

## F5330 Základní numerické metody – zadání úloh

Úlohy označené • budou řešeny v rámci cvičení, ostatní úlohy slouží jako zápočtové. Řešení zápočtových úloh odevzdávejte ve formě elaborátu, který bude obsahovat zejména:

1. matematickou formulaci problému, který je třeba numericky řešit
2. důkladný popis použité numerické metody
3. okomentovaný zdrojový kód programu
4. výsledky, nejlépe prezentované v grafické podobě, a jejich rozbor

Je-li to v zadání vyžadováno, nebo přijde-li vám to zajímavé, proved'te i odvození výchozích rovnic. V části s výsledky diskutujte vhodnost použité metody a její možné slabiny. Dále analyzujte (např. experimenty s délkou integračního kroku u diferenciálních rovnic), jak velké numerické chyby jste se v řešení dopustili. Při zápočtovém rozhovoru bude, kromě problému samotného a povšechného přehledu o probíraných numerických metodách, kladen důraz na porozumění použité numerické metodě, která by měla být v elaborátu náležitě popsána.

Při řešení lze použít jakýkoli programovací jazyk nebo prostředí včetně jejich případných knihoven s numerickými metodami. Zdrojové kódy z cvičení je možné začleňovat a modifikovat dle libosti.

<b>1</b>	<b>Řešení rovnice s jednou neznámou</b>	<b>4</b>
1.1	Určení stáří Země radioizotopovou metodou •	4
1.2	Pasení kozy	4
1.3	Parašutista	4
1.4	Zamrznání vodní nádrže	4
1.5	Satelit WIND	5
1.6	Umořování dluhu	5
1.7	Pravoúhlá kvantová jáma	5
1.8	Kronigův–Penneyův model	6
1.9	Rovnice $x = \cos x$	6
<b>2</b>	<b>Hledání extrémů funkce jedné proměnné</b>	<b>6</b>
2.1	Poloha mostu •	6
2.2	Střelba na cíl	7
<b>3</b>	<b>Numerická kvadratura</b>	<b>7</b>
3.1	Difrakce na hraně •	7
3.2	Fresnelova difrakce na kruhovém otvoru	7
3.3	Perioda matematického kyvadla	7
3.4	Pád tyče	8
3.5	Magnetické pole solenoidu	8
3.6	Magnetické pole toroidu	8
3.7	Záření absolutně černého tělesa	8
3.8	Kramersovy–Kronigovy relace	8
3.9	Spinové korelace v Kitaevově modelu	9
3.10	Účinný srážkový průřez	9
<b>4</b>	<b>Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic s počátečními podmínkami</b>	<b>10</b>
4.1	Lišky a zajíci	10
4.2	Epidemie moru v Eyamu •	11
4.3	Šíření kapavky	11
4.4	Krvetvorba	12
4.5	Koza a vlk	12
4.6	Fata morgána •	12
4.7	Západ slunce	12
4.8	Optické vlákno	13
4.9	Balistická křivka	13
4.10	Start rakety	14
4.11	Pohyb matematického kyvadla	14
4.12	Keplerova rovnice	14
4.13	Dráha satelitu	14
4.14	Lagrangeovy body soustavy Země–Měsíc	15
4.15	Náraz asteroidu	15
4.16	Precese perihélia Merkuru	16
4.17	Exotermická reakce	16
4.18	Pásmová propust	16
4.19	Rabiho oscilace	17
4.20	Landauův–Zenerův model	17
4.21	Chandrasekharova mez	18

<b>5</b>	<b>Soustavy lineárních rovnic</b>	<b>19</b>
5.1	Prokládání dat polynomem • . . . . .	19
5.2	Extrapolace energie základního stavu Heisenbergova řetízku . . . . .	19
5.3	Gaussova předpověď polohy asteroidu Pallas . . . . .	19
5.4	Zatížení nosníku . . . . .	20
5.5	Ruské kolo . . . . .	20
5.6	Odporová síť . . . . .	20
5.7	Twin-T filtr . . . . .	21
<b>6</b>	<b>Vlastní čísla a vlastní vektory matic</b>	<b>21</b>
6.1	Spřažené oscilátory • . . . . .	21
6.2	Kývání korálkového závěsu . . . . .	22
6.3	Vibrace mostu . . . . .	22
6.4	Vibrace molekuly metanolu a její infračervené spektrum . . . . .	23
6.5	Lineární kvantová jáma – řešení variační metodou . . . . .	23
6.6	Pásová struktura 1D krystalu . . . . .	23
6.7	Pásová struktura křemíku počítaná metodou pseudopotenciálu . . . . .	24
<b>7</b>	<b>Soustavy nelineárních rovnic</b>	<b>24</b>
7.1	Epicentrum zemětřesení . . . . .	24
7.2	Pavoukova řetězovka . . . . .	25
<b>8</b>	<b>Obyčejné diferenciální rovnice s okrajovými podmínkami</b>	<b>26</b>
8.1	Kvantová jáma . . . . .	26
8.2	Buben . . . . .	26
<b>9</b>	<b>Parciální diferenciální rovnice</b>	<b>26</b>
9.1	Elektrostatické pole kondenzátoru • . . . . .	26
9.2	Elektrostatická čočka . . . . .	26
9.3	Šíření tepla při přípravě pokrmů . . . . .	27
9.4	Vaření vejce . . . . .	27
9.5	Elektroforéza . . . . .	27
9.6	Tunelový jev . . . . .	28

# 1 Řešení rovnice s jednou neznámou

## 1.1 Určení stáří Země radioizotopovou metodou •

Minerál zirkon s chemickým vzorcem  $\text{ZrSiO}_4$  je nejstarším známým minerálem na Zemi. Vyznačuje se tím, že při své krystalizaci ochotně přijímá příměs uranu a vytěsňuje olovo. Toho lze využít k radiometrickému určení stáří vzorku zirkonu. Vychází se přitom z odlišných rozpadových řad izotopu  $^{238}\text{U}$ , který se s poločasem  $\tau_1 = 4.5 \times 10^9$  let přeměňuje v izotop  $^{206}\text{Pb}$ , a izotopu  $^{235}\text{U}$ , který se s poločasem  $\tau_2 = 0.71 \times 10^9$  let přeměňuje v izotop  $^{207}\text{Pb}$ . Analýzou jistého vzorku zirkonu bylo zjištěno, že poměr koncentrací izotopů uranu  $^{238}\text{U}$  a  $^{235}\text{U}$  v něm obsažených je 137 : 1 a poměr koncentrací izotopů olova  $^{206}\text{Pb}$  a  $^{207}\text{Pb}$  je 11.7 : 7.1. Určete na základě těchto údajů stáří analyzovaného vzorku.

## 1.2 Pasení kozy

Představme si kruhový trávník s poloměrem  $R$  homogenně zarostlý trávou. Na okraji trávníku je zabodnutý kolík. Lanem o délce  $L$  je ke kolíku přivázána koza. Koza je nenasytná, takže spase veškerou trávu, která je v jejím dosahu. Najděte délku lana, při které koza sežere právě jednu polovinu plochy trávníku. Úlohu můžete i rozšířit a najít takovou posloupnost délek  $\{L_n\}_{n=1}^N$ , aby koza spásala trávník po  $N$  stejných dílech.

## 1.3 Parašutista

Vertikální vzdálenost, kterou urazí parašutista před otevřením padáku je dána rovnicí

$$y = \frac{1}{k} \ln \left[ \cosh(t\sqrt{gk}) \right],$$

kde  $g = 9.8065 \text{ m s}^{-2}$  je tíhové zrychlení a  $k = 0.00341 \text{ m}^{-1}$  je konstanta související s odporem vzduchu. Parašutista vyskočil z letadla letícího ve výšce  $H = 3 \text{ km}$  a padá volným pádem. Plánuje otevřít padák ve výšce  $h = 2 \text{ km}$ . V jakém okamžiku po výškovu z letadla má otevřít padák? Kolik sekund života mu zbývá, pokud se mu padák neotevře? Řešte úlohu numericky a porovnejte s analytickým řešením.

## 1.4 Zamrzání vodní nádrže

Při výstavbě podzemních nádrží na vodu je třeba zvážit i riziko zamrznutí nádrže v důsledku déle trvajících mrazů. Ačkoli realistický výpočet je značně komplikovaný, jistý odhad poskytne výsledek odvozený na základě předpokladu, že půda je homogenní a izotropní médium. V takovém případě platí pro teplotu v hloubce  $x$  pod povrchem a v čase  $t$  po začátku mrazů vztah

$$\frac{T(x, t) - T_s}{T_i - T_s} = \text{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right),$$

kde  $T_s$  je povrchová teplota,  $T_i$  počáteční teplota a  $\alpha$  je tepelná vodivost půdy. Počítejte s hodnotami  $T_s = -15^\circ\text{C}$ ,  $T_i = 20^\circ\text{C}$ ,  $\alpha = 0.138 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  a zjistěte, jak hluboko je třeba umístit nádrž, aby zamrzla nejdříve po 60 dnech od začátku mrazů.

Pozn.: Funkce  $\text{erf } z = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^z \exp(-t^2) dt$  je tzv. funkce chyby, kterou lze vypočítat pomocí mocninné řady

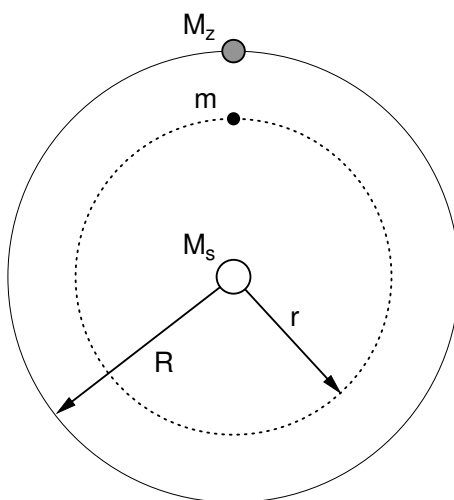
$$\text{erf } z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n+1}}{n!(2n+1)}.$$

## 1.5 Satelit WIND

Satelit WIND, který vypustila NASA v roce 1994, pracuje v tzv. Lagrangeově bodě na spojnici Slunce a Země, kde sleduje hvězdný vítr vanoucí ze Slunce na Zemi. Lagrangeův bod je takový bod, kde se vyrovnají síly působící na satelit a platí tedy (pro zjednodušení považujeme trajektorie satelitu a Země za kruhové)

$$G \frac{M_s m}{r^2} = G \frac{M_z m}{(R-r)^2} + mr\omega^2.$$

Zde  $G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$  je gravitační konstanta,  $M_s = 1.98 \times 10^{30} \text{ kg}$  hmotnost Slunce,  $M_z = 5.98 \times 10^{24} \text{ kg}$  hmotnost Země,  $m$  nepodstatná hmotnost satelitu,  $R = 1.49 \times 10^{11} \text{ m}$  vzdálenost Země od Slunce,  $r$  neznámá vzdálenost satelitu od Slunce a  $T = 3.15576 \times 10^7 \text{ s}$  doba oběhu Země kolem Slunce. Vypočtete poloměr  $r$  oběžné dráhy satelitu kolem Slunce a jeho vzdálenost od Země.



## 1.6 Umořování dluhu

Půjčíme-li si částku  $a$  s roční úrokovou sazbou  $r$ , budeme po  $n$  letech dlužni

$$a(1+r)^n.$$

Pravidelné roční splátky  $p$  tuto dlužnou částku snižují na

$$a(1+r)^n - \sum_{i=0}^{n-1} p(1+r)^i = a(1+r)^n - p \frac{(1+r)^n - 1}{r}.$$

Dluh je splacen, je-li dlužná částka nulová. Pro zjednodušení považujte  $n$  za reálné číslo.

(a) Půjčíme si  $a = 2000000$  Kč s roční úrokovou sazbou 6% ( $r = 0.06$ ) a roční splátkou  $p = 180000$  Kč. Jak dlouho potrvá splacení dluhu a kolik celkem zaplatíme?

(b) Půjčíme si stejnou částku se stejnou úrokovou sazbou. Jaká musí být roční splátka, abychom dluh splatili po  $n = 20$  letech?

(c) Sestrojte graf závislosti doby splacení a celkové zaplacené částky na měsíční splátce  $p/12$ .

