + \frac{3w}{4} + \frac{w^2}{6} \right) \right] \\
\iint \phi_A(1) \phi_B(1) \frac{1}{r_{12}} \phi_A(2) \phi_B(2) &= \frac{1}{5} \alpha \left\{ -e^{-2w} \left(-\frac{25}{8} + \frac{23w}{4} + 3w^2 + \frac{w^3}{3} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{6}{w} [S^2(w)(C + \ln w) - S^2(-w)E_1(4w) + 2S(w)S(-w)E_1(2w)] \right\} \\
\iint \phi_A(1) \phi_B(1) \frac{1}{r_{12}} \phi_B(2) \phi_B(2) &= \alpha \left[e^{-w} \left(w + \frac{1}{8} + \frac{5}{16w} \right) - e^{-3w} \left(\frac{1}{8} + \frac{5}{16w} \right) \right]
\end{aligned}$$

2. Výpočet $\sqrt{2}$ s libovolnou přesností

Diskrétní Fourierovu transformaci lze překvapivě využít i k výpočtům s libovolnou přesností. Představíme-li si totiž dvě čísla v dekadickém zápisu

$$A = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n 10^n, \quad B = \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n 10^n,$$

kde $a_n, b_n \in \{0, 1, 2, \dots, 9\}$ jsou číslice zápisu, lze násobení těchto čísel chápat jako diskrétní konvoluci

$$AB = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{n-m} b_m \right] 10^n,$$

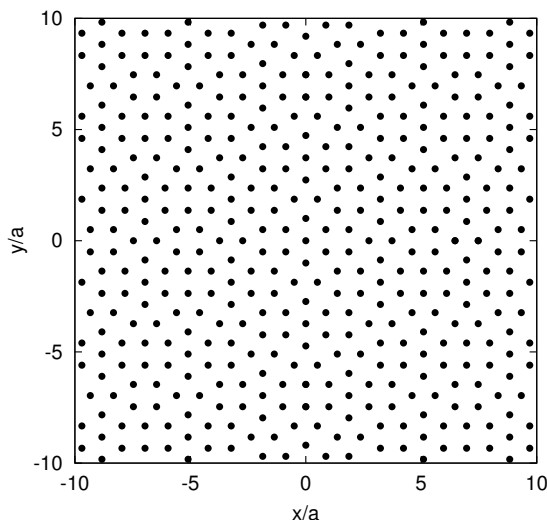
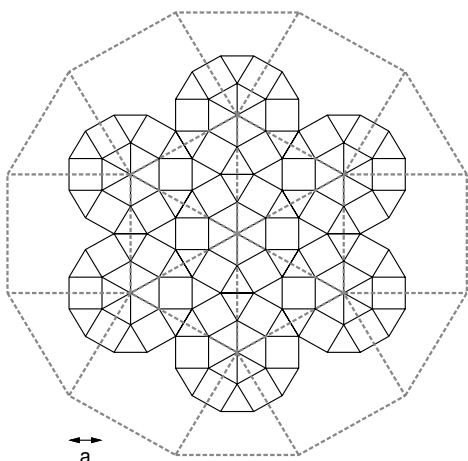
snadno vyčíslitelnou právě diskrétní Fourierovou transformací. Jako ukázkou možností tohoto postupu vypočtete hodnotu $\sqrt{2}$ na 4000 platných míst (jedna strana strojopisu). Využijte přitom iterační formuli

$$x_{n+1} = \frac{1}{2}(1 - x_n^2),$$

která konverguje k $\sqrt{2} - 1$. Vyšetřete rychlost konvergence a porovnejte s analytickým odhadem.

3. Kvazikrystal

Kvazikrystaly objevené v roce 1982 izraelským fyzikem Danielem Šechtmanem jsou materiály s pravidelnou strukturou, která ovšem není periodická jako u obyčejných krystalů. Jejich objev donutil IUCr změnit oficiální definici krystalu na současnou podobu: Krystal je jakákoli pevná látka, jejíž difrakční diagram je bodový. Příklad kvazikrystalu a jeho konstrukce je na obrázku. Osad'te kvazikrystal vhodnými atomy (např. gaussovskými píky) a proved'te Fourierovu transformaci vzniklé hustoty. Totéž proved'te pro hexagonální mřížku a výsledky srovnajte.



