



Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Praca magisterska

Michał Stalmach

kierunek studiów: Informatyka Stosowana

specjalność: Informatyka w nauce i technice

Zastosowanie metody elementów skończonych do opisu stanów własnych dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego

Opiekun: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran

Kraków, styczeń 2009

Oświadczam, świadomy odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę dyplomową wykonałem(-am) osobiście i samodzielnie i nie korzystałem ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

**Tematyka pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej Michała Stalmacha,
studenta V roku studiów kierunku informatyka stosowana, specjalności
informatyka w nauce i technice**

Temat pracy magisterskiej: **Zastosowanie metody elementów skończonych do opisu stanów własnych dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego**

Opiekun pracy: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran
Recenzenci pracy:
Miejsce praktyki dyplomowej: WFiIS AGH, Kraków

Program pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej

1. Omówienie realizacji pracy magisterskiej z opiekunem.
2. Zebranie i opracowanie literatury dotyczącej tematu pracy.
3. Praktyka dyplomowa:
 - zapoznanie się z ideą,
 - przygotowanie oprogramowania,
 - dyskusja i analiza wyników,
 - sporządzenie sprawozdania z praktyki.
4. Kontynuacja obliczeń związanych z tematem pracy magisterskiej.
5. Zebranie i opracowanie wyników obliczeń.
6. Analiza wyników obliczeń numerycznych, ich omówienie i zatwierdzenie przez opiekuna.
7. Opracowanie redakcyjne pracy.

Termin oddania w dziekanacie:

.....
(podpis kierownika katedry)

.....
(podpis opiekuna)

Merytoryczna ocena pracy przez opiekuna:

Pan Michał Stalmach zbadał działanie metody elementów skończonych w kwantowym problemie oscylatora harmonicznego. W pracy zastosowano bazę funkcji Lagrange'a. W części dotyczącej oscylatora dwuwymiarowego przebadane zostały elementy kwadratowe, czworokątne oraz trójkątne. Omówiono obszernie problem optymalizacji siatki dla stanu podstawowego oraz dla stanów wzbudzonych. Optymalizacja siatki wykorzystuje wariacyjny charakter metody. Szczegóły rachunku zostały dokładnie opisane, a wyniki przedstawione w sposób klarowny. Pan Michał Stalmach wykazał się dużą inwencją i samodzielnością w doborze strategii optymalizacji siatki. Omówione wyniki i metody mogą być użyteczne dla badań nad problemami z bardziej złożonym potencjałem uwięzienia.

Końcowa ocena pracy przez opiekuna: **bardzo dobry (5.0)**

Data:

Podpis:

Merytoryczna ocena pracy przez recenzenta:

Autor w swojej pracy przebadał metodę elementów skończonych w zastosowaniu do rozwiązywania niezależnego od czasu równania Schroedingera w układach jedno i dwuwymiarowych. Przebadany został wpływ wyboru elementów skończonych (czworokątne i trójkątne) oraz funkcji kształtu na dokładność uzyskiwanych rozwiązań. Przeprowadzona została optymalizacja pudła obliczeniowego. Przebadano również możliwość zagęszczania siatki w obszarach największej zmienności funkcji falowych. W sumie praca zawiera bardzo dużo materiału obliczeniowego testującego skomplikowaną ale ważną i w niektórych zastosowaniach niezastąpioną metodę obliczeniową. Praca napisana jest ze zrozumieniem problemu, ilustrowana dużą ilością tabel i kolorowych wykresów. Uzyskane wyniki mogą być pomocne każdemu kto jest zmuszony posłużyć się w obliczeniach numerycznych metodą elementów skończonych.

Końcowa ocena pracy przez recenzenta: **celujący (6.0)**

Data:

Podpis:

Spis treści

1	Wstęp	6
2	Kwantowy oscylator harmoniczny - 1D	7
2.1	Opis teoretyczny	7
2.1.1	Operator energii	7
2.1.2	Analityczne rozwiązania problemu własnego	8
2.2	Metoda elementów skończonych z liniowymi funkcjami kształtu dla oscylatora jednowymiarowego	9
2.2.1	Opis	9
2.2.2	Wyniki	12
3	Kwantowy oscylator harmoniczny - 2D	17
3.1	Opis teoretyczny	17
3.2	Metoda elementów skończonych - elementy czworokątne	17
3.2.1	Pierwsze wyniki	23
3.2.2	Optymalizacja pudła obliczeniowego	24
3.2.3	Zagęszczanie siatki dla elementów czworokątnych	27
3.2.4	Wygładzanie siatki metodą Laplace'a	29
3.3	Metoda elementów skończonych - elementy trójkątne	33
3.3.1	Pierwsze wyniki	37
3.3.2	Zagęszczanie siatki	37
4	Podsumowanie i wnioski	44

1 Wstęp

Zjawiska fizyczne zachodzące w ośrodku ciągłym są często opisywane przez cząstkowe równania różniczkowe, które tylko w szczególnych przypadkach udaje się rozwiązać analitycznie. Do modelowania zjawisk oraz do opisu działania wielu urządzeń musimy używać metod numerycznych [1, 2, 3]. Do rozwiązywania równań cząstkowych wprowadzono wiele różnych podejść numerycznych. Najprostszym z nich jest metoda różnic skończonych, w której dyskretyzuje się ciągły ośrodek, zastępuje się pochodne przez ilorazy różnicowe i pracuje się na siatce punktów, zwanych niekiedy węzłami. Główną zaletą tej metody jest jej prostota. Jednak jej złożoność obliczeniowa silnie rośnie z rozmiarem przestrzeni. Ponadto, metoda różnic skończonych nie zbyt dobrze radzi sobie z problemami, w których konieczny jest dokładniejszy opis rozwiązań we fragmencie pudła obliczeniowego. Lokalne zagęszczanie siatki różnicowej wiąże się ze stosowaniem asymetrycznych ilorazów różnicowych, których dokładność jest mniejsza niż ilorazów centralnych. Z tego powodu, metoda różnic skończonych jest mało przydatna do opisu problemów złożonych i w zastosowaniach przemysłowych jest rzadko używana. Najbardziej popularną metodą dla praktycznych zastosowań jest metoda elementów skończonych [1, 2]. W metodzie tej cały ośrodek dzielimy na fragmenty zwane elementami. W każdym z nich wprowadzamy pewną liczbę węzłów. Mają one inną interpretację niż w metodzie różnic skończonych. Z każdym z węzłów związana jest jedna lub więcej wielomianowych funkcji kształtu. Najczęściej wprowadza się jedną funkcję kształtu na węzeł. W tym przypadku funkcje kształtu są wielomianami interpolacyjnymi Lagrange’a. W metodzie szukamy rozwiązań w węzłach, a rozwiązanie równania różniczkowego poza węzłami jest superpozycją funkcji kształtu dla danego elementu.