## 1.7 Pravoúhlá kvantová jáma

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v jednorozměrném potenciálu

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{pro } -a < x < a \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

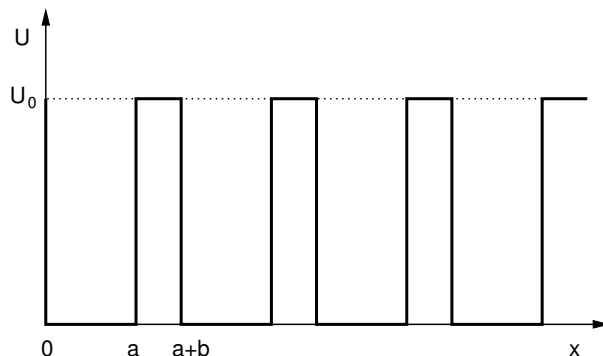
který odpovídá konečně hlubové kvantové jámě o šířce  $L = 2a$ . Najděte vlastní energie a vlnové funkce vázaných stavů, které splňují stacionární Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x).$$

Sestavte nejprve obecný program a poté použijte hodnoty  $m = 0.07m_e$  (efektivní hmotnost elektronu v GaAs,  $m_e$  je hmotnost elektronu,  $m_e = 9.11 \times 10^{31}$  kg),  $L = 10$  nm a  $V_0 = 0.5$  eV.

## 1.8 Kronigův–Penneyův model

Vyřešte Schrödingerovu rovnici pro elektron v jednorozměrném periodickém potenciálovém poli znázorněném v následujícím obrázku.



Ukažte, že vlastní hodnoty energie jsou dány rovnicí

$$\cos k(a+b) = \cos a\kappa_1 \cos b\kappa_2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa_2}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right) \sin a\kappa_1 \sin b\kappa_2,$$

kde

$$\kappa_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{a} \quad \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}.$$

a  $k$  je Blochův vektor. Najděte disperzní relaci  $E_n(k)$  pro několik nejnižších pásů. Vhodně zvolené číselné konstanty jsou např.  $a = 4 \text{ \AA}$ ,  $b = 1 \text{ \AA}$  a  $U_0 = 5$  eV.

## 1.9 Rovnice $x = \cos x$

Při řešení rovnice  $x = \cos x$  iterační metodou konstruujeme posloupnost čísel  $x_n$  podle předpisu  $x_{n+1} = \cos x_n$ . Tato posloupnost konverguje k řešení  $\bar{x} = 0.7390851 \dots$  uvedené rovnice. Inverzní posloupnost  $y_{n+1} = \arccos y_n$  se naopak tomuto řešení vzdaluje. Vyкроčíme-li však do komplexního oboru, poskytnou nám tato posloupnost řešení rovnice  $z^* = \cos z$ . Přesvědčte se o tom a zároveň tuto rovnici vyřešte převedením na soustavu dvou rovnic pro reálnou a imaginární část  $z = x + iy$ , ze které jednu neznámou vyloučíte, a na zbylou rovnici aplikujete některou z numerických metod.

# 2 Hledání extrémů funkce jedné proměnné

## 2.1 Poloha mostu •

Města A, B a C jsou oddělena řekou, jejíž koryto je vymezeno přímkami  $y = r_1$  a  $y = r_2$ ,  $0 < r_1 < r_2 < 1$ . Města leží na souřadnicích  $P_A = (0, 1)$ ,  $P_B = (1, 0)$  a  $P_C = (1, 1)$ . Ve kterém místě je třeba postavit most přes řeku, aby celková délka silnic spojujících most s městy byla co nejkratší? Most bude kolmý na koryto řeky.

## 2.2 Střelba na cíl

Střelou, která opouští hlaveň rychlostí  $v_0$  se snažíme zasáhnout cíl nacházející se ve výšce  $H$  nad úrovní ústí hlavně. Pro danou rychlost střely určete maximální vodorovnou vzdálenost  $L$  cíle, který lze zasáhnout a odpovídající náměrový úhel  $\alpha$ . Pro jednoduchost se dopusťte hrubého přiblížení – zanedbejte odpor vzduchu. Dále předpokládejte, že vzdálenosti jsou dostatečně malé a je možné zanedbat zakřivení zemského povrchu a nehomogenitu tíhového pole.

## 3 Numerická kvadratura

### 3.1 Difrakce na hraně •

Uvažujme o difrakci rovinné monochromatické vlny dopadající kolmo na ostrou přímou hranu. Pro intenzitu ve vzdálenosti  $L$  za hranou lze odvodit

$$I(x) = \frac{I_0}{2} \left\{ \left[ \mathcal{C} \left( \frac{x}{a} \right) + \frac{1}{2} \right]^2 + \left[ \mathcal{S} \left( \frac{x}{a} \right) + \frac{1}{2} \right]^2 \right\},$$

kde  $\mathcal{C}$  a  $\mathcal{S}$  jsou tzv. Fresnelovy integrály definované vztahy

$$\mathcal{C}(z) = \int_0^z \cos \frac{\pi u^2}{2} dz, \quad \mathcal{S}(z) = \int_0^z \sin \frac{\pi u^2}{2} dz,$$

$x$  měří vzdálenost od konce geometrického stínu a  $a = \sqrt{L\lambda/2}$ . Vypočtěte závislost  $I(x)/I_0$  na  $x/a$  a diskutujte obtíže spojené s vyčíslováním integrálů pro velké  $x/a$ .

### 3.2 Fresnelova difrakce na kruhovém otvoru

Vypočtěte difrakční obrazec vytvořený na stínítku ve vzdálenosti  $L$  za kruhovým otvorem o poloměru  $R$ , na nějž kolmo dopadá rovinná monochromatická vlna o vlnové délce  $\lambda$ . Jsou splněny podmínky Fresnelovy difrakce (nikoli však Fraunhoferovy), takže intenzita v bodě  $\mathbf{r}$  stínítka je dána integrálem přes plochu otvoru (vektor  $\mathbf{r}'$  probíhá body plochy otvoru)

$$I(\mathbf{r}) \sim \left| \iint \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dS \right|^2,$$

kde pro  $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$  ve fázovém faktoru použijeme kvadratické přiblížení a  $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$  ve jmenovateli považujeme za konstantní.

### 3.3 Perioda matematického kyvadla

Pohyb matematického kyvadla délky  $L$  se řídí diferenciální rovnicí

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} = -gL \sin \varphi,$$

kde  $g$  je tíhové zrychlení. Z této rovnice odvoďte vztah pro periodu kmitů matematického kyvadla  $T$  v závislosti na amplitudě  $\varphi_0$

$$\frac{T}{4} = \sqrt{\frac{L}{2g}} \int_0^{\varphi_0} \frac{d\varphi}{\sqrt{\cos \varphi - \cos \varphi_0}} = \sqrt{\frac{L}{g}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\vartheta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \vartheta}} \quad \text{s označením } k = \sin \frac{\varphi_0}{2}.$$

Druhý uvedený integrál se označuje jako úplný eliptický integrál prvního druhu. Vypočtěte jej numericky a sestrojte graf závislosti  $T$  na  $\varphi_0$ .

### 3.4 Pád tyče

Uvažujme o tyči délky  $L$ , jejíž jeden konec se pohybuje po dokonale kluzkém horizontálním povrchu. V čase  $t = 0$  se tyč nachází v klidu a svírá s povrchem úhel  $\vartheta_0$ . Ukažte, že čas potřebný k tomu, aby se tyč dostala do polohy, kdy svírá s povrchem úhel  $\vartheta$ , je dán integrálem

$$t = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{L}{3g}} \int_{\vartheta}^{\vartheta_0} \sqrt{\frac{1 + 3 \cos^2 \varphi}{\sin \vartheta_0 - \sin \varphi}} d\varphi .$$

Vykreslete závislost  $t$  na  $\vartheta_0 \in (0, \pi/2)$  pro  $\vartheta = 0$ , tedy dobu pádu v závislosti na počátečním sklonu tyče.

### 3.5 Magnetické pole solenoidu

Numerickou integrací Biotova–Savartova zákona určete magnetické pole solenoidu. Solenoid o poloměru  $R$  a délce  $L$  mající  $N$  závitů vystihuje parametrická křivka

$$x = R \cos N\varphi , \quad y = R \sin N\varphi , \quad z = \frac{L}{2} \left( \frac{\varphi}{\pi} - 1 \right) ,$$

kde  $\varphi$  nabývá hodnot z intervalu  $[0, 2\pi]$ . Křivkou protéká proud  $I$ . Magnetické pole znázorněte pomocí velikosti indukce  $\mathbf{B}$  a velikostí radiální a axiální složky. Použijte přitom vhodné řezy polem, např. roviny  $xz$  a  $xy$ .

### 3.6 Magnetické pole toroidu

Numerickou integrací Biotova–Savartova zákona určete magnetické pole toroidu. Toroid s  $N$  závity o poloměru  $r$  a celkovým poloměrem  $R$  parametrizujte jako  $x = (R + r \cos N\varphi) \cos \varphi$ ,  $y = (R + r \cos N\varphi) \sin \varphi$ ,  $z = r \sin N\varphi$ , kde  $\varphi$  nabývá hodnot z intervalu  $[0, 2\pi]$ . Křivkou protéká proud  $I$ . Magnetické pole reprezentujte pomocí velikosti indukce  $\mathbf{B}$  a velikostí vhodně zvolených složek pole vykreslených jako mapy v řezu rovinami  $xz$  a  $xy$ .

### 3.7 Záření absolutně černého tělesa

Max Planck odvodil pro spektrální hustotu záření v absolutně černé dutině vyhřáté na teplotu  $T$  vztah

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \left[ \exp \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1} .$$

Malým okénkem ve stěně dutiny uniká celkový výkon

$$I(T) = \int_0^\infty \frac{c}{4} u(\omega, T) d\omega$$

vztažený na jednotku plochy okénka. Ukažte, že platí Stefanův zákon  $I(T) = \sigma T^4$  a numericky vypočtete hodnotu konstanty  $\sigma$ . Porovnejte svůj výsledek s přesnou hodnotou  $\sigma = \pi^2 k_B^4 / 60 \hbar^3 c^2$ .

### 3.8 Kramersovy-Kronigovy relace

Dielektrická funkce souboru Lorentzových oscilátorů (lze si je představit jako nabitě kuličky upoutané na pružinkách) je dána vztahem

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{ne^2}{m\epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} .$$



Zde  $\omega_0$  je vlastní frekvence netlumeného oscilátoru,  $\gamma$  udává tlumení,  $n$  je počet oscilátorů v jednotce objemu,  $m$  a  $e$  hmotnost a náboj kuličky. Z principu kauzality vyplývají pro obecnou dielektrickou funkci Kramersovy–Kronigovy relace

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} \varepsilon(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad \operatorname{Im} \varepsilon(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} \varepsilon(\omega') - 1}{\omega' - \omega} d\omega'$$

Pro několik sad vhodně zvolených hodnot parametrů se numerickým výpočtem přesvědčte, že  $\varepsilon(\omega)$  Lorentzova oscilátoru vskutku splňuje KK relace.

### 3.9 Spinové korelace v Kitaevově modelu

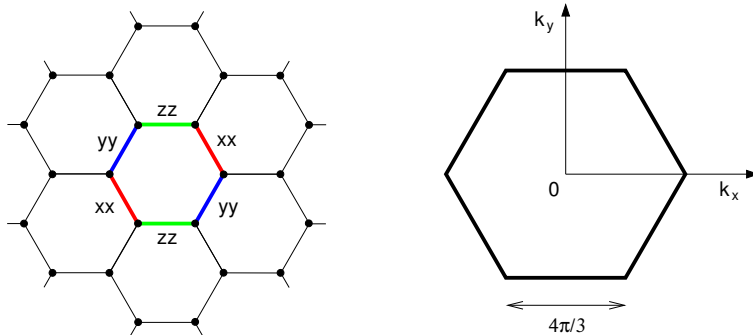
Kitaevův model je frustrovaný spinový model na voštinové mřížce, jehož základním stavem se spinová kapalina vyznačující se spinovými korelacemi jen mezi nejbližšími sousedy. Hamiltonián modelu jest

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{\gamma} \sigma_i^{\gamma} \sigma_j^{\gamma},$$

kde index  $\gamma$  je dán směrem vazby (viz obrázek). Pro hodnotu korelace mezi nejbližšími spiny byl odvozen výraz

$$\langle \sigma_i^{\gamma} \sigma_j^{\gamma} \rangle = \frac{\sqrt{3}}{8\pi^2} \int_{\text{BZ}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}} d^2 \mathbf{k},$$

kde  $\epsilon_{\mathbf{k}} = 2(J_x \cos k_1 + J_y \cos k_2 + J_z)$  a  $\Delta_{\mathbf{k}} = 2(J_x \sin k_1 + J_y \sin k_2)$  a integračním oborem je Brillouinova zóna příslušné mřížky, tj. plocha šestiúhelníka se stranou  $4\pi/3$  a dvěma vrcholy ležícími na ose  $k_x$ . Veličiny  $k_1$  a  $k_2$  jsou projekce  $\mathbf{k}$  do směrů vazeb s  $J_x$  a  $J_y$ :  $k_1 = (-k_x + \sqrt{3} k_y)/2$ ,  $k_2 = (+k_x + \sqrt{3} k_y)/2$ . Vypočtěte hodnotu korelace pro symetrický případ  $J_x = J_y = J_z$ .