4. Frekvence srážek molekul plynu

Uvažujme o plynu molekul s koncentrací n , jejichž rychlosti mají Maxwellovo rozdělení. Za předpokladu, že srážky molekul v plynu můžeme popisovat jako srážky tuhých koulí s průměrem d , lze pro frekvenci srážek v jednotce objemu plynu odvodit výraz

$$Z = \frac{1}{2} n^2 \pi d^2 \iiint_{-\infty}^{+\infty} \iiint_{-\infty}^{+\infty} \iiint_{-\infty}^{+\infty} c(u, v, w, u', v', w') f(u, v, w) f(u', v', w') du dv dw du' dv' dw' .$$

kde $c = \sqrt{(u - u')^2 + (v - v')^2 + (w - w')^2}$ je velikost relativní rychlosti a

$$f(u, v, w) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{m(u^2 + v^2 + w^2)}{2k_B T} \right] .$$

Metodou Monte-Carlo vypočtete bezrozměrnou konstantu

$$\frac{Z}{n^2 \pi d^2 c_0} ,$$

v níž $c_0 = \sqrt{3k_B T/m}$ značí střední kvadratickou rychlost molekul plynu, a porovnejte svůj výsledek získaný s různým počtem vyčíslení integrandu s přesnou hodnotou $2/\sqrt{3\pi}$. Při výpočtu je výhodné převést integrál do bezrozměrných veličin $\tilde{u} = u \sqrt{m/k_B T}$ atd.

5. Thomsonův problém

Na povrchu koule s jednotkovým poloměrem je rozmístěno N stejných bodových nábojů, které se mohou po povrchu volně pohybovat. Minimalizací elektrostatické energie odpuzování nábojů najdete jejich rovnovážnou konfiguraci pro malá $N \leq 12$.

6. Hylleraasovo variační řešení atomu hélia

Pár elektronů v elektronovém obalu atomu hélia se řídí dvoučásticovou Schrödingerovou rovnicí (vyjádřena v atomových jednotkách)

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right)\psi = E\psi$$

Hylleraas v roce 1929 získal variačním postupem velmi přesnou aproximaci energie základního stavu (s relativní chybou 10^{-4}). Použil přitom zkušební funkci

$$\psi = e^{-ks/2} (1 + A_1u + A_2u^2 + B_1s + B_2s^2 + Ct^2)$$

vyjádřenou v souřadnicích $s = r_1 + r_2$, $t = r_1 - r_2$, $u = r_{12}$. Maticový element hamiltoniánu mezi dvěma symetrickými funkcemi f_n a f_m lze v těchto souřadnicích vypočítat jako (společný faktor π^2 vynechán)

$$H_{nm} = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left[u(s^2 - t^2) (\partial_s f_n \partial_s f_m + \partial_t f_n \partial_t f_m + \partial_u f_n \partial_u f_m) \right. \\ \left. + s(u^2 - t^2) (\partial_u f_n \partial_s f_m + \partial_s f_n \partial_u f_m) + t(s^2 - u^2) (\partial_u f_n \partial_t f_m + \partial_t f_n \partial_u f_m) + (s^2 - t^2 - 8su) f_n f_m \right],$$

překryvový integrál je pak roven

$$S_{nm} = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u(s^2 - t^2) f_n f_m.$$

Minimalizací střední hodnoty hamiltoniánu $E(k, A_1, A_2, B_1, B_2, C) = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ najdete přibližnou hodnotu energie základního stavu. K minimalizaci použijte přímo některou z metod vícerozměrné minimalizace. Praktičtější postup, který aplikoval Hylleraas, spočívá ve využití linearit v parametrech A_1 , A_2 , B_1 , B_2 a C , vůči nimž lze provést minimalizaci řešením vlastního problému. Zbývá pak jednorozměrná minimalizace toho minima vůči parametru k .

Pozn.: K výpočtu smíte použít počítač. Egil Hylleraas jej k dispozici neměl, přesto dokázal výpočet provést a zanedlouho jej rozšířit dokonce na 38 variačních parametrů. Jeho výsledky přispěly k všeobecnému přijetí Schrödingerovy rovnice jako velmi přesného nástroje popisu mikrosvěta poměrně záhy po jejím publikování.

7. Rotace galaxie

Rozložení zářivé hmoty v naší galaxii je dle odhadu popsáno v článku M. Weber a W. De Boer, *Astronomy & Astrophysics* **509**, A25 (2010) přibližně vystiženo hustotou

$$\rho(x, y, z) = \rho_b \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{r_b^2}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{z_b^2}\right) + \rho_d \exp\left(-\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{r_d}\right) \exp\left(-\frac{z}{z_d}\right),$$

přičemž středová výduť je dána parametry $\rho_b = 15 M_\odot \text{ pc}^{-3}$, $r_b = 0.6 \text{ kpc}$, $z_b = 0.37 \text{ kpc}$ a galaktický disk parametry $\rho_d = 2.7 M_\odot \text{ pc}^{-3}$, $r_d = 2.3 \text{ kpc}$, $z_d = 0.32 \text{ kpc}$. Řešením Poissonovy rovnice pro gravitační potenciál