Metoda elementów skończonych jest metodą wariacyjną, w której używa się złożonej, lokalnie wielomianowej funkcji próbnej. Z funkcją próbną można związać pewien funkcjonał. Na przykład w problemach elektrostatyki funkcjonałem tym jest całka z lagranżjanu układu ładunek-pole. Dla problemów stanów własnych w mechanice kwantowej odpowiednim funkcjonałem jest wartość oczekiwana energii. Rozwiązanie przybliżone jest tym bliższe dokładnemu im mniejsza jest wartość funkcjonału. Dzięki temu, wartość funkcjonału można potraktować jako wskazówkę dla optymalizacji funkcji próbnej. Dla metody elementów skończonych pozwala to na optymalizację rozmiarów pudła obliczeniowego, rozmieszczenia i kształtu elementów. Swoboda w wyborze elementów jest uważana za największą siłę metody.

Celem niniejszej pracy było sprawdzenie działania metody elementów skończonych dla jednego z najbardziej popularnych problemów w mechanice kwantowej – równania oscylatora harmonicznego. Kwantowy oscylator harmoniczny jest szczególnie ważny w mechanice kwantowej, ponieważ jest jednym z niewielu problemów, które można rozwiązać analitycznie, co pozwoli na dyskusję dokładności metody. Problem oscylatora harmonicznego jest ważny np. dla nanostruktur półprzewodnikowych. Są to układy wiążące pewną liczbę elektronów lub dziur. Źródłem potencjału uwięzienia jest często pole elektryczne. Potencjał pola elektrycznego dla ciągłego rozkładu ładunków jest gładki i w otoczeniu minimum często opisać go można przy pomocy paraboli. Potencjał paraboliczny występuje właśnie w problemie oscylatora harmonicznego.

W drugim rozdziale pracy zbadany jest problem jednowymiarowego oscylatora harmonicznego. Do studium zastosowano najprostsze – odcinkami liniowe – funkcje kształtu. Funkcje te są stosunkowo mało elastyczne, i jak pokażemy szczególnie ważna dla nich jest optymalizacja położenia węzłów. W trzecim rozdziale pracy badany jest problem oscylatora dwuwymiarowego w wersji zarówno izotropowej jak i anizotropowej. Lekka anizotropia wprowadzona została w celu dyskusji optymalizacji położenia węzłów dla stanów wzbudzonych, dla zniesienia wielokrotnej degeneracji poziomów energetycznych oscylatora izotropowego. Przebadane zostały przypadki elementów czworokątnych i w szczególności kwadratowych. Zastosowano również elementy trójkątne. Sprawdzono w praktyce kilka metod zagęszczania siatki i wygładzania rozkładu elementów.

2 Kwantowy oscylator harmoniczny - 1D

2.1 Opis teoretyczny

2.1.1 Operator energii

W formalizmie Hamiltona wyrażenie na energię dane jest funkcją położenia i pędu, zwaną funkcją Hamiltona. Hamiltonian ten dla jednowymiarowej cząstki w zewnętrznym polu przyjmuje postać:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1)$$

Z uwagi na zależność hamiltonianu od położenia i pędu, operator energii konstruujemy wstawiając do powyższej zależności zamiast klasycznych argumentów odpowiednie operatory:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

Jest to tak zwany operator Hamiltona.

Kwantowy oscylator harmoniczny to odpowiednik klasycznego układu złożonego z cząstki w polu sił sprężystych. Potencjał oscylatora harmonicznego jest proporcjonalny do kwadratu odległości cząstki od położenia równowagi (przy czym za położenie równowagi przyjmujemy początek układu):

$$V(x) = \frac{k}{2} x^2 \quad (3)$$

W powyższym wzorze k jest współczynnikiem sprężystości, zastępujemy go inną stałą przyjmując:

$$k = m\omega^2 \quad (4)$$

przez co hamiltonian układu ma postać:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (5)$$

W celu otrzymania bezwymiarowej postaci hamiltonianu musimy pozbyć się stałych występujących w wyrażeniu. Dokonamy tego dobierając odpowiednio jednostki odległości i energii. Za jednostkę długości przyjmiemy a [4]. Wstawiając do hamiltonianu otrzymamy:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} a^2 x^2 \quad (6)$$

Jednostkę długości dobieramy tak, aby ujednocilić stałe w obu składnikach hamiltonianu. Chcemy aby:

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{m\omega^2}{2} a^2 x^2 \quad (7)$$

Stąd otrzymujemy:

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (8)$$

co po wstawieniu do hamiltonianu daje:

$$\hat{H} = \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \frac{\hbar\omega}{2} \quad (9)$$

Jeżeli za jednostkę energii przyjmiemy

$$\epsilon = \hbar\omega \quad (10)$$

uzyskamy tzw. bezwymiarową postać hamiltonianu:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \quad (11)$$

2.1.2 Analityczne rozwiązania problemu własnego

Równanie własne:

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - E \right) \Psi(x) = 0 \quad (12)$$

rozwiązujemy stosując podstawienie:

$$\Psi(x) = e^{-x^2} \varphi(x) \quad (13)$$

dzięki któremu dla funkcji $\varphi(x)$ uzyskujemy równanie:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 - E \right) e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi(x) = -\frac{d}{dx} \left((-x) e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi(x) + e^{-\frac{x^2}{2}} \frac{d}{dx} \varphi(x) \right) \\ &+ (x^2 - E) e^{-\frac{x^2}{2}} \varphi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \left(1 - x^2 + 2x \frac{d}{dx} - \frac{d^2}{dx^2} + x^2 - E \right) \varphi(x) \\ &= e^{-\frac{x^2}{2}} \left(1 + 2x \frac{d}{dx} - \frac{d^2}{dx^2} - E \right) \varphi(x) \end{aligned}$$

z którego wynika, iż funkcja $\varphi(x)$ musi spełniać zależność:

$$\varphi'' - 2x\varphi' + (E - 1)\varphi = 0 \quad (14)$$

Równanie to dla $E - 1 = 2n$, gdzie $n \in (0, 1, 2, \dots)$, posiada rozwiązania w postaci wielomianów stopnia n , noszących nazwę wielomianów Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (15)$$