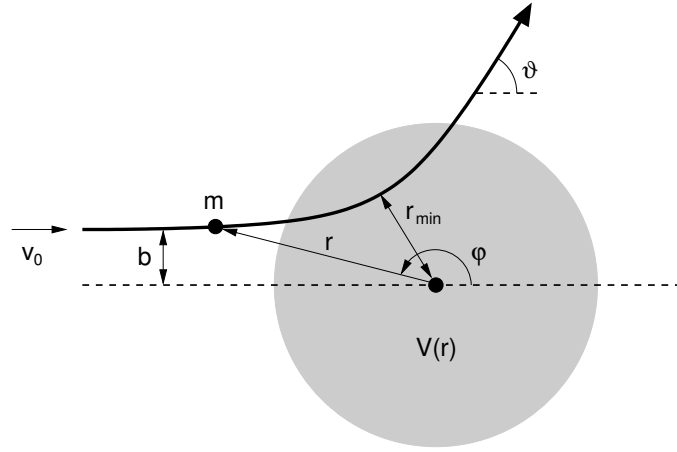
### 3.10 Účinný srážkový průřez

Uvažujme o párové srážce částic s hmotnostmi  $m$  a  $M$ , jejichž vzájemné silové působení je vyjádřeno sféricky symetrickým potenciálem  $V(r)$ . Relativní pohyb v této dvoučásticové soustavě je možné kvantifikovat jako pohyb částice o hmotnosti  $\mu = mM/(m + M)$ , která vlétá rychlostí  $\mathbf{v}_0$  do oblasti sféricky symetrického potenciálu  $V(r)$ . Vzdálenost částice od osy rovnoběžné s  $\mathbf{v}_0$  a procházející středem potenciálu je  $b$ . Výslednou odchylku směru částice  $\vartheta$  je možné najít s pomocí zákona zachování momentu hybnosti a zákona zachování mechanické energie. Zákon zachování momentu hybnosti lze zapsat ve tvaru

$$L = \mu b v_0 = \mu r^2 \dot{\varphi}$$

a zákon zachování mechanické energie ve tvaru

$$E = \frac{1}{2} \mu v_0^2 = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + V(r).$$



Kombinací uvedených dvou rovnic je možné vyloučit čas a najít tak diferenciální rovnici pro trajektorii

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{\dot{\varphi}}{\dot{r}} = \pm \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - b^2/r^2 - V(r)/E}},$$

jejíž integrací se získá úhlová odchylka

$$\vartheta = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - b^2/r^2 - V(r)/E}} dr,$$

kde  $r_{\min}$  je minimální vzdálenost daná rovnicí (vyplývá z  $\dot{r} = 0$ )

$$1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E} = 0.$$

Numerickým řešením předchozí rovnice lze pro daný potenciál najít závislost  $r_{\min}$  na  $b$  a po dosazení do integrálu pro  $\vartheta$  pak numerickou kvadraturou závislost  $\vartheta(b)$ . Vypočtete tímto postupem diferenciální účinný průřez

$$\left( \frac{d\sigma}{d\vartheta} \right) = \frac{b}{\sin \vartheta} \left| \frac{db}{d\vartheta} \right|$$

pro Yukawův potenciál

$$V(r) = \frac{\kappa}{r} e^{-r/a}$$

a srovnejte jej s Rutherfordovou formulí

$$\left( \frac{d\sigma}{d\vartheta} \right) = \left( \frac{\kappa}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)},$$

která platí pro Coulombův potenciál ( $a \rightarrow \infty$ ). Pro jednoduchost položte  $E = m = \kappa = 1$ .

## 4 Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic s počátečními podmínkami

### 4.1 Lišky a zajíci

Časový vývoj populace lišek a zajíců v izolované oblasti lze přibližně popsat Lotkovými-Volterrovými rovnicemi

$$\frac{dx}{dt} = Ax - Bxy, \quad \frac{dy}{dt} = -Cy + Dxy.$$

Veličiny  $x$  a  $y$  označují početní stav zajíců (kořist) a lišek (predátor). Koeficienty  $A, B, C, D$  vyjadřují popořadě míru rozmnožování kořisti, vybití kořisti, vymírání predátorů a přibývání

predátorů v důsledku dostatku potravy. Pro hodnoty koeficientů  $A = 1$ ,  $B = 0.5$ ,  $C = 0.75$ ,  $D = 0.25$  zkoumejte časový vývoj populací s různými počátečními podmínkami. Napomoc si vezměte fázové trajektorie, tedy křivky řešení v rovině  $xy$ , díky nimž zjistíte, že řešení je periodické a najdete stacionární bod, v němž je počet lišek a zajíců nezávislý na čase. Zvolte hodnoty koeficientů tak, aby soustava měla realističtější stacionární bod  $(x_0, y_0) = (120, 8)$ .

## 4.2 Epidemie moru v Eyamu •

V malé vesnici Eyam ležící asi 10km jihozápadně od Sheffieldu ve Velké Británii se v letech 1665-1666 rozšířila morová nákaza způsobená infikovanými blechami. Ty pocházely z balíku látek přivezeného pro místního krejčího z Londýna, kde se v té době rozvíjela epidemie moru. Aby zabránili rozšíření moru do okolí, rozhodli se obyvatelé Eyamu zůstat v karanténě. Záznamy z kroniky tak poskytují unikátní kvantitativní informaci o průběhu epidemie v izolované populaci. Následuje tabulka s počty zdravých a nakažených osob v roce 1666:

datum	polovina května	3.7.	19.7.	3.8.	19.8.	3.9.	19.9.	20.10.
zdravých	254	235	201	153.5	121	108	97	83
nakažených	7	14.5	22	29	21	8	8	0

Průběh epidemie lze simulovat soustavou diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}\frac{dz}{dt} &= -\beta zn \\ \frac{dn}{dt} &= \beta zn - \alpha n\end{aligned}$$

s počátečními podmínkami  $z(0) = 254$ ,  $n(0) = 7$ . Koeficient  $\alpha \approx 2.82/\text{měsíc}$  odpovídá jedenáctidennímu průběhu nemoci zakončenému smrtí, koeficient  $\beta \approx 0.0177/\text{měsíc}$  vyjadřuje míru přenosu nemoci. Proveďte modelovou simulaci a porovnejte s reálnými daty. Dále prozkoumejte vliv koeficientů  $\alpha$  a  $\beta$ .

## 4.3 Šíření kapavky

Kapavka způsobovaná bakterií *Neisseria gonorrhoeae* se přenáší téměř výhradně pohlavním stykem. Může být vyléčena antibiotiky, ale prodělání nemoci nepřináší imunitu vůči další nákaze. Interagující promiskuitní populace mužů (počet  $N_m$ ) a žen (počet  $N_f$ ) rozdělíme na infikované (počty  $I_m, I_f$ ) a neinfikované – susceptibilní – osoby (počty  $S_m, S_f$ ). Vývoj počtu těchto osob v populaci lze popsat soustavou diferenciálních rovnic (SI model se dvěma populacemi)

$$\begin{aligned}\frac{dI_m}{dt} &= k_1 S_m I_f - k_2 I_m, \\ \frac{dI_f}{dt} &= k_3 S_f I_m - k_4 I_f.\end{aligned}$$

Sledováním velkého vzorku byly stanoveny hodnoty:  $k_1 = 0.000032 \text{ žena}^{-1} \text{den}^{-1}$ ,  $k_2 = 0.2 \text{ den}^{-1}$ ,  $k_3 = 0.00033 \text{ muž}^{-1} \text{den}^{-1}$ ,  $k_4 = 0.025 \text{ den}^{-1}$ .  $k_2$  je větší než  $k_4$ , protože u mužů se projevují bolestivé symptomy onemocnění a dříve tak vyhledávají lékařskou pomoc. Přenos nemoci z mužů na ženy je rovněž výrazně pravděpodobnější. Simulujte průběh epidemie kapavky v populaci s  $N_m = 900$  promiskuitními muži a  $N_f = 600$  promiskuitními ženami. Začnete s jedním infikovaným mužem a sledujte počty infikovaných po 12 let. Ustálí se časem počty infikovaných? Výskyt kapavky bychom pak nazvali endemickým.

## 4.4 Krvetvorba

Zralé krevní elementy postrádají schopnost dělení a je třeba je neustále obnovovat. Zde sehraává klíčovou úlohu kostní dřeň, kde se krevní elementy tvoří. Pro konkrétnost uvažujme dále o červených krvinkách. Proces jejich tvorby je velmi složitý, ale jeho základní kvantitativní aspekty lze vystihnout diferenciální rovnicí pro relativní koncentraci

$$\frac{dc(t)}{dt} = -gc(t) + \lambda[c(t - T)] .$$

První člen na pravé straně vystihuje úbytek krvinek, druhý člen přísun nových z kostní dřene spouštěný poklesem hladiny kyslíku v krvi. Nové krvinky jsou dodávány se zpožděním  $T$ , které u zdravého člověka činí asi 6 dní. Mackey a Glass navrhli konkrétní vyjádření funkce  $\lambda$ , s níž nabývá předchozí rovnice tvaru

$$\frac{dc}{dt} = -gc + \frac{\lambda c(t - T)}{1 + c^m(t - T)} .$$

Upravte Eulerovu metodu tak, aby zahrnovala zpoždění, a vyřešte diferenciální rovnici numericky pro parametry  $g = 0.1 \text{ d}^{-1}$ ,  $\lambda = 0.2 \text{ d}^{-1}$ ,  $m = 10$  a dvě různá zpoždění  $T = 6 \text{ d}$  a  $T = 20 \text{ d}$ . Hledejte řešení v čase 0 až 1000 dní s počáteční podmínkou  $c(t \leq 0) = 0.1$ . Prozkoumejte i „fázovou“ trajektorii složenou z bodů  $[c(t), c(t - T)]$ , která má pro uvedené dva případy odlišný charakter.

## 4.5 Koza a vlk

Koza běží rychlostí  $v_1$  po ose  $y$ . V okamžiku, kdy probíhá počátkem, ji začne pronásledovat vlk rychlostí  $v_2 > v_1$ . Počáteční poloha vlka leží na ose  $x$  ve vzdálenosti  $L$  od počátku. Rychlost vlka vždy směřuje k poloze kozy v daném okamžiku. Určete trajektorie vlka pronásledujícího kozu pro několik sad parametrů a závislost času  $T$ , za který bude koza dostižena na poměru  $v_2/v_1$ .

## 4.6 Fata morgána •

Na pouštích a nad mořem lze někdy pozorovat podivuhodné atmosférické zjevy zvané fata morgána. Jsou způsobené různou teplotou vzduchu v různých výškách nad povrchem a následným nepřímocharým šířením světelného paprsku ve vzniklém opticky nehomogenním prostředí. Trajektorie paprsku  $h(x)$  ( $x$  je vodorovná vzdálenost,  $h$  výška nad povrchem) je popsána diferenciální rovnicí

$$\frac{d^2h}{dx^2} = \frac{g}{n} \left[ 1 + \left( \frac{dh}{dx} \right)^2 \right] ,$$

ve které vystupuje výškový gradient indexu lomu vzduchu  $g = dn/dh$ . Za předpokladu  $n \approx 1$  a  $(dh/dx)^2 \ll 1$  lze rovnici zjednodušit na  $h'' = g(h)$ . Dále předpokládejme exponenciální průběh indexu lomu  $n(h) = n_0 + (\Delta n) e^{-h/H}$ , který vede na  $g(h) = -(\Delta n) e^{-h/H}$ . Vyšetřete trajektorie paprsků pro případ  $\Delta n > 0$  a  $\Delta n < 0$  a popište zjevy, ke kterým tyto trajektorie povedou. Pro jednoduchost se zaměřte pouze na škálované rovnice  $h'' = \pm e^{-h}$ .

## 4.7 Západ slunce

Při západu slunce pozorujeme sluneční kotouč nikoli kruhového ale eliptického tvaru. Tento jev lze vysvětlit jako důsledek šíření slunečních paprsků v optickém prostředí s nenulovým gradientem indexu lomu, které představuje atmosféra naší planety.

