

Algebra Symboliczna

Wykład VIII

Andrzej Odrzywólek

Instytut Fizyki, Zakład Teorii Względności i Astrofizyki

28.11.2007, środa, 13:15

dr Andrzej Odrzywołek

pokój 447, IV piętro

E-mail: odrzywolek@th.if.uj.edu.pl

Wykład: środy 13.15-15.00 s. 128

Ćwiczenia: piątki 10.30-12.00

Konsultacje: środy ~11-13, czwartki 10-12

WWW: <http://ribes.if.uj.edu.pl/alsymb/>

R. r. w fizyce jako sposób formułowania problemów

W mechanice klasycznej szukanyimi funkcjami są współrzędne określające *stan* układu w danej chwili czasu. Czas jest jedyną zmienną po której różniczkujemy. Ilość szukanych funkcji czasu określamy mianem ilości stopni swobody układu.

- dla rzutu w polu grawitacyjnym mamy (na ogół) 3 szukane funkcje określające położenie ciała w przestrzeni np: $x(t), y(t), z(t)$
- pozostałe wielkości fizyczne jak np. prędkość lub przyspieszenie są wielkościami *pochodnymi*, mogą zostać wyliczone z położenia poprzez proste operacje matematyczne:

$$v_x(t) = \frac{dx(t)}{dt} \equiv x'(t) \equiv \dot{x}(t),$$

$$a_x(t) = \frac{dv_x(t)}{dt} = \frac{d^2x(t)}{dt^2} \equiv x''(t) \equiv \ddot{x}(t)$$

R. r. w fizyce jako sposób formułowania problemów

- funkcje $v_x(t)$, $v_y(t)$, $v_z(t)$, $a_x(t)$, $a_y(t)$, $a_z(t)$ *nie pojawiają się* w równaniach różniczkowych opisujących problem
- zamiast nich należy podstawić odpowiednie wyrażenia na pochodne np: $v_y(t) = y'(t)$, $a_z(t) = z''(t)$ itd.
- lub (alternatywnie) wyrażenia te dodać jako *dodatkowe równania* np:

$$v_x(t) = x'(t), \quad a_x = v'_x(t)$$

itd.

- ilość równań musi być równa ilości szukanych funkcji
- wzory typu:

$$v_z[t] \rightarrow -gt + V0\text{Sin}[\alpha]$$

nie stanowią sformułowania problemu ale jego rozwiązanie!

Spadek swobodny w polu grawitacyjnym

Poprawne sformułowanie problemu i jego rozwiązanie

- 1 Ciało spada pionowo w dół
- 2 ruch opisuje II zasada dynamiki Newtona: $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$
- 3 siła działająca na ciało: $\mathbf{F} = \{0, 0, -mg\}$
- 4 układ posiada jeden stopień swobody: wysokość nad „ziemią” np. $h[t]$ – jedna szukana funkcja jednej zmiennej : czasu t
- 5 równanie ruchu wyrażone przez położenie:

$$m h''[t] == -m g$$

- 6 warunki początkowe wyrażone przez położenie (ciało rzucone z wysokości H z prędkością V_0 pionowo do góry):

$$h[0] == H, \quad h'[0] = V_0$$

- 7
- `DSolve[{ m h''[t] == - m g, h[0] == H, h'[0] = V0 }, h[t], t]`

Sposób II

- 1 układ zapisujemy przy użyciu położenia $h[t]$ i prędkości $v[t]$ – *dwie* szukane funkcje *jednej* zmiennej : czasu t
- 2 równanie ruchu wyrażone przez położenie i prędkość:

$$m v'[t] == -m g, \quad v[t] = h'[t]$$

- 3 warunki początkowe wyrażone przez położenie (ciało rzucone z wysokości H z prędkością V_0 pionowo do góry):

$$h[0] == H, \quad v[0] = V_0$$

- 4 `DSolve[{ m v'[t] == - m g, v[t] == x'[t], h[0] == H, v[0] == V_0 }, { h[t], v[t] }, t]`

Sposób III

- 1 układ zapisujemy przy użyciu położenia $h[t]$, prędkości $v[t]$ i przyspieszenia $a[t]$ – trzy szukane funkcje *jednej* zmiennej : czasu t
- 2 równanie ruchu wyrażone przez położenie, prędkość i przyspieszenie:

$$m a[t] == -m g, \quad a[t] == v'[t], \quad v[t] = h'[t]$$

- 3 warunki początkowe wyrażone przez położenie (ciało rzucone z wysokości H z prędkością V_0 pionowo do góry):

$$h[0] == H, \quad v[0] = V_0$$

- 4 `DSolve[{ m a[t] == - m g, a[t]==v'[t], v[t] == h'[t], h[0] == H, v[0] == V0 }, { h[t], v[t], a[t] }, t]` lub `DSolve[{ m a[t] == - m g, a[t]==h''[t], v[t] == h'[t], h[0] == H, v[0] == V0 }, { h[t], v[t], a[t] }, t]`