Dla wartości E nie spełniających podanego warunku równanie własne hamiltonianu nie posiada rozwiązań skończonych w całej przestrzeni. Uzyskaliśmy więc dyskretny układ poziomów energetycznych:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (16)$$

wraz z odpowiadającymi im funkcjami własnymi:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} n! 2^n}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) \quad (17)$$

2.2 Metoda elementów skończonych z liniowymi funkcjami kształtu dla oscylatora jednowymiarowego

2.2.1 Opis

Poszukujemy rozwiązania niezależnego od czasu równania Schroedinger'a:

$$(\hat{H} - E) \Psi = 0 \quad (18)$$

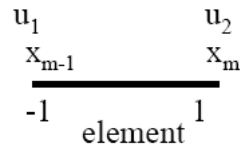
w podprzestrzeni $\Omega \subset R$, gdzie $E \in \sigma(\hat{H})$ przyjmuje dyskretne wartości własne kwantowego hamiltonianu \hat{H} .

Niech funkcje $\phi_i (i = 1, \dots, N)$ stanowią bazę przestrzeni Ω . Poszukiwaną funkcję falową można przedstawić w postaci:

$$\Psi(x) = \sum_m \sum_n c_n^m \phi_n^m(x) \quad (19)$$

gdzie c_n^m - liczby rzeczywiste; m - ilość elementów, na które podzielona została przestrzeń Ω ; n - ilość węzłów w jednym elemencie

W jednowymiarowej przestrzeni Ω fizycznie problem opisany jest na siatce punktów $[x_i, \dots, x_N]$. Siatkę tą dzielimy na $N - 1$ elementów odniesienia, zwanych elementami skończonymi, w których przeprowadzać będziemy obliczenia. Pojedynczy element skończony $K_m = (x_{m-1}, x_m)$ w przestrzeni referencyjnej jest odcinkiem o współrzędnych $(-1, 1)$. Mapowanie z przestrzeni



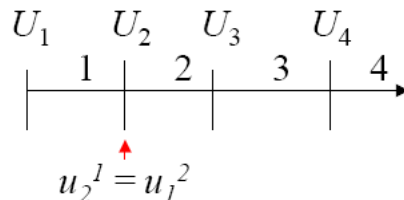
Rysunek 1: Jednowymiarowy element w przestrzeni referencyjnej

referencyjnej do fizycznej określone jest zależnością

$$x = \frac{x_{m-1} + x_m}{2} + \frac{x_m - x_{m-1}}{2} \xi \quad (20)$$

gdzie ξ należy do przedziału $(-1, 1)$.

Każdy węzeł posiada unikalny numer globalny oraz numer lokalny wewnątrz elementu, do którego należy.



Rysunek 2: Globalna numeracja węzłów na siatce $[U]$, lokalna numeracja wewnątrz elementu $[u]$

Po zmianie numeracji na globalną równanie (19) przyjmuje postać:

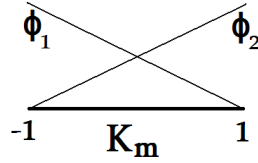
$$\Psi(x) = \sum_i c_i \phi_i(x) \quad (21)$$

Wewnątrz elementów skończonych wybieramy funkcje jednoznacznie określające rozkład analizowanej wielkości fizycznej w zależności od wartości tych wielkości fizycznych w węzłach. Są to tak zwane funkcje węzłowe lub funkcje kształtu. Liczba funkcji kształtu w pojedynczym elemencie skończonym jest równa liczbie jego węzłów, ponadto funkcje te zawsze są tak zbudowane, aby w węzłach których dotyczą ich wartości wynosiły jeden, a pozostałych węzłach przyjmowały wartość zero. W tym rozdziale zastosujemy najprostsze - liniowe funkcje kształtu. W tym przypadku w każdym elemencie mamy tylko dwa węzły, każdy związany z początkiem i końcem elementu. Dla jednowymiarowego elementu o dwóch węzłach definiujemy liniowe funkcje węzłowe mające postać:

$$\phi_1(\xi) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\xi \quad (22)$$

$$\phi_2(\xi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\xi \quad (23)$$

Dodatkowo funkcje $\phi_i(x)$ stanowią bazę przestrzeni Ω , w której poszukujemy rozwiązania.



Rysunek 3: Funkcje kształtu dla elementu skończonego

Rozwiązując równanie własne kwantowego oscylatora harmonicznego znajdziemy wartości szukaných współczynników c_i .

Do równania:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \psi_n(x) = E_n \psi_n(x) \Big|_{\times \phi_j} \int dx \quad (24)$$

wstawiamy (21) otrzymując:

$$\sum_i \frac{1}{2} \left(\int_{x_m}^{x_{m+1}} dx \frac{d\phi_j(x)}{dx} \frac{d\phi_i(x)}{dx} + x^2 \phi_i(x) \phi_j(x) \right) c_i = E \sum_i \int_{x_m}^{x_{m+1}} dx \phi_j(x) \phi_i(x) c_i \quad (25)$$

Jest to tzw. uogólnione macierzowe równanie własne:

$$\mathbf{H}c = E\mathbf{S}c \quad (26)$$

gdzie \mathbf{H} jest macierzą hamiltonianu określoną wzorem:

$$H_{ij} = \langle \phi_i, \hat{H} \phi_j \rangle := \int_{\Omega} \phi_i(\hat{H} \phi_j) d\Omega = \int_{x_m}^{x_{m+1}} dx \frac{d\phi_j(x)}{dx} \frac{d\phi_i(x)}{dx} + x^2 \phi_i(x) \phi_j(x) \quad (27)$$

natomiast \mathbf{S} jest macierzą przekrywania określoną przez:

$$S_{ij} = \langle \phi_i, \phi_j \rangle := \int_{\Omega} \phi_i \phi_j d\Omega = \int_{x_m}^{x_{m+1}} dx \phi_j(x) \phi_i(x) \quad (28)$$

