Metoda shootingu w 1D, metoda różnic skończonych, metoda Numerowa.

Tomasz Chwiej

8 października 2019

1 Równanie własne we współrzędnych cylindrycznych

Na zajęciach numerycznie rozwiążemy problem własny

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\Psi(\vec{r}) = E\cdot\Psi(\vec{r}) \tag{1}$$

we współrzędnych cylindrycznych w 2D tj. $(x,y)\rightarrow(r,\phi)$ stosując metodę shootingu. Równanie własne we współrzędnych cylindyrcznych ma postać:

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\phi^2}\right)\Psi(r,\phi) = E\cdot\Psi(r,\phi) \tag{2}$$

Najpierw stosujemy metodę separacji zmiennych podstawiając $\Psi(r,\phi) = R(r)\cdot e^{il\phi}$ w przedziale $r = 0\ldots L$, gdzie: moment pędu $l = 0,\pm1,\pm2,\ldots$. Otrzymujemy wówczas równane 1D dla zmiennej r

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l^2}{r^2}\right)R(r) = E\cdot R(r) \tag{3}$$

z warunkami brzegowymi:

- $R(r=L)=0$ (znikanie funkcji falowej na prawym brzegu obszaru obliczeniowego - cząstka nie wnika w barierę)
- $\partial R/\partial r|_{r=0} = 0 \iff l=0$
- $R(r=0)=0 \quad \iff l\neq 0$

Rozwiązania równania (3) są znane i wyrażają się poprzez funkcje Bessela pierwszego rodzaju: $R(r) = J_{|l|}(\alpha_{l,p}\cdot r/L)$. Współczynnik $\alpha_{l,p}$ to p-te zero funkcji Bessla i związane jest z energią zależnością:

$$E_{l,p} = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_{l,p}}{L}\right)^2 \tag{4}$$

Potrzebne nam w dalszej części zadania zera funkcji Bessla są następujące:

$$\begin{array}{llll} \alpha_{0,1}=2.4048 & \alpha_{0,2}=5.5200 & \alpha_{0,3}=8.6537 & \alpha_{0,4}=11.7915 \\ \alpha_{1,1}=3.8317 & \alpha_{1,2}=7.0155 & \alpha_{1,3}=10.1734 & \alpha_{1,4}=13.3236 \end{array}$$

Funkcje Bessla $J_0(r)$ oraz $J_1(r)$ (dla porównania z wynikiem numerycznym) można wygenerować przy użyciu procedur z Numerical Recipes: **bessj0(float r)** oraz **bessj1(float r)** - na serwerze TAURUS katalog **/opt/NR/numerical_recipes.c** lub **/opt/NR/numerical_recipes.f**.

2 Metoda różnic skończonych

Problem 1D zdefiniowany w równaniu (3) rozwiążemy najpierw metodą różnic skończonych, stosując ilorazy różnicowe:

$$\frac{\partial R}{\partial r} = \frac{R_{i+1}-R_{i-1}}{2\Delta r} \qquad \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} = \frac{R_{i+1}-2R_i+R_{i-1}}{(\Delta r)^2}$$

Po ich podstawieniu otrzymamy:

$$\left(\frac{1}{(\Delta r)^2}+\frac{1}{r_i\cdot 2\cdot\Delta r}\right)R_{i+1}=\left(\frac{2}{(\Delta r)^2}+\frac{l^2}{r_i^2}-2\cdot E\right)R_i+\left(-\frac{1}{(\Delta r)^2}+\frac{1}{r_i\cdot 2\cdot\Delta r}\right)R_{i-1} \tag{5}$$

Wprowadzamy siatkę równoodległych węzłów w przedziale $r\in[0,L]$. Węzły indeksujemy $i=0,1,2,\ldots,n$. przyjmujemy: $L=1$, $n=100$ oraz $\Delta r=0.01$.
Zadania do wykonania:

1. Sporządzić wykres $R_n=f(E)$ (wartość R dla ostatniego węzła) dla $l=0$ i przedziału energii $E\in[\Delta E,150]$ z krokiem $\Delta E=0.2$. Jako warunek brzegowy przyjąć: $R_0=R_1=1.0$ (zerowanie pochodnej). (30 pkt.)