Spadek swobodny w polu grawitacyjnym

Sposób IV: formalizm Hamiltona

- 1 wyrażamy energię kinetyczną i potencjalną przez położenie i pęd:

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad V = mgh$$

- 2 tworzymy *Hamiltonian*: $H = E + V$
- 3 wypisujemy równania ruchu Hamiltona wyrażone przez położenie i pęd:

$$p'[t] = -\frac{\partial H}{\partial h} = -mg, \quad h'[t] = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

- 4 warunki początkowe wyrażone przez położenie i pęd:
 $h[0] == H, \quad p[0] = mV_0$
- 5 `DSolve[{h'[t] == p[t]/m, p'[t] == -m g, h[0] == H, p[0] == m V0}, {h[t], p[t]}, t]`

Spadek swobodny w polu grawitacyjnym

Sposób V: formalizm Lagrange

- 1 wyrażamy energię kinetyczną i potencjalną przez położenie i prędkość:

$$E = \frac{mv^2}{2}, \quad V = mgh$$

- 2 tworzymy *Lagrangian*: $L = E - V$
- 3 wypisujemy równania ruchu Lagrange-Eulera:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v} \right) = \frac{\partial L}{\partial h}$$

- 4 ponieważ zachodzi w tym wypadku:

$$\frac{\partial L}{\partial v} = mv, \quad \frac{\partial L}{\partial h} = -mg$$

dostajemy równanie ruchu: $v'[t] == -g$

Podsumowanie

- 1 kluczowa jest umiejętność wypisania równania lub układu równań opisujących rozwiązywane zagadnienie
- 2 trzeba znać przynajmniej jeden (a najlepiej kilka) sposobów na uzyskanie równań „ruchu”
- 3 samo rozwiązanie równania *należy* uzyskać za pomocą **DSolve** lub **NDsolve**
- 4 należy pamiętać o formalnych wymogach **DSolve**: wszystkie funkcje muszą posiadać argument itp.
- 5 aby rozwiązaniu równania różniczkowemu nadać sens fizyczny musimy podać warunki początkowe; tutaj położenie i prędkość w wybranej chwili czasu np. $t = 0$.
- 6 takie podejście procentuje w przypadku bardziej złożonych problemów

Dwie masy połączone gumką w polu grawitacyjnym

- używamy formalizmu Lagrange'a, współrzędne „kulki 1” : $x_1(t), z_1(t)$, „kulki 2” : $x_2(t), z_2(t)$ (pomijam współrzędne $y_1(t)$ i $y_2(t)$)

- energia kinetyczna: $E_k = \frac{1}{2}m_1 (v_{x_1}^2 + v_{z_1}^2) + \frac{1}{2}m_2 (v_{x_2}^2 + v_{z_2}^2)$

- energia potencjalna:

$$E_p = m_1 g z_1 + m_2 g z_2 + k \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$$

- funkcja Lagrange'a: $L = E_k - E_p$

- równania ruchu (4): $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_{x_1}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_1}, \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_{z_1}} \right) = \frac{\partial L}{\partial z_1},$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_{x_2}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_2}, \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v_{z_2}} \right) = \frac{\partial L}{\partial z_2}$$

Dwie masy połączone gumką w polu grawitacyjnym

- energia kinetyczna:

$$E_k = \frac{1}{2}m_1(V_{x1}[t]^2 + V_{z1}[t]^2) + \frac{1}{2}m_2(V_{x2}[t]^2 + V_{z2}[t]^2)$$

- energia potencjalna: $E_p = m g z_1[t] + m g z_2[t] + k \text{Sqrt}[(x_1[t] - x_2[t])^2 + (z_1[t] - z_2[t])^2]$

- funkcja Lagrange'a: $L = E_k - E_p$

- równania ruchu (4):