Całki oraz pochodne ‘przenosimy’ do przestrzeni referencyjnej korzystając z mapowania (20) oraz uwzględniając skalę transformacji (jakobian) m -tego elementu równą

$$J_m = \frac{dx}{d\xi} \quad (29)$$

Dla przestrzeni jednowymiarowej jacobian nie zależy od ξ i dla użytych liniowych funkcji kształtu jego wartość wynosi

$$J_m = \frac{h_m}{2} \quad (30)$$

gdzie h_m - długość m -tego elementu

Ostatecznie otrzymujemy:

$$H_{ij}^m = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left(\phi_i'(\xi) \phi_j'(\xi) \frac{1}{J_m} + x(\xi)^2 \phi_i(\xi) \phi_j(\xi) J_m \right) d\xi \quad (31)$$

$$S_{ij}^m = \int_{-1}^1 d\xi \phi_i(\xi) \phi_j(\xi) J_m \quad (32)$$

Całki w powyższych wzorach liczymy numerycznie używając sześciopunktowej jednowymiarowej kwadratury Gauss'a [5]:

$$\int_{-1}^1 d\xi g(\xi) = \sum_{i=1}^6 w_i g(x_i) \quad (33)$$

gdzie w_i - wagi kwadratury, x_i - węzły kwadratury, a $g(\xi)$ - funkcja podcałkowa.

Globalne macierze sztywności oraz przekrywania znajdujemy sumując, odpowiednie wartości lokalnych macierzy dla każdego z m elementów przechodząc po każdym z węzłów i, j :

$$H(lg(i, m), lg(j, m)) = \sum_m \sum_{i, j} H(lg(i, m), lg(j, m))$$

$$S(lg(i, m), lg(j, m)) = \sum_m \sum_{i, j} S(lg(i, m), lg(j, m))$$

gdzie pętla po m przebiega przez wszystkie elementy, a po i, j po parach wszystkich węzłów w elemencie m . W powyższym wzorze $lg(l, k)$ to funkcja przyporządkowująca globalny numer węzła dla lokalnego węzła l w elemencie k .

Dla tak przygotowanych macierzy rozwiązujemy uogólnione macierzowe równanie własne znajdując wartości współczynników c_i . Po rozwiązaniu równania własnego, możemy wyznaczyć przebieg przybliżonego rozwiązania w przestrzeni odniesienia elementu m , ze wzoru

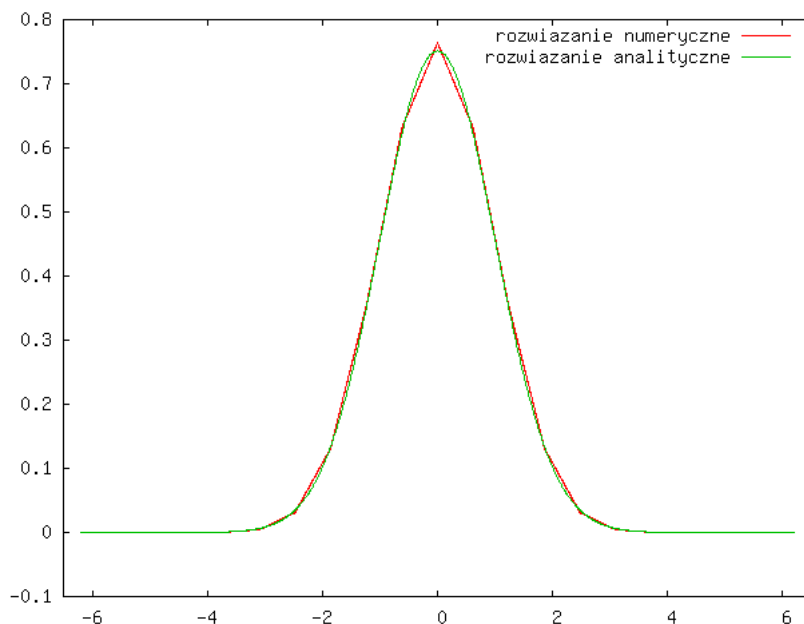
$$u(\xi) = \sum_{i=1}^2 c_i^m \phi_i(\xi). \quad (34)$$

Wyniki w przestrzeni rzeczywistej uzyskamy wykorzystując mapowanie (20).

2.2.2 Wyniki

Rozwiązujemy równanie własne jednowymiarowego oscylatora harmonicznego na siatce 21 równoodległych punktów w przedziale od -6.2 do 6.2.

Wykres funkcji falowej dla pierwszej wartości własnej przedstawia się następująco:



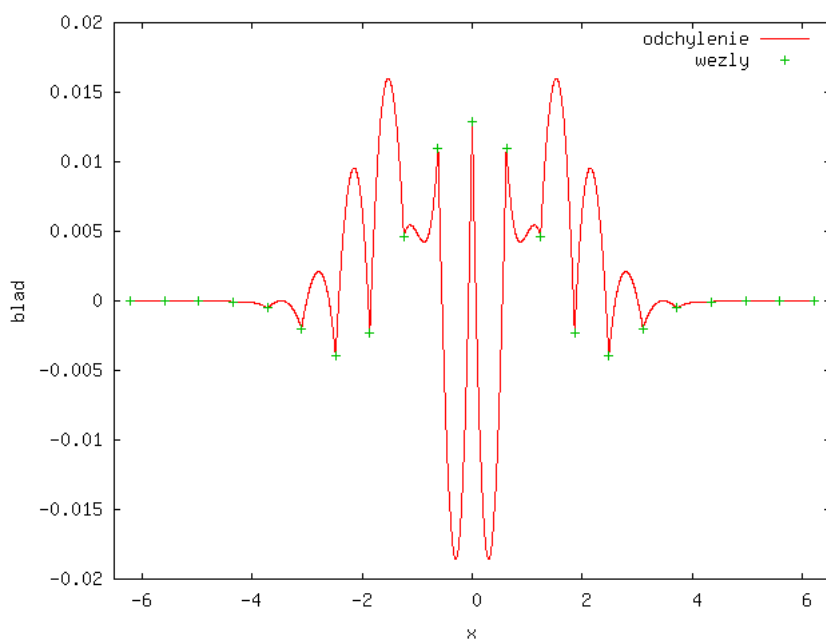
Rysunek 4: Wykres funkcji falowej dla pierwszej wartości własnej

Wyznaczone wartości pięciu pierwszych wartości własnych oraz błąd w stosunku do rozwiązania analitycznego znajdują się w tabeli poniżej:

nr wartości własnej	rozwiązanie analityczne	rozwiązanie numeryczne	błąd
1	0.5	0.512	0.012
2	1.5	1.558	0.058
3	2.5	2.647	0.147
4	3.5	3.774	0.274
5	4.5	4.936	0.436

Widzimy, że im wyższa wartość własna tym większa jest wartość odchylenia od rozwiązania dokładnego.