Index lomu vzduchu závisí na teplotě a tlaku vztahem

$$n(T, p) = 1 + 0.000293 \frac{p}{p_0} \frac{T_0}{T} .$$

V troposféře (oblast atmosféry do výšky přibližně 15km) lze vystihnout závislost teploty  $T$  a tlaku  $p$  na nadmořské výšce  $h$  vztahem

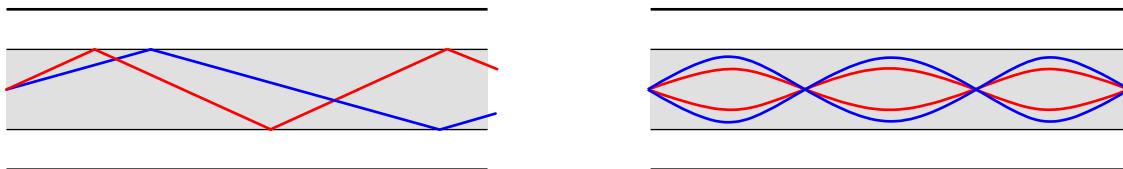
$$T = T_0 - Lh , \quad p = p_0 \left( 1 - \frac{Lh}{T_0} \right)^k , \quad k = \frac{gM}{RL} .$$

V této rovnici  $L = 0.0065 \text{ K m}^{-1}$  je teplotní gradient,  $g = 9.80665 \text{ m s}^{-2}$  je tíhové zrychlení,  $M = 0.0289644 \text{ kg mol}^{-1}$  molární hmotnost suchého vzduchu,  $R = 8.31447 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  univerzální plynová konstanta a  $T_0 = 298.15 \text{ K}$  a  $p_0 = 101.325 \text{ kPa}$  teplota a tlak panující na úrovni mořské hladiny.

Odvoďte diferenciální rovnici pro šíření paprsku v opticky nehomogenním prostředí se sférickou symetrií a aplikujte ji na případ šíření slunečních paprsků v atmosféře Země. Sestavte tabulku se skutečnou a zdánlivou úhlovou výškou nad obzorem. Odhadněte pomocí této tabulky míru zploštění slunečního kotouče, jehož spodní okraj se právě dotýká horizontu. Úhlový průměr slunečního kotouče na obloze je přibližně 32'.

## 4.8 Optické vlákno

Významným vylepšením optických vláken je použití parabolického profilu indexu lomu v průřezu vlákna. Ve srovnání s předchozím typem, kdy se paprsek totálně odrázel na rozhraní homogenního jádra a vnější vrstvy vlákna, nedochází k rozptylu doby putování paprsků s různými vstupními úhly. Trajektorie paprsků v obou typech vláken jsou schematicky znázorněny v následujícím obrázku.



Index lomu gradientního vlákna v závislosti na vzdálenosti od osy popíšeme funkcí

$$n(r) = \begin{cases} n_1 - (n_1 - n_2) \frac{r^2}{a^2} & r < a , \\ n_2 & r \geq a . \end{cases}$$

Numericky vypočítejte trajektorie a doby šíření paprsků pro parametry  $a = 50 \mu\text{m}$ ,  $n_1 = 1.480$ ,  $n_2 = 1.460$  a různé vstupní úhly a porovnejte s případem, kdy má jádro vlákna homogenní index lomu  $n_2$ .

## 4.9 Balistická křivka

Řešení úlohy o pohybu tělesa šikmo vrženého v prostředí bez odporu je dobře známo již ze středoškolské fyziky. Trajektorie tělesa vrženého rychlostí o velikosti  $v_0$  pod úhlem  $\alpha$  vůči vodorovné rovině je dána rovnicemi

$$x(t) = v_0 t \cos \alpha , \quad y(t) = v_0 t \sin \alpha - \frac{1}{2} g t^2 .$$

Vášim úkolem je prozkoumat případ, kdy proti pohybu působí odporová síla o velikosti  $F = -kv^2$  a srovnat jej pro různé hodnoty  $k$  s výše uvedeným řešením.

## 4.10 Start rakety

Německá raketa V-2 o počáteční hmotnosti  $m_0 = 12.8$  t startuje kolmo k zemskému povrchu. Raketa spotřebovává palivo rychlostí  $r = 130$  kg s<sup>-1</sup>, motor má tah  $F = 250$  kN. Najděte časový průběh rychlosti a výšky rakety, je-li konečná hmotnost rakety po spotřebování paliva  $m_1 = 4.0$  t. Při řešení považujte tíhové pole za konstantní s hodnotou tíhového zrychlení  $g = 9.81$  N kg<sup>-1</sup>. Srovnajte numerické řešení s řešením analytickým. V hypotetickém případě  $g = 0$  ověřte, že pro finální rychlost platí Ciolkovského rovnice  $v = v_e \ln(m_0/m_1)$ , kde  $v_e$  je výtoková rychlost zplodin rakety.

## 4.11 Pohyb matematického kyvadla

Pohyb matematického kyvadla délky  $L$  se řídí diferenciální rovnicí

$$\ddot{\varphi} = -gL \sin \varphi .$$

Položme pro jednoduchost  $gL = 1$ . Najděte fázové trajektorie matematického kyvadla, tj. křivky  $[\varphi(t), \dot{\varphi}(t)]$  pro různé počáteční podmínky. Proved'te srovnání s řešením získaným v harmonické aproximaci  $\sin \varphi \approx \varphi$ .

## 4.12 Keplerova rovnice

Pohyb tělesa v centrálním gravitačním poli je vystižen trajektorií

$$x = a \cos E - e , \quad y = b \sin E .$$

Zde  $a$  a  $b$  jsou hlavní polosy eliptické trajektorie,  $e$  je vzdálenost ohniska od středu elipsy a úhel  $E$  je nazýván excentrickou anomálií. Označíme-li jako  $t_0$  čas průchodu tělesa bodem nejbližším k centru a jako  $\varepsilon$  číselnou excentricitu elipsy  $e/a$ , platí Keplerova rovnice tvaru

$$E - \varepsilon \sin E = \frac{2\pi}{T}(t - t_0) .$$

Různými numerickými metodami vyšetřete pohyb tělesa v centrálním poli s vhodnými počátečními podmínkami a získejte hodnoty parametrů  $a$ ,  $b$ ,  $\varepsilon$ ,  $T$ . Následně proveďte, že vámi vypočtená trajektorie splňuje Keplerovu rovnici. Dále prozkoumejte časovou závislost kinetické a potenciální energie tělesa a jejich součtu.

## 4.13 Dráha satelitu

Satelit o zanedbatelné hmotnosti se pohybuje v gravitačním poli soustavy Země–Měsíc. Předpokládejme, že vzdálenost Měsíce od Země  $D$  je konstantní a Měsíc obíhá s kruhovou frekvencí  $\Omega$ . Pohyb satelitu můžeme vyšetřovat v neinerciální vztažné soustavě, ve které se jeví Země a Měsíc jako nehybné. Zvolíme-li počátek příslušného souřadného systému v místě těžiště soustavy Země–Měsíc tak, že Země zůstává v bodě  $(x, y) = (-d, 0)$  a Měsíc v bodě  $(x, y) = (D - d, 0)$ , je trajektorie satelitu řešením soustavy diferenciálních rovnic

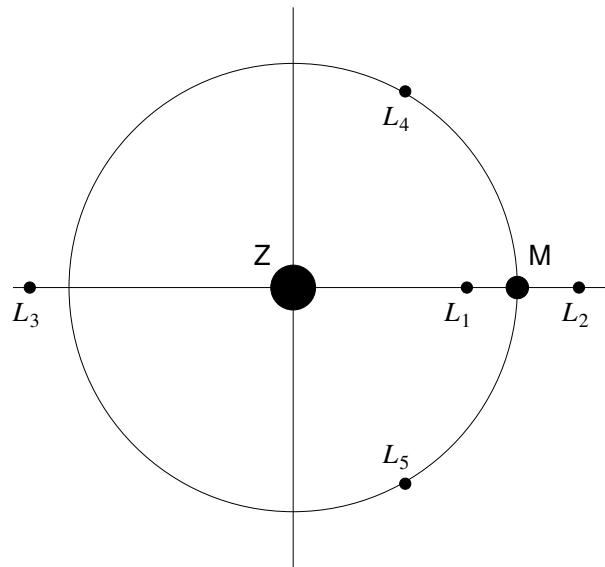
$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= -G \left[ \frac{M(x + \mu D)}{r_1^3} + \frac{m(x - \mu^* D)}{r_2^3} \right] + \Omega^2 x + 2\Omega \frac{dy}{dt} , \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= -G \left[ \frac{My}{r_1^3} + \frac{my}{r_2^3} \right] + \Omega^2 y - 2\Omega \frac{dx}{dt} , \end{aligned}$$

kde  $G = 6.67259 \times 10^{-11}$  m<sup>3</sup>kg<sup>-1</sup>s<sup>-2</sup> je gravitační konstanta,  $M = 5.974 \times 10^{24}$  kg je hmotnost Země,  $m = 7.348 \times 10^{22}$  kg,  $\mu^* = M/(m + M)$ ,  $\mu = m/(m + M)$ ,  $D = 3.844 \times 10^8$  m,  $d = 4.669 \times 10^6$  m,

$\Omega = 2.661 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  a  $r_1$  ( $r_2$ ) je vzdálenost satelitu od Země (Měsíce). Počáteční podmínky zní  $x(0) = 4.613 \times 10^8 \text{ m}$ ,  $y(0) = 0 \text{ m}$ ,  $v_x(0) = 0 \text{ m s}^{-1}$ ,  $v_y(0) = -1074 \text{ m s}^{-1}$ . Vypočtete odpovídající trajektorii různými metodami na numerické řešení soustav diferenciálních rovnic a prozkoumejte projevy numerických chyb.

#### 4.14 Lagrangeovy body soustavy Země-Měsíc

Použijte neinerciální soustavu zavedenou v úloze 4.13 a prozkoumejte stabilitu Lagrangeových bodů soustavy Země-Měsíc. Lagrangeovy body jsou takové body, ve kterých se kompenzují gravitační síly Země a Měsíce a odstředivá síla. Vypočtete několik trajektorií zkušebních těles se zanedbatelnou hmotností pohybujících se okolo jednotlivých Lagrangeových bodů  $L_1$  až  $L_5$  a posuďte tak jejich stabilitu. Parametry soustavy Země-Měsíc převezměte z příkladu 4.13.



#### 4.15 Náraz asteroidu

Astronom zaznamenal neznámý asteroid mířící velkou rychlostí do vnitřní části sluneční soustavy. V poledne 1.1.2001 GMT se asteroid nacházel na souřadnicích  $(x, y, z) = (-5.206 \times 10^{11}, 3.124 \times 10^{11}, 6.142 \times 10^{10}) \text{ m}$  a měl rychlost  $(v_x, v_y, v_z) = (11060, -9817, -744) \text{ m s}^{-1}$  (vše vztaženo k těžišti sluneční soustavy). Využijte data z následující tabulky k simulaci pohybu těles ve sluneční soustavě včetně asteroidu a předpovězte, která planeta je jím ohrožena. Kdy nastane případný dopad?

těleso	hmotnost [kg]	$x$ [m]	$y$ [m]	$z$ [m]	$v_x$ [m/s]	$v_y$ [m/s]	$v_z$ [m/s]
Slunce	1.9891e30	-7.0299e8	-7.5415e8	2.38988e7	14.1931	-6.9255	-0.31676
Merkur	3.302e23	2.60517e10	-6.1102e10	-7.3616e9	34796.0	22185.2	-1379.78
Venuše	4.8685e24	7.2129e10	7.9106e10	-3.0885e9	-25968.7	23441.6	1819.92
Země	5.9736e24	-2.91204e10	1.43576e11	2.39614e7	-29699.8	-5883.3	0.050215
Mars	6.4185e23	-2.47064e11	-1.03161e10	5.8788e9	1862.73	-22150.6	-509.6
Jupiter	1.8986e27	2.67553e11	7.0482e11	-8.911e9	-12376.3	5259.2	255.192
Saturn	5.9846e26	6.999e11	1.16781e12	-4.817e10	-8792.6	4944.9	263.754
Uran	1.0243e26	2.65363e12	-3.6396e12	1.37957e10	4356.6	3233.3	-166.986
Neptun	8.6832e25	2.2993e12	-1.90411e12	-3.6864e10	4293.6	4928.1	-37.32
Pluto	1.27e22	-1.31126e12	-4.2646e12	8.3563e11	5316.6	-2484.6	-1271.99

Údaje v tabulce se vztahují k 1. lednu 2001 a poledni GMT, počátek souřadné soustavy leží v těžišti sluneční soustavy.