2. Wykorzysując pętlę po energii, jeśli dla dwóch kolejnych wartości energii zajdzie przypadek

$$R_n(E)\cdot R_n(E+\Delta E)<0 \tag{6}$$

   czyli w tym przedziale znajduje się zero funkcji $R(r)$ - należy zastosować metodę siecznych do wyznaczenia tego zera. Szukamy czterech kolejnych zer $\alpha_{0,1},\ldots,\alpha_{0,4}$ i odpowiadających im energii. Wartości energii, analityczne i numeryczne, zapisać do pliku w celu porównania. (20 pkt.)
   Wzór iteracyjny dla metody siecznych:

$$x^{k+1}=x^k-\frac{f(x^k)(x^k-x^{k-1})}{f(x^k)-f(x^{k-1})}\Longrightarrow E^{k+1}=E^k-\frac{R_n^k(E^k-E^{k-1})}{R_n^k-R_n^{k-1}} \tag{7}$$

   gdzie: dolny indeks n oznacza położenie na siatce przestrzennej, a górny k to numer iteracji. Iterację prowadzimy dopóki spełniony jest warunek $|E^k-E^{k-1}|>10^{-6}$.

3. Dla znalezionych czterech rozwiązań numerycznych $R_{num,l}(r)$ proszę policzyć błąd globalny rozwiązania $\Delta R(r)=R_{dok,l}(r)-R_{num,l}(r)$ i narysować je na jednym wykresie. (20 pkt.)

Uwaga: aby ułatwić sobie pracę, do wyznaczenia $R_{num}(r)$ proszę napisać oddzielną procedurę/metodę, do której przekazujemy zestaw parametrów:

$$void\ f\_diff(int\ l, float\ \Delta\ r, float\ E, float\ R[])$$

- procedura powinna zwracać R_{num} w tablicy $R[]$.

3 Metoda Numerova

Do rozwiązania problemu (3) zastosujemy metodę Numerowa. Wymaga ona, aby w równaniu nie występowała pierwsza pochodna. Usuwamy ją dokonując podstawienia $R(r)=U(r)/\sqrt{r}$, wówczas (3) transformujemy do postaci:

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}+\frac{1-4l^2}{4r^2}U\right)=E\cdot U \tag{8}$$

która w metodzie Numerova

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}=-\left(2E+\frac{1-4l^2}{4r^2}\right)=-g(r) \tag{9}$$

po dyskretyzacji jest następująca:

$$\left(1+\frac{\Delta r^2}{12}g_{i+1}\right)U_{i+1} = 2\left(1-\frac{5\Delta r^2}{12}g_i\right)U_i-\cancel{\left(1+\frac{\Delta r^2}{12}g_{i-1}\right)U_{i-1}},\qquad i=1 \tag{10}$$

$$\left(1+\frac{\Delta r^2}{12}g_{i+1}\right)U_{i+1} = 2\left(1-\frac{5\Delta r^2}{12}g_i\right)U_i-\left(1+\frac{\Delta r^2}{12}g_{i-1}\right)U_{i-1},\qquad i=2,\ldots,n-1 \tag{11}$$

Zadania do wykonania: powtarzamy rachunki z poprzedniego zadania (podmieniając tylko metodę/procedurę) dla $l=1$. (30 pkt.)

Uwaga 0: Jako warunek na lewym brzegu przyjąć: $U_0=0$ [ze względu na osobliwość w g_0 musimy ręcznie skasować wyraz w równaniu (10)], $U_1=1$ dla dowolnego l (u nas $l=0,1$).
Uwaga 1: Po znalezieniu rozwiązania $U(r)$, rysując błąd globalny należy pamiętać aby porównywać docelową

funkcję $R(r) = U(r)/\sqrt{r}$ z rozwiązaniem analitycznym. Dla $r = 0$ przyjmujemy: $R_0 = R_1 = 1/\sqrt{\Delta r}$ jeśli $l = 0$ lub $R_0 = 0$ dla $l \neq 0$.

Uwaga 2: Rozwiązania trzeba unormować (mogą mieć różne amplitudy). Normujemy tak aby:

$$\int_0^L |R_{num}(r)|^2 \cdot r \cdot dr = \int_0^L |J_{1,p}(r)|^2 \cdot r \cdot dr = 1 \tag{12}$$

a dopiero później liczymy błąd globalny. (W poprzednim zadaniu, met. różnic skończonych, normalizacja była wymuszona poprzez narzucenie warunku $R_0 = R_1 = 1$ - jak dla funkcji Bessel'a.)