Wykres różnicy pomiędzy rozwiązaniem analitycznym a numerycznym przedstawiony jest poniżej:



Rysunek 5: Wykres odchylenia rozwiązania numerycznego od dokładnego dla funkcji własnej stanu podstawowego.

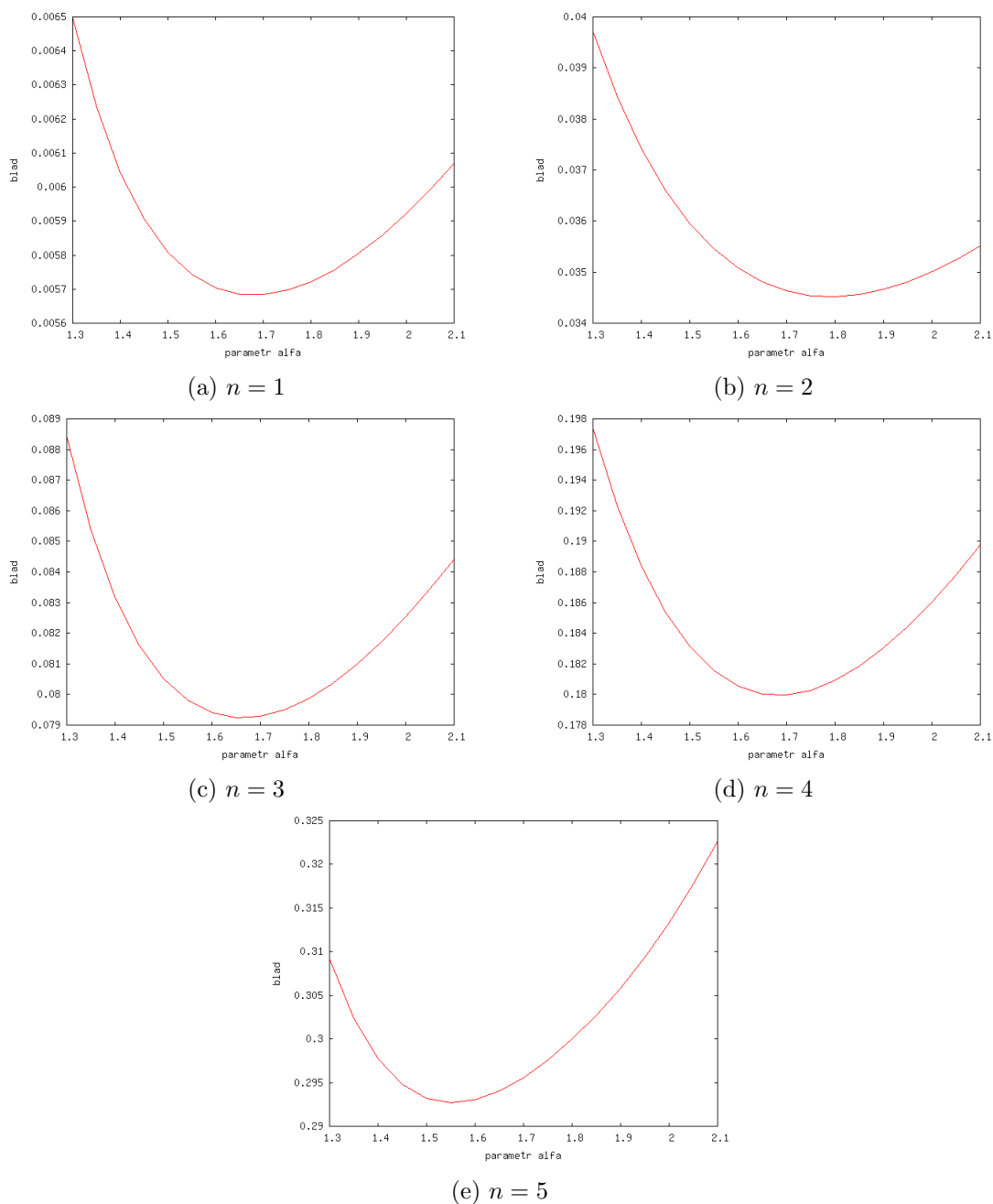
Z wykresu wynika, że największy błąd jest w środku przedziału obliczeń, gdzie funkcja jest najbardziej zmienna. Natomiast na brzegach, gdzie funkcja jest praktycznie stała błąd jest bliski zeru.

W celu poprawienia dokładności rozwiązania bez zwiększania liczby węzłów, musimy zastosować siatkę nierównomierną. Więcej węzłów zgromadzonych będzie w przedziale, w którym funkcja przyjmuje duże wartości, natomiast na brzegach węzły będą rozłożone rzadziej. Funkcja opisująca rozkład węzłów w zależności od parametru α dla pierwszego wektora własnego jest wyrażona wzorem:

$$x_k = d \left(\frac{|k - n/2 - 1|}{n/2} \right)^\alpha \quad (35)$$

gdzie d - rozmiar przedziału obliczeniowego, k - numer węzła, n - liczba wszystkich węzłów.

Spróbujemy znaleźć taką optymalną wartość parametru α , dla którego odchylenia od rozwiązania analitycznego będą najmniejsze dla pierwszych pięciu wartości własnych.

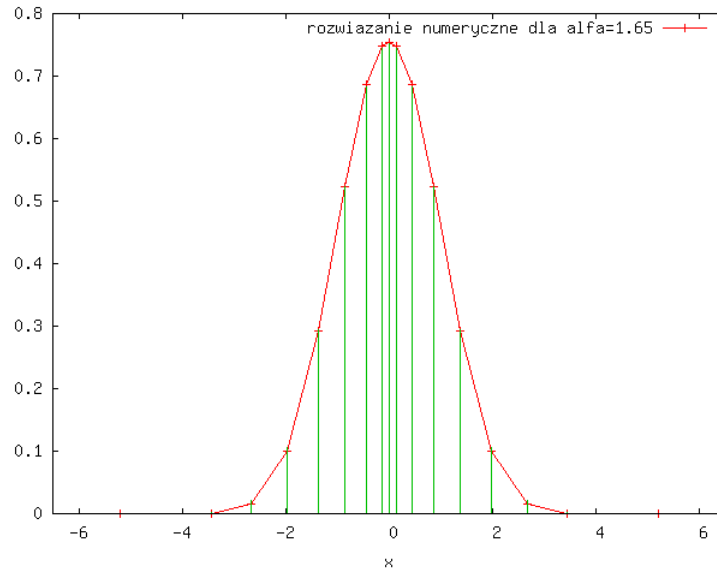


Rysunek 6: Błąd rozwiązania numerycznego w funkcji parametru α dla pierwszych pięciu wartości własnych