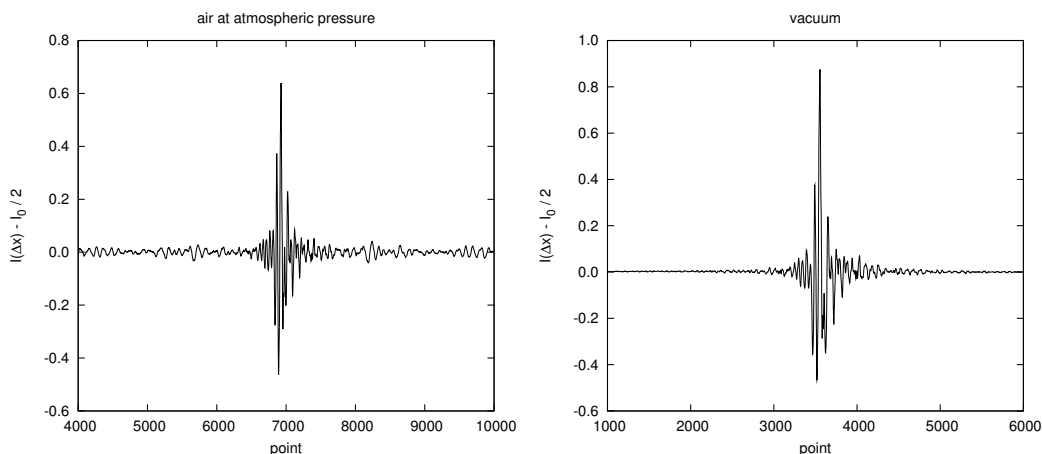
$$\nabla^2 \varphi = 4\pi G \rho$$

najděte gravitační silové pole působící v galaxii. Za předpokladu, že tvar galaxie je stabilní, určete rychlost otáčení jednotlivých částí galaxie. Srovnáním se skutečnou rotační křivkou bylo ve zmiňovaném článku odhadnuto rozložení temné hmoty.

Při řešení Poissonovy rovnice použijte diskrétní Fourierovu transformaci a periodické okrajové podmínky. Dlouhovlnnou singularitu je třeba vhodně ošetřit.

8. Fourierovská spektroskopie

Nastudujte princip Fourierovy spektroskopie, např. z knihy H. Kuzmany, *Solid-State Spectroscopy*, Springer 2009. Při výkladu v zápočtové prezentaci kromě základního principu diskutujte i o faktorech určujících rozlišení a spektrální rozsah přístroje. Proveďte analýzu zadaných interferogramů a demonstруйте vliv apodizace a rozšíření rozsahu interferogramu nulovými hodnotami.



9. Řešení 2D Schrödingerovy rovnice Lanczosovou diagonalizací

Stacionární Schrödingerovu rovnici v dvourozměrném případě

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y)$$

lze řešit převedením na lineárně-algebraický problém. Spojitou funkci $\Psi(x, y)$ přitom nahradíme diskrétní sadou hodnot $\Psi_{i,j}$ v uzlech čtvercové mřížky s mřížovým parametrem Δ a laplacián přibližně vyjádříme pomocí konečných diferencí jako

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) \approx \frac{\Psi_{i-1,j} + \Psi_{i+1,j} + \Psi_{i,j-1} + \Psi_{i,j+1} - 4\Psi_{i,j}}{\Delta^2}.$$

Přitom se omezíme na konečnou oblast o rozměrech $L \times L$. Aproximace stacionárních stavů je nyní možné nalézt diagonalizací matice odpovídající levé straně Schrödingerovy rovnice. V jednorozměrném případě lze ještě provést diagonalizaci obvyklými metodami, v dvou-
rozměrném případě již však narazíme na nepříznivé škálování potřebného výpočetního času, který je úměrný $(L/\Delta)^6$. Matice k diagonalizaci je však řídká a zajímáme se pouze o několik vlastních vektorů příslušných nejnižším vlastním hodnotám energie, proto lze s výhodou užít Lanczosovy metody diagonalizace.