## 4.16 Precese perihélia Merkuru

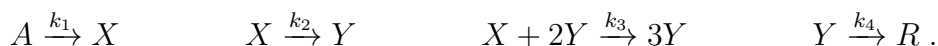
V případě, kdy jsou kinetické a potenciální energie těles dostatečně malé ve srovnání s jejich klidovými hmotnostmi, předpovídá Einsteinova obecná teorie relativity jen malou opravu Newtonova gravitačního zákona. Budeme zkoumat problém pohybu objektu o zanedbatelné hmotnosti v centrálním poli hmotného objektu o hmotnosti  $M$ . Zavedeme k tomu polární souřadnice  $r$  a  $\varphi$ . Časová závislost  $r(t)$  splňuje diferenciální rovnici

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{L^2}{r^3} - GM \left( \frac{1}{r^2} + \frac{3L^2}{c^2 r^4} \right),$$

kde  $L$  je velikost měrného momentu hybnosti  $L = r^2\dot{\varphi}$ . Odvoďte uvedenou rovnici bez relativistické opravy. Najděte trajektorii planety Merkur. Jako počáteční podmínky zvolte  $r(0) = 46.00 \times 10^6$  km,  $\dot{r}(0) = 0$ ,  $L = 2.713 \times 10^{15}$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>. Hmotnost Slunce je  $M = 1.9891 \times 10^{30}$  kg. Srovnajte relativistický výsledek s trajektorií získanou v nerelativistickém přiblížení.

## 4.17 Exotermická reakce

Exotermické reakce se někdy zdají býti autokatalytickými, protože uvolňované teplo urychluje průběh reakce. Budeme uvažovat o provázaných chemických reakcích, jejichž kinetika je popsána schématem



Koncentrace látek  $X$  a  $Y$  za předpokladu konstantní koncentrace látky  $A$  jsou tedy řízeny soustavou diferenciálních rovnic

$$\frac{d[X]}{dt} = k_1[A] - k_2[X] - k_3[X][Y]^2, \quad \frac{d[Y]}{dt} = k_2[X] + k_3[X][Y]^2 - k_4[Y].$$

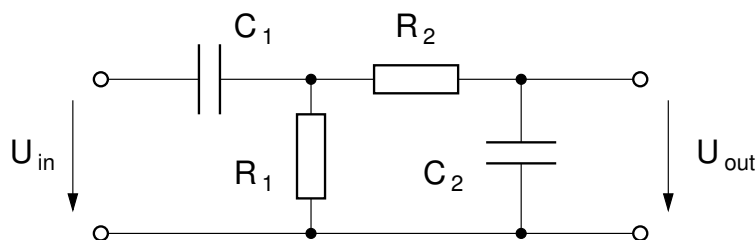
Hodnoty reakčních konstant jsou  $k_1(T_0) = 1 \times 10^{-6}$ ,  $k_2 = 5.5 \times 10^{-7}$ ,  $k_3 = 1$ ,  $k_4 = 1 \times 10^{-4}$ , počáteční podmínky  $[X](t=0) = [Y](t=0) = 0$ . Jednotka času je 1 s, jednotka koncentrace je 1 mol l<sup>-1</sup>. Tento systém sám o sobě vykazuje zajímavé oscilatorické chování, o němž se přesvědčte numerickým řešením. Nyní učiňme konstantu  $k_1$  teplotně závislou podle vztahu  $k_1(T) = k_1(T_0) \exp(\Theta)$ , kde  $\Theta$  je bezrozměrná aktivační energie hovící diferenciální rovnici

$$\frac{d\Theta}{dt} = \gamma[Y] - \beta\Theta.$$

Použijte hodnoty  $\gamma = 10$ ,  $\beta = 0.5$ ,  $\Theta(t=0) = 0$  a prozkoumejte průběh reakce pro různé koncentrace  $[A] = a$  mol l<sup>-1</sup> s  $a = 0.6000, 0.6500, 0.6870, 0.6970$  a  $0.7080$ .

## 4.18 Pásmová propust

Následující obrázek obsahuje schéma pásmové propusti. Parametry součástek mají hodnoty  $R_1 = R_2 = 10$  k $\Omega$ ,  $C_1 = 15$  nF a  $C_2 = 4.7$  nF.





Na vstup propusti vložme časově závislé napětí ve tvaru tzv. chirpu

$$U_{\text{in}}(t) = U_0 \cos\left(\frac{\omega_0 t^2}{2T}\right).$$

Jak se lze přesvědčit rozvojem argumentu jako funkce času  $t$ , je okamžitá frekvence signálu  $f(t) = \omega_0 t/T$  a propust tak postupně zkoumáme na vyšší a vyšší frekvenci. Sestavte soustavu diferenciálních rovnic popisujících obvod propusti a najděte časový průběh napětí  $U_{\text{out}}(t)$  při aplikaci výše uvedeného vstupního napětí. Parametr  $\omega_0/T$  a čas integrace zvolte tak, abyste na výstupu získali frekvenční odezvu pásmové propusti s dostatečným rozlišením. S předpokladem harmonického průběhu napětí najděte metodou komplexních impedancí frekvenční závislost  $|U_{\text{out}}/U_{\text{in}}|$  a porovnejte s výsledkem předchozího postupu.

## 4.19 Rabiho oscilace

Uvažujme o dvouhladinovém kvantověmechanickém systému, který je popsán časově závislým hamiltoniánem

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1 & V(t) \\ V(t) & E_2 \end{pmatrix}, \quad V(t) = V_0 \cos \omega t.$$

Takovým systémem může být například atom nebo molekula v poli laseru. Stav systému zapsaný jako superpozice  $C_1|1\rangle + C_2|2\rangle$  se řídí systémem diferenciálních rovnic

$$i\hbar\dot{C}_1 = E_1 C_1 + V(t)C_2, \quad i\hbar\dot{C}_2 = V(t)C_1 + E_2 C_2.$$

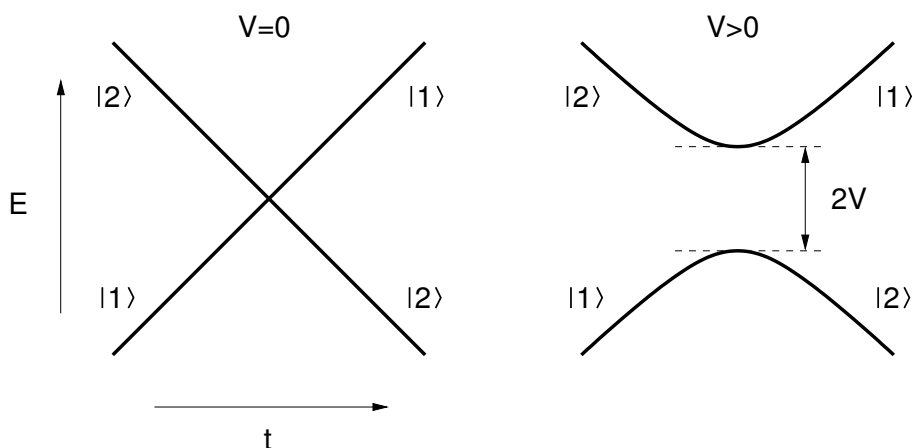
Řešením těchto rovnic najděte časový průběh pravděpodobností nalezení systému ve stavu  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$  pro různé kombinace  $\omega$ , charakteristické frekvence potenciálu  $f = V_0/\hbar$  a frekvence přechodu  $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ . Měli byste pozorovat tzv. Rabiho oscilace<sup>1</sup> s frekvencí  $\Omega_R = \sqrt{(\omega - \omega_{12})^2 + f^2}$ . Jako počáteční podmínku volte  $C_1(0) = 1$ ,  $C_2(0) = 0$ .

## 4.20 Landauův-Zenerův model

LZ model popisuje přechody mezi interagujícími hladinami, jejichž rozštěpení se mění lineárně s časem. V určitých případech je tento model vhodným nástrojem pro kvantověmechanický popis meziatomových nebo mezimolekulových srážek. Hamiltonián modelu vyjádřený v bázi stavů  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$  je prostý:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Delta(t) & V \\ V & +\frac{1}{2}\Delta(t) \end{pmatrix}, \quad \Delta(t) = at.$$

Jeho energiové schéma jako funkce času je znázorněno následujícím obrázkem.



<sup>1</sup>Isidor Isaac Rabi (1898-1988) byl židovský fyzik původem z Haliče. V roce 1944 obdržel Nobelovu cenu za jadernou magnetickou rezonanci.

Řešením soustavy diferenciálních rovnic pro koeficienty v superpozici  $C_1|1\rangle + C_2|2\rangle$  najdete pro různé hodnoty parametrů  $\alpha$  a  $V$  časovou závislost pravděpodobnosti přechodu do stavu  $|2\rangle$ , nachází-li se systém v čase  $t = -\infty$  ve stavu  $|1\rangle$ . Porovnejte výslednou pravděpodobnost s dále uvedenými výsledky.

V adiabatické limitě zůstává systém neustále v základním stavu svého Hamiltoniánu a tedy  $P \rightarrow 1$ . V limitě rychlé srážky lze poruchovou teorií odvodit pro  $P$

$$P = \frac{2\pi V^2}{\hbar\alpha}.$$

Landau a Zener našli univerzální výraz, který platí jak pro rychlé, tak i pro pomalé srážky

$$P_{LZ} = 1 - \exp\left(-\frac{2\pi V^2}{\hbar\alpha}\right).$$

Pozn.: Počítejte v jednotkách, kde  $\hbar = 1$ .

## 4.21 Chandrasekharova mez

Bílý trpaslík je extrémně hustý pozůstatek jádra hvězdy o nepříliš vysoké hmotnosti, ve kterém již neprobíhají termojaderné reakce. Před úplným gravitačním kolapsem jej chrání tlak degenerovaného elektronového plynu vyplývající z Pauliho principu. Překročí-li hmotnost bílého trpaslíka určitou mez, nestačí již Pauliho tlak kompenzovat gravitaci a trpaslík exploduje jako supernova. Kritickou hmotnost odvodil Subrahmanyan Chandrasekhar (1910-1995) v roce 1930 při plavbě z Indie do Anglie, kde poté zahájil své doktorské studium na univerzitě v Cambridgi. Zejména za tento objev pak v roce 1983 obdržel Nobelovu cenu.

V této úloze najdete radiální profil hustoty bílého trpaslíka, závislost jeho poloměru na hmotnosti a výše popsanou kritickou hmotnost označovanou jako Chandrasekharova mez.

Předpokládejme, že hustoty elektronů, protonů a neutronů jsou stejné, a zavedme  $n(r)$  jako sféricky symetrickou hustotu jednoho druhu částic. Hustota hmoty bílého trpaslíka pak činí přibližně  $\rho(r) = 2m_p n(r)$ , kde  $m_p$  je hmotnost protonu. Gravitační tlak závislý na vzdálenosti od jádra  $r$  je dán diferenciální rovnicí

$$\frac{dp}{dr} = -\frac{Gm\rho}{r^2},$$

kde  $m(r)$  je úhrnná hmotnost materiálu trpaslíka nacházejícího se pod poloměrem  $r$ . Tu lze získat řešením diferenciální rovnice

$$\frac{dm}{dr} = 4\pi r^2 \rho.$$

Gravitační tlak je v rovnováze právě vykompenzován Pauliho tlakem  $p_{\text{Pauli}}$ , který je závislý na elektronové hustotě  $n$ . S využitím kompresibility degenerovaného elektronového plynu  $\chi = dn/dp_{\text{Pauli}}$  (opět určená  $n$ ) lze první diferenciální rovnici převést na praktický tvar

$$\frac{d\rho}{dr} = -2m_p \chi \frac{Gm\rho}{r^2}.$$

Odhad kompresibility elektronového plynu lze nejsnáze získat použitím Sommerfeldova modelu neinteragujících elektronů s relativistickou kinetickou energií  $E = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2}$ , kde  $p = \hbar k$ . Vyjde

$$\chi = \frac{3}{m_e c^2} \frac{\sqrt{1 + x_F^2}}{x_F^2}, \quad \text{kde } x_F = \frac{\hbar k_F}{m_e c}.$$

Řešením soustavy diferenciálních rovnic pro  $\rho(r)$  a  $m(r)$  najdete radiální profil hustoty bílého trpaslíka. Soustavu řešte jako počáteční úlohu s  $\rho(0) = \rho_0$ ,  $m(0) = 0$  a pro různé hustoty  $\rho_0$  (např.

v rozsahu  $10^6 - 10^{16} \text{ kg m}^{-3}$ ) najděte poloměr trpaslíka  $R$  (tedy takové  $r$ , kde hustota právě klesne na nulu) a jeho hmotnost  $M$ . Jak zjistíte, hmotnost nemůže překročit asi 1.4 násobek hmotnosti Slunce.