Z powyższych zależności wynika, iż najdokładniejsze rozwiązanie otrzymamy dla parametru

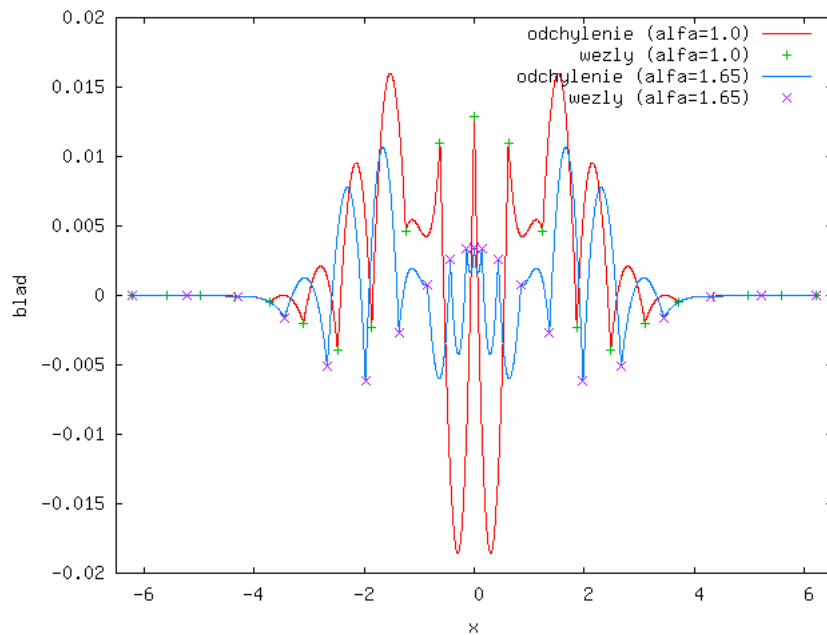
$$\alpha \approx 1.65$$

Rozkład węzłów oraz rozwiązanie dla pierwszej funkcji falowej po optymalizacji siatki:



Rysunek 7: Rozwiązanie numeryczne dla optymalnego parametru α . Pionowe kreski pokazują położenie węzłów dla zoptymalizowanej siatki.

Zastosowanie nierównomiernej siatki punktów pozwoliło na poprawienie dokładności obliczeń bez zwiększania liczby elementów, a co za tym idzie bez zwiększania złożoności obliczeń.



Rysunek 8: Porównanie odchyleń wyniku numerycznego od dokładnej funkcji własnej dla równomiernej ($\alpha = 1.0$) i zoptymalizowanej ($\alpha = 1.65$) siatki

Poniższa tabela przedstawia porównanie odchyłeń od rozwiązania dokładnego pierwszych pięciu wartości własnych dla siatek o równoodległych i dopasowanych węzłach.

nr wartości własnej	siatka równomierna		siatka dopasowana	
	wartość	błąd	wartość	błąd
1	0.512	0.012	0.505	0.005
2	1.558	0.058	1.535	0.035
3	2.647	0.147	2.579	0.079
4	3.774	0.274	3.680	0.180
5	4.936	0.436	4.794	0.294

3 Kwantowy oscylator harmoniczny - 2D

3.1 Opis teoretyczny

Hamiltonian układu

Dla układu dwuwymiarowego operator Hamiltona jest sumą jednowymiarowych operatorów zmiennych x oraz y :

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y \quad (36)$$

gdzie:

$$\hat{H}_x = \frac{-\hbar^2}{2ma^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} a^2 x^2 \quad (37)$$

$$\hat{H}_y = \frac{-\hbar^2}{2ma^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m\omega^2}{2} a^2 y^2 \quad (38)$$

Po podstawieniu powyższych zależności i odpowiednich przekształceniach otrzymujemy bezwymiarową postać hamiltonianu dla dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} (x^2 + y^2) \quad (39)$$

Równanie własne i energia układu

Analogicznie jak przy funkcji Hamiltona, tak i przy znajdowaniu równania własnego oraz poziomów energetycznych dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego, stosujemy separację zmiennych. Funkcje własne mają postać:

$$\Psi_n(x, y) = \psi_i(x)\psi_j(y) \quad (40)$$

gdzie

$$\psi_i(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}i!2^i}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_i(x) \quad (41)$$

$$\psi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}j!2^j}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_j(y) \quad (42)$$

natomiast energia układu wyraża się przez:

$$E_n = E_i^x + E_j^y = i + j + 1 \quad (43)$$

3.2 Metoda elementów skończonych - elementy czworokątne

Opis

Rozwiążemy niezależne od czasu równanie Schroedinger'a:

$$(\hat{H} - E) \Psi = 0 \quad (44)$$

w podprzestrzeni $\Omega \subset R^2$, gdzie $E \in \sigma(\hat{H})$ przyjmuje dyskretne wartości własne kwantowego Hamiltonianu \hat{H} .

Obieramy przybliżenie funkcji falowej:

$$\Psi(x, y) = \sum_m \sum_n c_n^m \phi_n^m(x, y) \quad (45)$$

gdzie m - ilość elementów, na które podzielona została przestrzeń, a n - ilość węzłów w jednym elemencie

Po zmianie numeracji na globalną powyższe równanie przyjmuje postać:

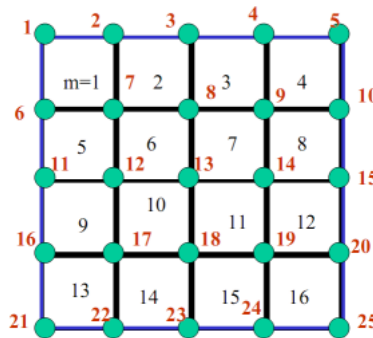
$$\Psi(x, y) = \sum_i c_i \phi_i(x, y) \quad (46)$$

Funkcje $\phi_i(x, y)$ stanowią bazę przestrzeni Ω , a wartości c_i są liczbami rzeczywistymi. Po przekształceniach otrzymujemy uogólnione równanie własne:

$$\mathbf{H}c = E\mathbf{S}c \quad (47)$$

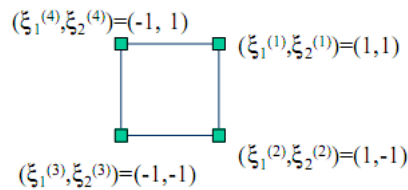
gdzie \mathbf{H} - macierz Hamiltonianu, \mathbf{S} - macierz przekrywania

Obszar Ω dzielimy na m kwadratowych elementów, tzw. elementów skończonych - tak jak to przedstawiono na rysunku 9. Każdy element oraz węzeł posiada swój unikalny, globalny numer.