Vaším úkolem bude řešit 2D Schrödingerovu rovnici na oblasti $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$ se středem v počátku pokryté mřížkou s 201×201 uzly pro dva potenciály:

- rotačně symetrický gaussovský potenciál s grupou symetrie $O(2)$

$$V(x, y) = -V_0 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right),$$

kde $V_0 = 2 \text{ eV}$ a $\sigma = 2 \text{ nm}$

- potenciál s grupou symetrie C_{6v} připomínající molekulu benzenu

$$V(x, y) = -V_0 \sum_{n=1}^6 \exp\left[-\frac{(x - R \cos \frac{n\pi}{3})^2 + (y - R \sin \frac{n\pi}{3})^2}{2\sigma^2}\right]$$

s parametry $V_0 = 2 \text{ eV}$, $\sigma = 0.8 \text{ nm}$, $R = 2 \text{ nm}$.

V obou případech najdete vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti odpovídající dvanácti nejnižším stavům a charakterizujte jejich symetrii a degenerovanost z hlediska ireducibilních reprezentací příslušné grupy symetrie.

Prozkoumejte konvergenci Lanczosovy metody pro jednotlivé stavy a vyšetřete ztrátu ortogonalit Lanczosových vektorů v závislosti na počtu iterací.

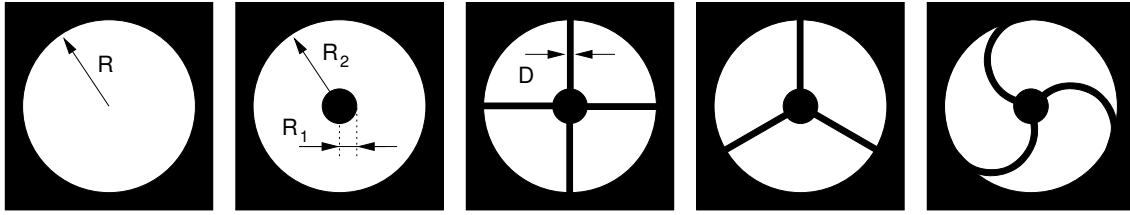
10. Difrakční jevy v teleskopu

Pomocí diskretní Fourierovy transformace naleznete zdánlivý obraz bodového zdroje pozorovaný dalekohledem. Předpokládáme, že dalekohled je osvětlen rovinnou monochromatickou vlnou ze vzdáleného zdroje postupující ve směru osy z totožné s osou dalekohledu. Popíšeme-li propustnost vstupní části tubusu dalekohledu funkcí $T(x, y)$, získáme difrakční obrazec Fourierovou transformací

$$I = \left| \iint T(x, y) e^{-i(k_x x + k_y y)} dx dy \right|^2,$$

kde $k_{x,y}$ jsou složky vlnového vektoru difraktovaných fotonů. Zdánlivý obraz nejsnadněji zachytíme jako intenzitu závislou na odchylkách $\phi_{x,y}$ od osy z . Porovnejte nejprve případ prostého kruhového otvoru se známým analytickým řešením. Poté přidejte kruhovou překážku představující sekundární zrcadlo a prozkoumejte vliv jejího poloměru. Realistický difrakční obrazec získáme zakomponováním čtyřramenného a trojramenného držáku sekundárního zrcadla, popřípadě trojramenného držáku s polokruhovými rameny.

Počítejte pro vlnovou délku $\lambda = 500 \text{ nm}$ a průměr vstupního otvoru v desítkách centimetrů. Relevantní jednotkou pro odchylky $\phi_{x,y}$ je pak úhlová vteřina.

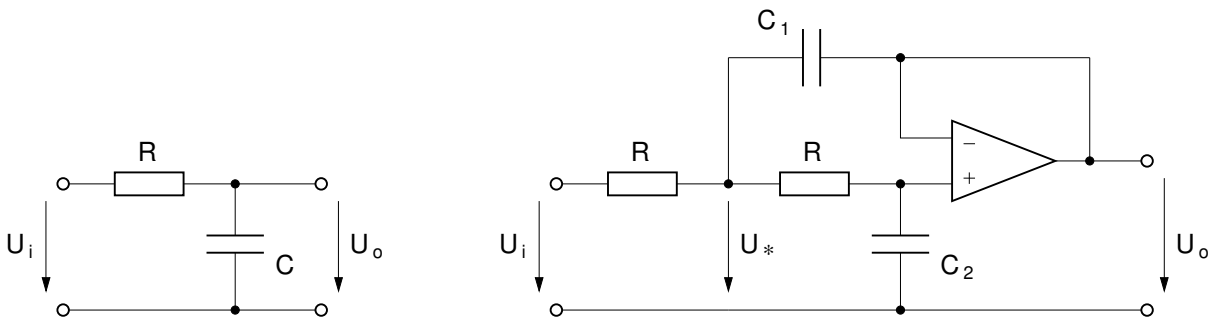


11. Spektrální rozklad odezvy dolní propusti

Dolní propust slouží v elektronice k potlačení nežádoucích vysokofrekvenčních složek signálu. Její nejjednodušší realizaci získáme sériovým spojením rezistoru s odporem R a kondenzátoru s kapacitou C (na obrázku vlevo). Na toto spojení přivedeme vstupní signál $U_i(t)$. Napětí na kondenzátoru pak představuje výstupní signál $U_o(t)$. Tato propust, charakterizovaná pro harmonický signál ($\sim e^{i\omega t}$) s frekvencí ω komplexním poměrem amplitud