Pozn.: Při výpočtu je vhodné používat relativní jednotky vztažené k průměrnému poloměru Slunce  $R_\odot = 0.696342 \times 10^9 \text{ m}$ , hmotnosti Slunce  $M_\odot = 1.9891 \times 10^{30} \text{ kg}$  a hustotě Slunce  $\rho_\odot$ .

## 5 Soustavy lineárních rovnic

### 5.1 Prokládání dat polynomem •

Najděte způsob, jak stanovit koeficienty  $a_0, a_1, \dots, a_N$  polynomu stupně  $N$ ,  $P_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n x^n$ , který nejlépe vystihuje soubor  $M$  datových bodů  $\{x_j, y_j\}_{j=1}^M$  ve smyslu nejmenších čtverců, tj.  $\sum_{j=1}^M [y_j - P_N(x_j)]^2$  je minimální. Jako konkrétní aplikaci zvolíme vývoj populace USA. Počty obyvatel v letech 1900-1970 udává následující tabulka:

1900	75994575	1940	131669275
1910	91972266	1950	150697361
1920	105710620	1960	179323175
1930	122775046	1970	203235298

Proložte tato data polynomy různých stupňů a posuďte, do jaké míry vystihují časový trend. Extrapolovaný současný počet obyvatel porovnejte se skutečnou hodnotou. Odhad počtu obyvatel USA v roce 2012 činí 315 miliónů.

### 5.2 Extrapolace energie základního stavu Heisenbergova řetízku

Při řešení mnohačasticových kvantově-mechanických problémů je mnohdy obtížné či nemožné dobrat se výsledku pro nekonečný systém, ačkoli pro nepříliš velké konečné systémy je snadno dostupný. Hulthén studoval v roce 1938 periodické jednorozměrné Heisenbergovy řetízky popsané Hamiltoniánem

$$\mathcal{H} = \sum_{j=0}^{N-1} \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1},$$

kde  $\hat{\mathbf{S}}_j$  je operátor spinu  $1/2$  na pozici  $j$  a pozice  $0$  je identická s pozicí  $N$ . Podařilo se mu získat energie základního stavu  $E_{\text{GS}}$  několika krátkých řetízků. Vyjádřeno pomocí energie na jednu pozici  $\varepsilon_N = E_{\text{GS}}/N$  a zaokrouhleno na čtyři místa:

$$\varepsilon_2 = -0.7500 \quad \varepsilon_4 = -0.5000 \quad \varepsilon_6 = -0.4671 \quad \varepsilon_8 = -0.4564 \quad \varepsilon_{10} = -0.4515$$

Předpokládejte, že energii základního stavu lze zapsat pomocí řady

$$\varepsilon_N = \varepsilon_\infty + \frac{c_1}{N} + \frac{c_2}{N^2} + \dots + \frac{c_l}{N^l} + \dots$$

Omezte se na členy s  $l \leq 4$  a najděte  $\varepsilon_\infty$ . Výsledek porovnejte s exaktním  $\varepsilon_\infty = \frac{1}{4} - \ln 2$ .

### 5.3 Gaussova předpověď polohy asteroidu Pallas

Carl Friedrich Gauss analyzoval pohyb asteroidu Pallas na základě následující tabulky závislosti pozorované deklinace  $x$  na rektascenzi  $\theta$ :

$\theta$ [°]	0	30	60	90	120	150	180	210	240	270	300	330
$x$ [']	408	89	-66	10	338	807	1238	1511	1583	1462	1183	804

(a) Proložte uvedené datové body funkcí

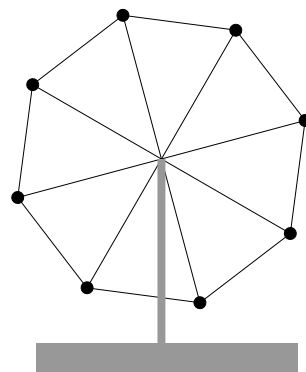
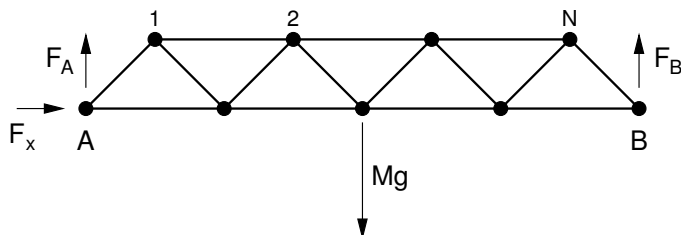
$$f(\theta) = a_0 + \sum_{k=1}^5 \left[ a_k \cos\left(\frac{2\pi k\theta}{360}\right) + b_k \sin\left(\frac{2\pi k\theta}{360}\right) \right] + a_6 \cos\left(\frac{2\pi k\theta}{360}\right),$$

v níž vystupuje dvanáct neznámých koeficientů  $a_k$  ( $k = 0, 1, \dots, 6$ ),  $b_k$  ( $k = 1, 2, \dots, 5$ ). K tomu bude třeba vyřešit lineární systém dvanácti rovnic, každému datovému bodu přísluší jedna. Zachyťte experimentální body a hladkou křivku  $f(\theta)$  ve společném grafu.

(b) Obdivujte píli a odhodlání C. F. Gausse, který výpočet provedl ručně. Můžete uctít jeho památku tím, že se vzdáte použití počítače.<sup>2</sup>

## 5.4 Zatížení nosníku

Nosník z obrázku je zatížen závažím o hmotnosti  $M$ , vaším úkolem je stanovit síly, kterými jsou natahovány případně stlačovány jednotlivé pruty nosníku. Prutů, o kterých předpokládáme, že mají zanedbatelnou hmotnost, je celkem  $4N - 1$ , což představuje  $4N - 1$  neznámých sil. V konstrukci nosníku se nachází  $2N + 1$  uzlů, pro které můžeme zformulovat  $4N + 2$  podmínek silové rovnováhy. Aby byl systém staticky determinovaný zbývá zapojit tři neznámé síly. Budou to vertikální síly  $F_A$ ,  $F_B$  od podložky v bodech  $A$ ,  $B$  a jedna horizontální síla působící v bodě  $A$ . Konec  $B$  nosníku je v horizontálním směru volný, což odpovídá např. situaci, kdy je položený na válečku. Řešte úlohu pro různá  $N$ . Jako rozšíření můžete vyzkoušet břemeno zavěsit asymetricky.



## 5.5 Ruské kolo

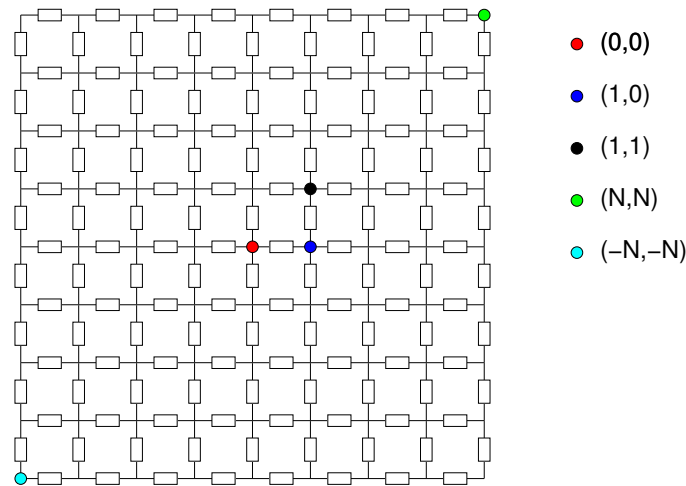
Na obrázku nahoře je schematicky zachyceno ruské kolo s  $N = 8$  kabinkami. Velmi zjednodušeně si jej představíme jako soubor kabinek o hmotnosti  $m$  spojených soustavou nehmotných prutů tak, že kabinky představují vrcholy pravidelného  $N$ -úhelníku. S každým prutem je spojena jedna neznámá síla, která prut natahuje či stlačuje. Přidáme navíc sílu působící v čepu (formálně dvě komponenty), a dostaneme tak  $2N + 2$  neznámých. Ty jsou určeny soustavou  $2(N + 1)$  rovnic vyplývajících z podmínky kompenzace sil v každém uzlu konstrukce. Najděte závislost síly namáhající loukotě a obvodové pruty na úhlu otočení kola. Úlohu řešte jako statickou.

## 5.6 Odporová síť

Uvažujme o pravidelné odporové síti z následujícího obrázku. Všechny rezistory v síti mají stejný odpor  $R$ . V místech křížení jsou vodiče spojeny. Realizací tohoto obvodu by mohlo být například pletivo vyrobené z vodivého materiálu. Najděte odpor mezi vybranými uzly sítě. K matematické formulaci problému použijte 1. Kirchhoffův zákon aplikovaný na jednotlivé uzly sítě, jimž

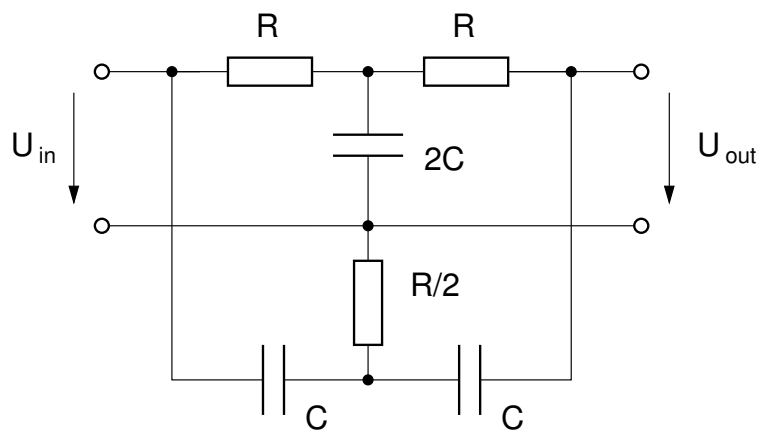
<sup>2</sup>C. F. Gauss ve skutečnosti užil obdobu FFT algoritmu, který výpočet značně zkrátí. FFT algoritmus byl znovuobjeven a dočkal se nezměrného rozšíření až o století a půl později. (c) Obdivujte genialitu C. F. Gausse.

přisoudíte neznámé potenciály  $\varphi_{i,j}$ ,  $i, j \in \{-N, -N + 1, \dots, +N\}$ . Proudová bilance bude nulová jen ve dvou vybraných uzlech, do jednoho bude zvnějšku vstupovat proud  $I$ , z druhého bude stejný proud vystupovat. Pro neznámé potenciály dostanete lineární systém rovnic, jehož vyřešením získáte napětí mezi vybranými uzly a tedy hledaný odpor. V limitě  $N \rightarrow \infty$  byste měli obdržet výsledek  $R_{(0,0)-(1,0)} = R/2$  a  $R_{(0,0)-(1,1)} = 2R/\pi$ .



## 5.7 Twin-T filtr

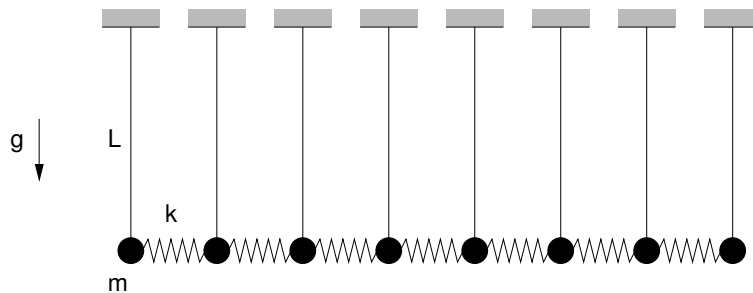
Twin-T filtr se používá pro odfiltrování rušivého signálu o určité pevné frekvenci. Aplikací Kirchhoffových zákonů ve vyobrazeném obvodu s komplexními impedancemi a následným řešením vzniklého lineárního systému najdete frekvenční závislost amplitudy výstupního napětí na vstupním. Řešte pro hodnoty  $R = 31.8 \text{ k}\Omega$  a  $C = 0.1 \mu\text{F}$ , pro které by filtr měl odstranit parazitní signály s frekvencí okolo 50 Hz.



## 6 Vlastní čísla a vlastní vektory matic

### 6.1 Spřažené oscilátory •

Najděte vlastní kmitové módy soustavy  $N$  kyvadel spojených pružinkami. Délka každého kyvadla je  $L$ , hmotnost závaží  $m$  a tuhost pružinek  $k$ . Dynamiku systému popisujte v přiblížení malých kmitů. Srovnajte numerické výsledky s vaším očekáváním pro limitní případy  $k \ll mg/L$  a  $k \gg mg/L$ . Analyzujte přitom jak vektory výchylek, tak spektrum vlastních frekvencí.