Rysunek 9: Podział obszaru Ω na kwadratowe elementy skończone

Pojedynczy element w przestrzeni referencyjnej jest kwadratem o bokach $(\pm 1, \pm 1)$.



Rysunek 10: Pojedynczy element w przestrzeni referencyjnej

Mapowanie kwadratowego elementu odniesienia (ξ_1, ξ_2) do czworokątnego elementu fizycznego m dane jest przez wzór:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^4 \begin{pmatrix} x_i^{(m)} \\ y_i^{(m)} \end{pmatrix} \phi_i(\xi_1, \xi_2) \quad (48)$$

gdzie $(x_i^{(m)}, y_i^{(m)})$ są współrzędnymi i -tego wierzchołka elementu m w przestrzeni fizycznej, natomiast funkcja ϕ_i jest jedną z czterech biliniowych funkcji kształtu.

Funkcje kształtu dla kwadratowego elementu skończonego to:

$$\phi_1(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{4}(1 + \xi_1)(1 + \xi_2) \quad (49)$$

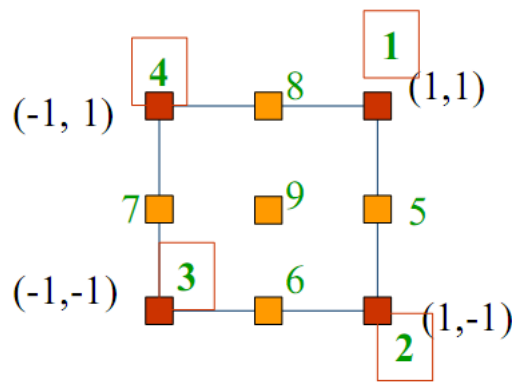
$$\phi_2(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{4}(1 + \xi_1)(1 - \xi_2) \quad (50)$$

$$\phi_3(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{4}(1 - \xi_1)(1 - \xi_2) \quad (51)$$

$$\phi_4(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{4}(1 - \xi_1)(1 + \xi_2) \quad (52)$$

Funkcje te są iloczynami liniowych funkcji Lagrange'a w kierunkach ξ_1 i ξ_2 .

W elemencie m rozwiązania poszukujemy w bazie dziewięciu funkcji bikwadratowych. Do elementu referencyjnego dodajemy pięć nowych węzłów i dla wszystkich węzłów określamy funkcje kształtu:



Rysunek 11: Położenie węzłów elementu referencyjnego

Bikwadratowe funkcje kształtu dla obranych węzłów mają postać:

$$g_1(\xi_1, \xi_2) = \Phi_3(\xi_1)\Phi_3(\xi_2)$$

$$g_2(\xi_1, \xi_2) = \Phi_3(\xi_1)\Phi_1(\xi_2)$$

$$g_3(\xi_1, \xi_2) = \Phi_1(\xi_1)\Phi_1(\xi_2)$$

$$g_4(\xi_1, \xi_2) = \Phi_1(\xi_1)\Phi_3(\xi_2)$$

$$g_5(\xi_1, \xi_2) = \Phi_3(\xi_1)\Phi_2(\xi_2)$$

$$g_6(\xi_1, \xi_2) = \Phi_2(\xi_1)\Phi_1(\xi_2)$$

$$g_7(\xi_1, \xi_2) = \Phi_1(\xi_1)\Phi_2(\xi_2)$$

$$g_8(\xi_1, \xi_2) = \Phi_2(\xi_1)\Phi_3(\xi_2)$$

$$g_9(\xi_1, \xi_2) = \Phi_2(\xi_1)\Phi_2(\xi_2)$$

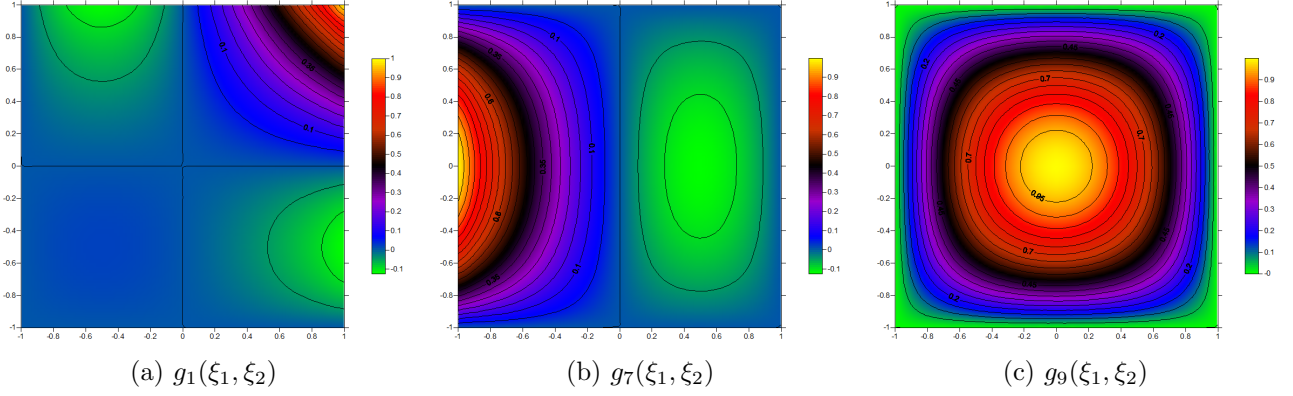
gdzie funkcja $\Phi_i(\xi)$ jest jedną z trzech kwadratowych funkcji kształtu określonych przez:

$$\Phi_1(\xi) = \frac{\xi}{2}(\xi - 1) \quad (53)$$

$$\Phi_2(\xi) = -(\xi - 1)(\xi + 1) \quad (54)$$

$$\Phi_3(\xi) = \frac{\xi}{2}(\xi + 1) \quad (55)$$

Wykresy wybranych funkcji bazowych dla kwadratowego elementu referencyjnego przedstawiają się następująco:



Rysunek 12: Przykładowe funkcje bazowe

Mając zdefiniowane funkcje kształtu wiemy, że rozwiązanie równania różniczkowego wewnątrz jednego elementu dane jest przez:

$$u(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^9 c_i^m g_i(\xi_1, \xi_2). \quad (56)$$

Lokalną macierz Hamiltona dla elementu m znajdziemy obliczając:

$$H_{ij}^m = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} (x^2 + y^2) = -T_{ij}^m + V_{ij}^m \quad (57)$$

gdzie T_{ij}^m to lokalna macierz energii kinetycznej, a V_{ij}^m to macierz potencjału.

