

F6150 Pokročilé numerické metody – zadání úloh

1. Rotace galaxie

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

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

příčemž 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.

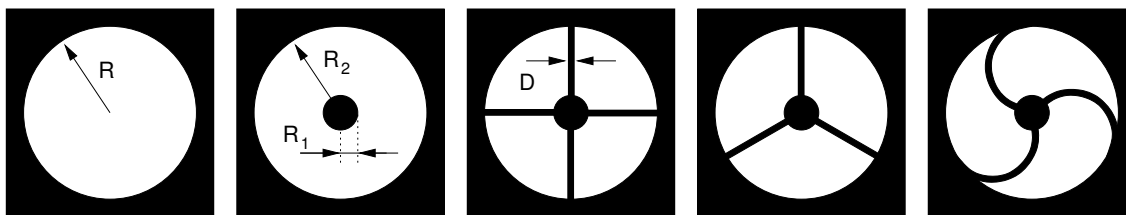
2. Difrakční jevy v teleskopu

Pomocí diskrétní Fourierovy transformace nalezněte 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.



3. 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

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

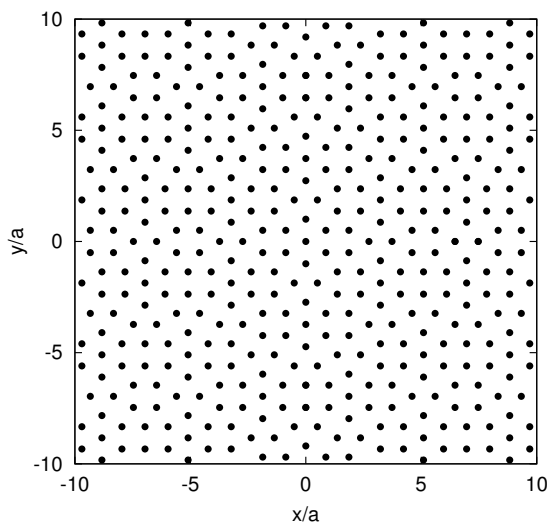
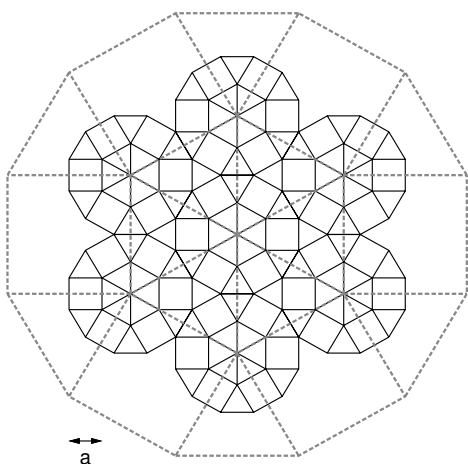
snadno vyčíslitelnou právě diskrétní Fourierovou transformací. Jako ukázkou možností tohoto postupu vypočtete hodnotu $\sqrt{2}$ na 4000 platných míst (jedna strana strojopisu). Využijte přitom iterační formuli

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

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

4. 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.



5. Thomsonův problém

Britský fyzik J. J. Thomson, objevitel elektronu, zformuloval v kontextu svého pudinkového modelu atomu následující úlohu: Na povrchu koule s jednotkovým poloměrem je rozmístěno N stejných bodových nábojů, které se mohou po povrchu volně pohybovat. Úkolem je nalézt jejich rovnovážnou konfiguraci minimalizací elektrostatické energie vzájemného odpuzování. Řešte tento problém numericky s využitím metod globální optimalizace. Najděte všechny rovnovážné konfigurace pro malá $N \leq 24$ a pokuste se získat i konfigurace pro větší $N = 32$ a $N = 72$. Referenční hodnoty energie pro ověření správnosti minimalizace lze najít na Wikipedii - https://en.wikipedia.org/wiki/Thomson_problem.

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 $2\pi^2$ 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 $E(k, A_1, A_2, B_1, B_2, C) = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ najděte 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. 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

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

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.

8. 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 dvourozměrném 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.

Vášim 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 najděte 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.