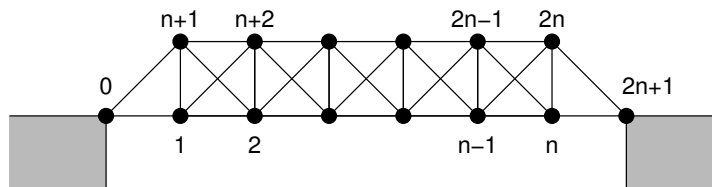
## 6.2 Kývání korálkového závěsu

Vyšetřete vlastní kmity jedné šňůrky korálkového závěsu, kterou si představíme jako soustavu  $N$  stejně hmotných kuliček (hmotnost  $m$ ) spojených provázky délky  $L$ . Visící útvar od celkové délce  $NL$  vykonává malé kmity kolem rovnovážné polohy. V limitě  $N \rightarrow \infty$  při konstantním  $NL = 1$  má tato úloha analytické řešení, se kterým můžete své výsledky srovnat. Výchylka  $n$ -tého módu je popsána  $J_0(k\sqrt{1-x})$ , kde  $x$  měříme od místa zavěšení a  $k$  je  $n$ -tý kořen rovnice  $J_0(k) = 0$ .  
Nápověda: Zavedeme-li souřadnou soustavu s počátkem v místě zavěšení a osou  $x$  mířící svisle dolů, platí pro vodorovné výchylky kuliček soustava diferenciálních rovnic

$$m \frac{d^2 y_j}{dt^2} = \frac{mg}{L} [(N-j)(y_{j+1} - y_j) + (N+1-j)(y_j - y_{j-1})] .$$

## 6.3 Vibrace mostu

Uvažujme o kmitech mostu znázorněného na obrázku. Skládá se z  $5n$  vzpěr spojených v  $2n$  volných bodech. Vodorovné a svislé vzpěry mají hmotnost  $m$ , diagonální vzpěry hmotnost  $m\sqrt{2}$ . Tuhost každé ze vzpěr je  $\kappa$ .



Označíme-li  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{y}$  vektory horizontálních a vertikálních výchylek z vyobrazené polohy (vektory mají  $2n$  komponent), lze harmonické kmitové módy mostu nalézt řešením vlastních problémů

$$M\mathbf{x} = \lambda K\mathbf{x} , \quad M\mathbf{y} = \lambda K\mathbf{y} .$$

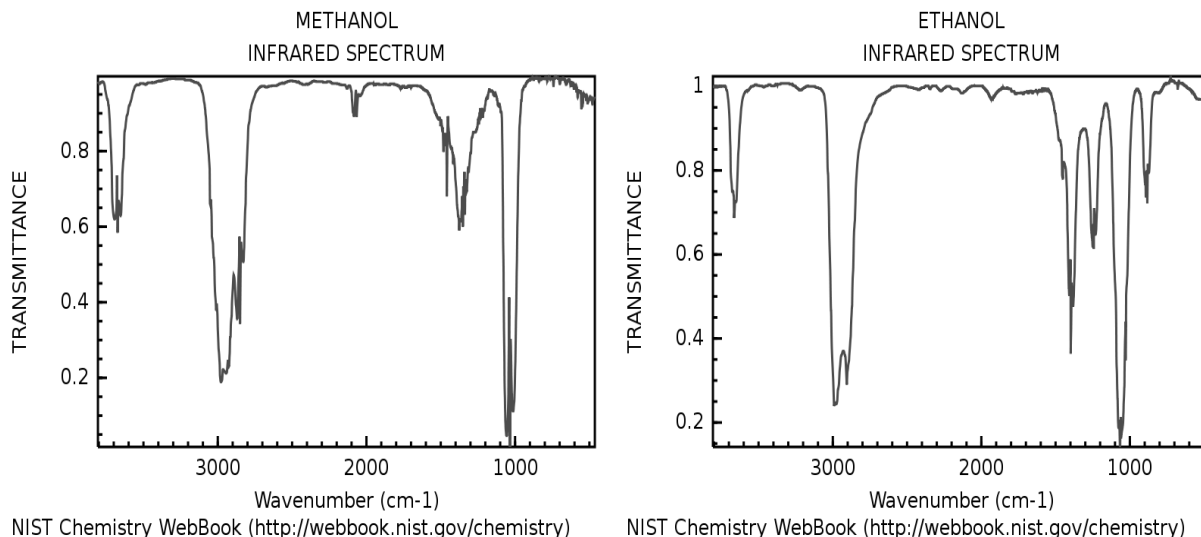
Zde  $M$  je diagonální matice s prvky  $M_{ii} = (3/2 + \sqrt{2})m$  kromě  $M_{11} = M_{nn} = (3 + \sqrt{2})m$  a  $M_{n+1,n+1} = M_{2n,2n} = (1 + \sqrt{2})m$ . Matice  $K$  má blokovou strukturu (bloky  $A$ ,  $B$  mají velikost  $N \times N$ )

$$K = \kappa \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} , \quad A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 5 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 5 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix} , \quad B = \begin{pmatrix} -1 & -1 & & & \\ -1 & -1 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & -1 & -1 \\ & & & -1 & -1 \end{pmatrix} .$$

Frekvence vibrací jsou  $\omega = \sqrt{\lambda}$ . Najděte několik nejnižších módů mostu a příslušné frekvence.

## 6.4 Vibrace molekuly metanolu a její infračervené spektrum

Vyšetřete vlastní kmity molekuly metanolu  $\text{CH}_3\text{OH}$ . Geometrii vazeb a výraz pro harmonický potenciál spojený s deformacemi vazeb lze najít v článku A. Serrallach, R. Meyer, Hs. H. Günthard, *Journal of Molecular Spectroscopy* **52**, 94-129 (1974). Přiřaďte nejvýraznější absorpční struktury v infračerveném spektru metanolu vlastním módům kmitů molekul a interpretujte rozdíly v infračervených spektrech metanolu a etanolu.



## 6.5 Lineární kvantová jáma – řešení variační metodou

Variační metodou najděte základní stav a několik nejnižších excitovaných stavů lineární kvantové jámy s potenciálem  $V(x) = a|x|$ . Jako zkušební funkci zvolte superpozici  $\Psi(x) = \sum_{n=0}^N c_n \Psi_n(x)$  vlnových funkcí vlastních stavů harmonického oscilátoru

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sigma \sqrt{\pi}} H_n\left(\frac{x}{\sigma}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

s vhodně zvoleným koeficientem  $\sigma$  a počtem bázových vektorů  $N$ . Koeficienty  $c_n$  najdete diagonalizací matice hamiltoniánu vyjádřeného v bázi  $\Psi_n(x)$ .

## 6.6 Pásová struktura 1D krystalu

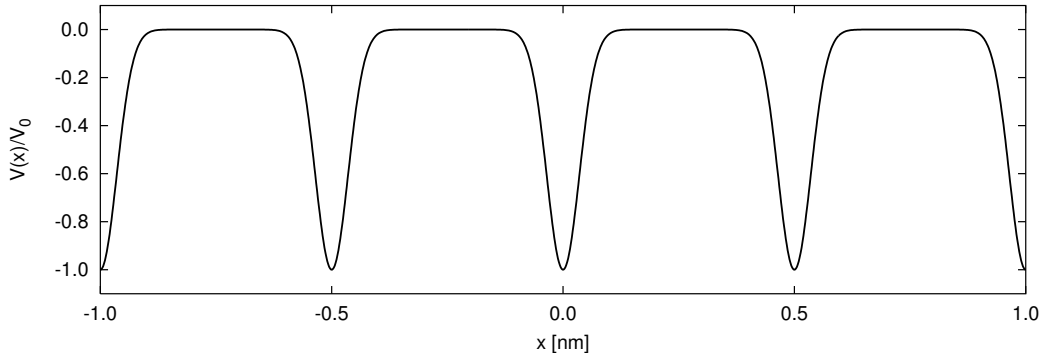
Metodou rozvoje do rovinných vln najděte vlastní energie elektronu v jednodimenzionálním potenciálu s periodou  $a$  zadaném funkcí

$$U(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x - na)^2}{\sigma^2}\right],$$

jehož Fourierovy složky jsou

$$U_G = -V_0 \sqrt{\pi} \frac{\sigma}{a} \exp\left(-\frac{\sigma^2 G^2}{4}\right), \quad G = \frac{2\pi n}{a}.$$

Z vlastních energií pro dostatečný počet Blochových vektorů v 1. Brillouinově zóně sestavte pásově schéma. Při numerickém řešení použijte následující hodnoty parametrů:  $a = 0.5$  nm,  $\sigma = 0.1a$ . Srovnajte výsledky pro  $V_0 = 2$  eV a  $V_0 = 10$  eV s disperzními relacemi volných elektronů.



Pozn.: Při srovnávání je výhodné použít energii vztaženou na střední hodnotu potenciálu, tj.  $E - U_{G=0}$ .

## 6.7 Pásová struktura křemíku počítaná metodou pseudopotenciálu

V prvoprincipiálních výpočtech elektronové struktury pevných látek se obvykle nahrazuje skutečný krystalový potenciál tzv. pseudopotenciálem, který neobsahuje singulární příspěvek  $\propto 1/r$  v okolí jednotlivých atomů. To vede na zjednodušení vlnových funkcí v okolí jader (zde by se ve skutečnosti měly podobat atomovým orbitalům), v oblasti mezi atomy je však popis realistický a dává dobré výsledky pro pásovou strukturu. Pozvolný průběh pseudopotenciálu také vede na nízký počet jeho Fourierových komponent, což je výhodné z numerického hlediska.

S využitím níže zadaného pseudopotenciálu a metody rozvoje do rovinných vln najdete pásovou strukturu křemíku. Křemík má diamantovou strukturu, tedy fcc mřížku s dvouatomovou bází (atomy na relativních pozicích  $\mathbf{d}_{1,2}$  vzhledem k mřížovým vektorům  $\mathbf{R}$  fcc mřížky). Pseudopotenciál  $U_{\text{pseudo}}$  budeme považovat za součet příspěvků od jednotlivých atomů, jeho vyjádření pomocí Fourierových komponent  $U_{\mathbf{G}}^{(\text{at})}$  atomového pseudopotenciálu  $U_{\text{pseudo}}^{(\text{at})}$  je pak tvaru

$$U_{\text{pseudo}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{n=1,2} U_{\text{pseudo}}^{(\text{at})}(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}_n) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}}^{(\text{at})} [e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{d}_1} + e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{d}_2}] e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}},$$

kde  $\mathbf{G}$  probíhá vektory reciproké mřížky. Příspěvky od atomů jsou přibližně isotropní,  $U_{\mathbf{G}}^{(\text{at})}$  tak závisí pouze na  $G = |\mathbf{G}|$ . Strukturální faktor v hranaté závorce způsobí, že příspěvky od části  $\mathbf{G}$  vypadnou. Pro výpočet použijte hodnoty

$$U^{(\text{at})}(G = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}) = -1.525\text{eV}, \quad U^{(\text{at})}(G = \frac{2\pi}{a}\sqrt{8}) = 0.376\text{eV}, \quad U^{(\text{at})}(G = \frac{2\pi}{a}\sqrt{11}) = 0.493\text{eV}.$$

Vyjádríme-li Blochovu vlnu elektronu šířícího se krystalem ve tvaru  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \Psi_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$ , vede řešení jednočásticové Schödingerovy rovnice s potenciálem  $U_{\text{pseudo}}$  na vlastní problém

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 \Psi_{\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}'} U_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \Psi_{\mathbf{G}'} = E_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{G}}.$$

Jeho řešením vypočtete pásovou strukturu podél konvenční cesty  $\Gamma - X - W - L - \Gamma - K$ . Při numerickém řešení je přirozeně nutné soubor zapojených vektorů reciproké mřížky vhodně omezit, např. podmínkou  $|\mathbf{G}| \leq G_{\text{max}}$ .