$$\text{eq11} = D[D[L, V_{x1}[t]], t] == D[L, x_1[t]]$$

$$\text{eq12} = D[D[L, V_{z1}[t]], t] == D[L, z_1[t]]$$

$$\text{eq21} = D[D[L, V_{x2}[t]], t] == D[L, x_2[t]]$$

$$\text{eq22} = D[D[L, V_{z2}[t]], t] == D[L, z_2[t]]$$

Bardziej złożony przykład: MATHEMATICA cd

- musimy zdefiniować co to jest prędkość:
predkosci = { $Vx1[t] == x1'[t]$, $Vz1[t] == z1'[t]$,
 $Vx2[t] == x2'[t]$, $Vz2[t] == z2'[t]$ }
- warunki początkowe: położenia i prędkości obu „kulek” w chwili $t = 0$
warpocz = { $x1[0] == 0$, $z1[0] == 0$, $x2[0] == 1$, $z2[0] == 1$,
 $Vx1[0] == 10$, $Vz1[0] == 20$, $Vx2[0] == 4$, $Vz2[0] == 30$ }
- numeryczne wartości parametrów np:
{ $k=10$, $m1=1$, $m2=2$, $g=9.81$ }
-
- **problem** = Union[{eq11,eq12,eq21,eq22 },predkosci, warpocz]
-
- **funkcje** = { $x1[t]$, $z1[t]$, $x2[t]$, $z2[t]$, $Vx1[t]$, $Vz1[t]$, $Vx2[t]$, $Vz2[t]$ }
- **rozwnum** = NDSolve[problem , funkcje , {t, 0, 10}]

Bardziej złożony przykład: wizualizacja

- $tr1 = \{ x1[t], z1[t] \} /. \text{rozwnum}[[1]]$
 $tr2 = \{ x2[t], z2[t] \} /. \text{rozwnum}[[1]]$
- $tor = \text{ParametricPlot}[\{ tr1, tr2 \}, \{t, 0, 2 \}]$
- $\text{Animate}[\text{Evaluate}[\text{Show}[tor, \text{Graphics}[\text{Line}[\{tr1, tr2\}]]], \text{PlotRange} \rightarrow \{\{0, 50\}, \{0, 50\}\}]]], \{t, 0, 5, 0.01\}]$

R. Schrödingera bez czasu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + U(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

Możemy rozwiązać to równanie analitycznie dla $U(x) = 0$:

$$\text{In:=DSolve}\left[\frac{\hbar^2\Phi''[x]}{2m} == E0\Phi[x], \Phi[x], x\right]$$

$$\text{Out} = \left\{\left\{\Phi[x] \rightarrow C[1]\text{Cos}\left[\frac{\sqrt{2}\sqrt{E0}\sqrt{m}x}{\hbar}\right] + C[2]\text{Sin}\left[\frac{\sqrt{2}\sqrt{E0}\sqrt{m}x}{\hbar}\right]\right\}\right\}$$

W mechanice kwantowej zwykle zapisujemy to rozwiązanie jako:

$$\phi(x) = c_1 e^{ipx/\hbar} + c_2 e^{-ipx/\hbar}$$

gdzie $p = \sqrt{2mE0}$ to pęd cząstki.

Analityczne rozwiązanie w przypadku dowolnego $U(x)$ nie powiedzie się.

Numeryczne rozwiązanie r. bez czasu

R. Schrödingera bez czasu możemy oczywiście rozwiązywać numerycznie.

Klasyczny problem polega na znalezieniu współczynnika odbicia od potencjału $U(x)$.

Cząstka nadlatująca z nieskończoności ($x \rightarrow -\infty$ gdzie $U(x) \equiv 0$) jest opisywana funkcją:

$$\phi(x) = Ae^{ipx}$$

Na skutek oddziaływania z barierą potencjału w $x \simeq 0$ pojawia się *fala odbita* w rejonie $x < 0$ (na lewo od bariery):

$$\phi(x) = Be^{-ipx}$$

oraz fala przechodząca (na prawo od bariery) w rejonie $x > 0$:

$$\phi(x) = Ce^{ipx}$$

Stałe A, B, C są na ogół zespolone.

Zauważmy że:

- W rejonie $x < 0$ mamy dwie fale: przychodzącą i odbitą, z których tylko przychodząca jest dana.
- W rejonie $x > 0$ mamy tylko jedną falę przechodzącą

Wygodnie jest więc założyć pewną postać fali przechodzącej dla $x > 0$ a następnie całkować równanie Sch. bez czasu wstecz aż do $x \ll 0$.

Funkcja falowa $\phi(x)$ jest *funkcją o wartościach zespolonych*:

$$\phi(x) = \phi_1(x) + i\phi_2(x)$$

MATHEMATICA bez problemu rozwiązuje tego typu r. różniczkowe zwyczajne, więc w tym przypadku nie musimy rozpisywać układu równań na część rzeczywistą i zespoloną.

Warunek początkowy dla r. Sch. bez czasu wynika z założonej postaci *fali przechodzącej*:

$$\phi(x_0) = \exp(ipx_0), \frac{d\phi(x)}{dx} = ip \exp(ipx_0)$$

Wygodnie jest przyjąć jako x_0 pewną wielokrotność N okresu funkcji e^{ipx} czyli $T = 2\pi/p$ i wtedy:

$$\phi(2N\pi/p) = 1, \frac{d\phi(x = 2N\pi/p)}{dx} = ip$$

gdzie np: $N = 4$.