$$A(\omega) = \frac{U_o(\omega)}{U_i(\omega)} = \frac{1}{1 + i\omega RC}$$

ovšem neposkytuje dostatečně rychle rostoucí útlum se zvyšující se frekvencí. Dokonalejší realizací dolní propusti je obvod z pravé části obrázku využívající operační zesilovač.



Je charakterizovaná poměrem

$$A(\omega) = \frac{1}{1 - \omega^2 C_1 C_2 R^2 + 2i\omega C_2 R},$$

který s rostoucí frekvencí klesá výrazně rychleji. Kvantitativní popis chování propusti umožňuje soustava diferenciálních rovnic

$$\frac{dU_o}{dt} = -\frac{1}{\tau_2} U_o + \frac{1}{\tau_2} U_*, \quad \frac{dU_*}{dt} = \left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right) U_o - \left(\frac{2}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right) U_* + \frac{1}{\tau_1} U_i,$$

kde $\tau_{1,2} = RC_{1,2}$. Jsou odvozeny za předpokladu ideálního operačního zesilovače s nekonečným zesílením, nekonečným vstupním odporem, nulovým výstupním odporem a okamžitou odezvou.

Numericky vyřešte tyto diferenciální rovnice pro níže uvedené průběhy vstupních napětí a diskrétní Fourierovou transformací $U_i(t)$ a $U_o(t)$ najděte v jednotlivých případech $|A(\omega)|$. Parametry součástek jsou $R = 3.3 \text{ k}\Omega$, $C_1 = 22 \text{ nF}$ a $C_2 = 4.7 \text{ nF}$. Porovnejte s případem $C_1 = 6.8 \text{ nF}$. Pracujte s časovým intervalem o délce 10 ms a spektrum signálů a odezovou funkci $A(\omega)$ vyšetřujte do frekvence 20 kHz.

- $U_i(t) = +1$ v intervalu $[t_0 - \Delta t, t_0]$ a -1 v intervalu $[t_0, t_0 + \Delta t]$, kde $t_0 = 5$ ms, $\Delta t = 0.47$ ms, 0.50 ms a 0.53 ms
- $U_i(t) = \exp[-(t - t_0)^2/2\sigma^2] \sin(2\pi f_0 t)$, kde $t_0 = 5$ ms, $\sigma = 0.2$ ms, $f_0 = 3$ kHz
- $U_i(t) = \sum_{n=1}^4 \exp[-(t - n\Delta t)^2/2\sigma^2] \sin(2\pi n f_0 t)$, kde $\Delta t = 2$ ms, $\sigma = 0.2$ ms, $f_0 = 3$ kHz
- $U_i(t) = \sin(2\pi k t^2)$, kde $k = 1$ kHz ms⁻¹
- $U_i(t) = \frac{1}{2}[1 + \tanh \sigma(t - t_1)] \frac{1}{2}[1 - \tanh \sigma(t - t_2)] \sin(2\pi k t^2)$, kde $t_1 = 1$ ms, $t_2 = 9$ ms, $\sigma = 5$ ms⁻¹, $k = 1$ kHz ms⁻¹

12. Fourierova analýza chaotického oscilátoru

Tlumené matematické kyvadlo rozkmitávané harmonickou silou se při vhodném škálování veličin řídí diferenciální rovnicí

$$\ddot{\varphi} = -\sin \varphi - q \dot{\varphi} + b \cos \omega_0 t .$$

Charakter řešení závisí na amplitudě budící síly, je-li příliš velká, vykazuje kyvadlo chaotické chování. Řešte pohybovou rovnici s parametry $q = 0.5$ a $\omega_0 = 2/3$ v dostatečně dlouhém časovém intervalu. Jako počáteční podmínky přitom volte $\varphi(0) = 0$ a $\dot{\varphi}(0) = 2$. Fourierovou transformací pak najdete odpovídající spektrum výkonu $|\varphi^{\text{FT}}(\omega)|^2$ pro b v intervalu 0.8 až 1.2 , ve kterém by měl nastat přechod mezi nechaotickým a chaotickým chováním. Vhodné je znázornit spektrum v logaritmickém grafu.