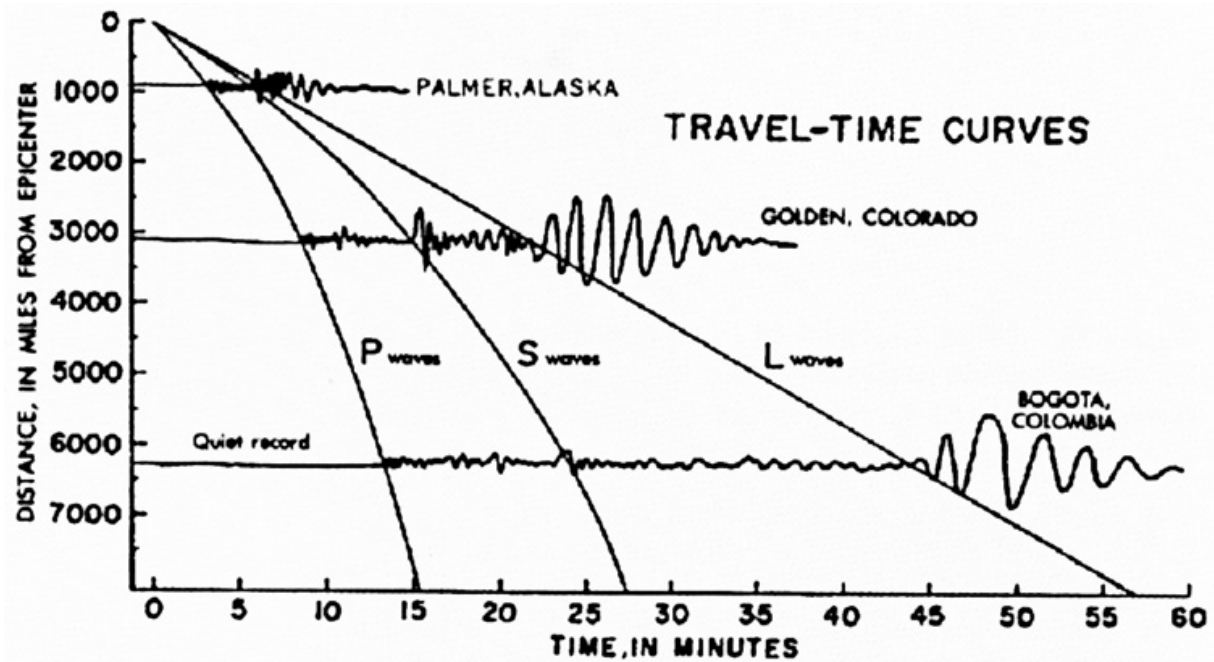
## 7 Soustavy nelineárních rovnic

### 7.1 Epicentrum zemětřesení

Na následujícím obrázku jsou záznamy ze seismografů tří pozorovacích stanic, které zachytily silné otřesy. Na záznamu je vidět projevy několika druhů vln odlišujících se hloubkou šíření pod



zemským povrchem. Omezíme se na povrchové L-vlny a pro jednoduchost budeme předpokládat, že se šíří konstantní rychlostí ve všech směrech stejnou. Ze znalosti zeměpisných poloh pozorovacích stanic a časů příchodu L-vln odečtených z obrázku určete polohu epicentra zemětřesení a rychlost šíření povrchových vln.



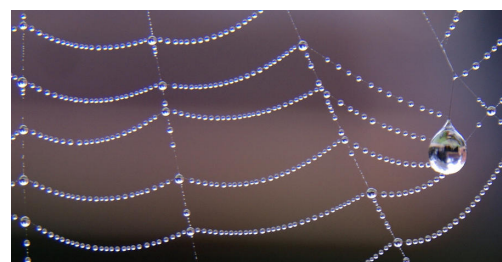
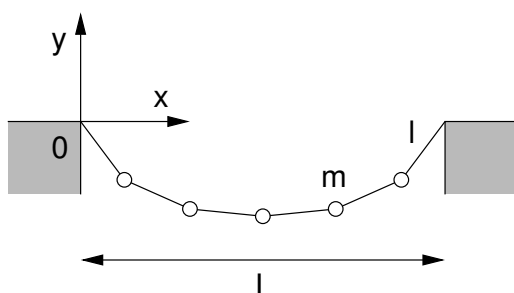
Převzato z Earthquake Information Bulletin. Vol. 2, No. 5, September - October, 1970

Pomůcka: Na uvedených vzdálenostech již nelze zanedbat křivost zemského povrchu a musíme užít sférickou geometrii. Označíme-li  $\theta$  zeměpisnou šířku (pozor, počítá se od rovníku) a  $\varphi$  zeměpisnou délku, pak vzdálenost dvou míst na povrchu koule s poloměrem  $R = 6371$  km spočteme pomocí vztahu

$$L = R \arccos [\cos \theta_1 \cos \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \sin \theta_1 \sin \theta_2] .$$

## 7.2 Pavoukova řetězovka

Na pavoukovo vlákno upevněné mezi dvěma body o souřadnicích  $(0,0)$  a  $(L,0)$  usedly kapky rosy. Každá z nich má stejnou hmotnost  $m$  a rozdělují vlákno na  $N$  stejných úseků délky  $l$ . Najděte rovnovážnou polohu vlákna s kapkami. Pro jednoduchost nahrad'te kapky hmotnými body. Prozkoumejte tvary prověšeného vlákna pro různé hodnoty  $Nl = L_0 > L$ . V limitě  $N \rightarrow \infty$  při konstantním  $L_0$  se bude numerické řešení blížit křivce  $y(x) = A[\cosh B(x-L/2) - \cosh BL/2]$ , kde  $A, B$  jsou parametry dané poměrem  $L_0/L$ . Toto analytické řešení úlohy o prověšeném lanu poprvé našli roku 1691 Gottfried Leibniz, Christiaan Huygens a Johann Bernoulli.



## 8 Obyčejné diferenciální rovnice s okrajovými podmínkami

### 8.1 Kvantová jáma

Metodou konečných diferencí vyřešte stacionární Schrödingerovu rovnici s jednorozměrným potenciálem

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \lambda(\lambda - 1) \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{\cosh^2 \alpha x} \right)$$

na intervalu  $[-L, L]$  s dostatečně velkým  $L$ . Najděte prvních několik vázaných stavů v jámě. V tomto případě lze okrajové podmínky zjednodušit na  $\Psi(\pm L) = 0$ . Porovnejte získané energie s exaktním řešením

$$E_n = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \left[ \frac{\lambda(\lambda - 1)}{2} - (\lambda - 1 - n)^2 \right].$$

### 8.2 Buben

Kmitání blány bubnu lze přibližně popsat vlnovou rovnicí vyjádřenou v polárních souřadnicích

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

s okrajovou podmínkou  $u(r = R, \varphi) = 0$ , kde  $R$  je poloměr bubnu. Položte  $c = 1$ ,  $R = 1$  a najděte kmitové módy blány. Hledejte je v separovaném tvaru  $u(r, \varphi) = \Psi(r)\Phi(\varphi)$  a rovnici pro  $\Phi(\varphi)$  vyřešte analyticky.

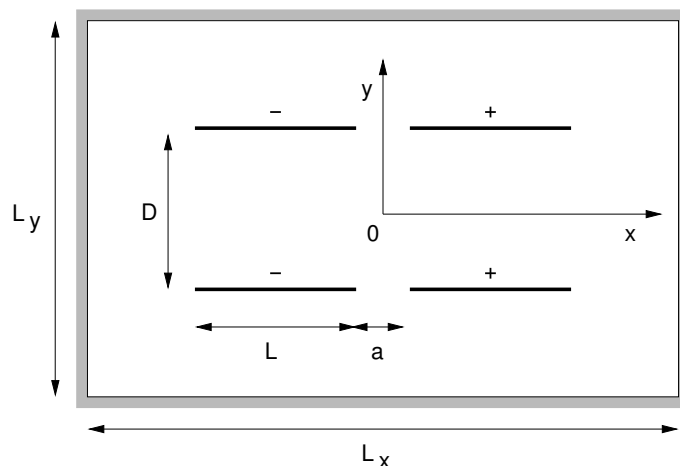
## 9 Parciální diferenciální rovnice

### 9.1 Elektrostatické pole kondenzátoru •

Řešením Laplaceovy rovnice s vhodnými okrajovými podmínkami najděte rozložení potenciálu v deskovém kondenzátoru. Pro jednoduchost uvažujte o kondenzátoru, jehož desky jsou v jednom směru dlouhé natolik, že se problém stává dvourozměrným. Výsledné pole můžete znázornit soustavou ekvipotenciálních čar nebo siločar elektrického pole. Prozkoumejte závislost na poměru šířky kondenzátoru a vzdálenosti desek.

### 9.2 Elektrostatická čočka

Řešením Laplaceovy rovnice s vhodnými okrajovými podmínkami najděte rozložení potenciálu v elektrostatické čočce načrtnuté níže. Jedna dvojice desek má potenciál  $-U/2$ , druhá dvojice  $+U/2$ . Ve směru kolmém na rovinu obrázku jsou desky čočky dlouhé natolik, že se problém stává dvourozměrným. Celá čočka je umístěna v obdélníkové nádobě, na stěnách nádoby požadujeme nulovost složky elektrického pole ve směru normály (tyto okrajové podmínky odpovídají potenciálové vaně z praktika). Výsledné pole znázorníte soustavou ekvipotenciálních čar.



### 9.3 Šíření tepla při přípravě pokrmů

(a) Pás vepřového sádla o tloušťce  $L = 2$  cm a počáteční teplotě  $5^\circ\text{C}$  je ponořen do vody teplé  $60^\circ\text{C}$ . Tepelná vodivost sádla je asi  $\alpha = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Jak dlouho potrvá, než se střed pásu ohřeje na teplotu  $55^\circ\text{C}$ ?

(b) Steak o teplotě  $T(x, 0) = 8^\circ\text{C}$  a tloušťce  $L = 3$  cm je položen na pánvi udržované na teplotě  $250^\circ\text{C}$ . Tepelná vodivost masa je asi  $\alpha = 3 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Vodorovné rozměry steaku jsou dostatečné na to, abychom při popisu šíření tepla mohli zanedbat okraje, horní stranu steaku lze považovat za tepelně izolovanou. Vypočtete časovou závislost rozložení teploty. Za jak dlouho bude steak dobře propečený, tj. jeho vnitřní teplota dosáhne alespoň  $65^\circ\text{C}$ ?

### 9.4 Vaření vejce

Sférické homogenní vejce je ponořeno do vařící vody s konstantní teplotou  $T_{\text{voda}} = 100^\circ\text{C}$ . Cílem je stanovit, jak dlouho potrvá, než bude vejce důkladně uvařeno. Abychom dosáhli koagulace žloutku a též zahubili bakterie salmonely, musí být výsledná teplota ve středu vejce  $80^\circ\text{C}$ . Užijeme následující charakteristiky vejce: měrná tepelná kapacita  $c = 3.7 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , hustota  $\rho = 1.038 \text{ g cm}^{-3}$ , tepelná vodivost  $\kappa = 5.4 \times 10^{-3} \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , poloměr  $R$  daný hmotností  $M$ . Ve sféricky symetrickém případě řešíme parciální diferenciální rovnici

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{c\rho}{\kappa} \frac{\partial T}{\partial t}$$

s okrajovou podmínkou  $T(R) = T_{\text{voda}}$ . Prozkoumejte závislost potřebného času na hmotnosti vejce  $M = 53 - 73$  g (střední a velká vejce) a počáteční teplotě  $T_0 = 4 - 21^\circ\text{C}$  (teplota v chladničce až pokojová teplota). Pro vybraný případ znázorněte časový průběh teplotního profilu a tepelného toku.

### 9.5 Elektroforéza

Elektroforéza je metoda separace různých typů iontů na základě jejich odlišné pohyblivosti v elektrickém poli. Uvažujme pro jednoduchost o jednorozměrném případě, kdy Fickův zákon difúze nabývá tvaru

$$j = -D \frac{\partial n}{\partial x} + Vn,$$

kde  $D$  je difúzní koeficient a  $V = \mu E$  je konstanta obsahující pohyblivost iontů  $\mu$  a intenzitu  $E$  působícího elektrického pole. Po dosazení do rovnice kontinuity  $\partial j / \partial x + \partial n / \partial t = 0$  dostaneme

parciální diferenciální rovnici popisující časový vývoj koncentračního profilu  $n(x, t)$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - V \frac{\partial n}{\partial x} .$$

Za předpokladu gaussovského profilu počáteční koncentrace v čase  $t = 0$ ,

$$n(x, t = 0) = \exp(-x^2/2\sigma^2) ,$$

simulujte difúzi pro různé hodnoty  $D$ ,  $V$  a  $\sigma$ .

## 9.6 Tunelový jev

Implementujte Crankovo–Nicholsonovo schéma pro řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice v jednorozměrném případě

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x, t) .$$

Najděte časový průběh vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti v situaci, kdy gaussovský vlnový balík se střední energií  $E = 0.5$  eV a prostorovou šířkou  $\sigma = 2$  nm dopadá na pravoúhlou bariéru o šířce  $a = 0.5$  nm a výšce  $V_0 = 1$  eV. Pro kontrolu můžete použít výraz pro pravděpodobnost průchodu bariérou

$$P = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right)^2 \sinh^2 \kappa a} , \quad \text{kde} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} .$$

Poměr ploch vymezených  $|\psi|^2$  odraženého a prošlého balíku by měl přibližně činit  $(1 - P)/P$ .