Macierz energii kinetycznej określona jest przez:

$$T_{ij}^m = \frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \nabla \phi_i(x, y) \cdot \nabla \phi_j(x, y) dx dy \quad (58)$$

co w przestrzeni referencyjnej przedstawia się następująco:

$$T_{ij}^m = \int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^1 d\xi_2 J^{(m)}(\xi_1, \xi_2) \nabla g_i(\xi_1, \xi_2) \cdot \nabla g_j(\xi_1, \xi_2) \quad (59)$$

gdzie $J^{(m)}(\xi_1, \xi_2)$ jest jacobianem transformacji z przestrzeni referencyjnej do fizycznej, równym:

$$J^{(m)}(\xi_1, \xi_2) = \frac{\partial x}{\partial \xi_1} \frac{\partial y}{\partial \xi_2} - \frac{\partial y}{\partial \xi_1} \frac{\partial x}{\partial \xi_2}, \quad (60)$$

a iloczyn skalarny gradientów w przestrzeni referencyjnej wyliczymy z zależności:

$$\nabla g_i(x, y) \cdot \nabla g_j(x, y) = \left(\sum_{k=1}^2 \frac{\partial g_i}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial x} \right) \times \left(\sum_{k=1}^2 \frac{\partial g_j}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial x} \right) + \left(\sum_{k=1}^2 \frac{\partial g_i}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial y} \right) \times \left(\sum_{k=1}^2 \frac{\partial g_j}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial y} \right) \quad (61)$$

Zgodnie z mapowaniem elementu odniesienia do elementu fizycznego ze wzoru (48) pochodne współrzędnych fizycznych po referencyjnych określone są wzorami:

$$\frac{\partial x}{\partial \xi_1} = \frac{1}{4} \left(x_1^{(m)} + x_2^{(m)} - x_3^{(m)} - x_4^{(m)} + \xi_2 \left(x_1^{(m)} - x_2^{(m)} + x_3^{(m)} - x_4^{(m)} \right) \right) \quad (62)$$

$$\frac{\partial x}{\partial \xi_2} = \frac{1}{4} \left(x_1^{(m)} - x_2^{(m)} - x_3^{(m)} + x_4^{(m)} + \xi_1 \left(x_1^{(m)} - x_2^{(m)} + x_3^{(m)} - x_4^{(m)} \right) \right) \quad (63)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \xi_1} = \frac{1}{4} \left(y_1^{(m)} + y_2^{(m)} - y_3^{(m)} - y_4^{(m)} + \xi_2 \left(y_1^{(m)} - y_2^{(m)} + y_3^{(m)} - y_4^{(m)} \right) \right) \quad (64)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \xi_2} = \frac{1}{4} \left(y_1^{(m)} - y_2^{(m)} - y_3^{(m)} + y_4^{(m)} + \xi_1 \left(y_1^{(m)} - y_2^{(m)} + y_3^{(m)} - y_4^{(m)} \right) \right) \quad (65)$$

Pochodne odwrotne $\frac{\partial \xi_k}{\partial x}$ oraz $\frac{\partial \xi_k}{\partial y}$ potrzebne do wyznaczenia iloczynu skalarnego gradientów w przestrzeni referencyjnej obliczamy z zależności:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \xi_1}{\partial x} & \frac{\partial \xi_1}{\partial y} \\ \frac{\partial \xi_2}{\partial x} & \frac{\partial \xi_2}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi_1} & \frac{\partial y}{\partial \xi_2} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{J^{(m)}(\xi_1, \xi_2)} \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial \xi_2} & -\frac{\partial x}{\partial \xi_2} \\ -\frac{\partial y}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x}{\partial \xi_1} \end{pmatrix} \quad (66)$$

Lokalna macierz potencjału elementu m w przestrzeni referencyjnej dana jest przez:

$$V_{ij}^m = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^1 d\xi_2 J^{(m)} g_i(\xi_1, \xi_2) g_j(\xi_1, \xi_2) \left(x(\xi_1, \xi_2)^2 + y(\xi_1, \xi_2)^2 \right) \quad (67)$$

Macierz przekrywania, będąca odpowiednikiem wektora obciążeń, określona jest wzorem:

$$S_{ij}^m = \int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^1 d\xi_2 J^{(m)} g_i(\xi_1, \xi_2) g_j(\xi_1, \xi_2) \quad (68)$$

Obliczając wartości lokalnych macierzy wszystkie całki liczymy numerycznie używając złożenia sześciopunktowych jednowymiarowych kwadratur Gauss'a w każdym z kierunków:

$$\int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^1 d\xi_2 g(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_i w_j g(x_i, x_j) \quad (69)$$

gdzie w_k - wagi kwadratury, x_k - węzły kwadratury

Globalne macierze sztywności oraz przekrywania znajdujemy sumując według wzoru odpowiednie wartości lokalnych macierzy dla każdego z m elementów przechodząc po każdym z węzłów i, j :

$$H(lg(i, m), lg(j, m)) = \sum_m \sum_{i, j} H_{ij}^m \quad (70)$$

$$S(lg(i, m), lg(j, m)) = \sum_m \sum_{i, j} S_{ij}^m \quad (71)$$

gdzie funkcja $lg(l, k)$ przyporządkowuje globalny numer węzła dla lokalnego węzła l w elemencie k .

Do macierzy globalnych wprowadzamy warunki brzegowe. Chcemy, aby funkcje własne zniknęły na brzegu - osiągniemy to przez wyzerowanie k -tego wiersza oraz kolumny, gdzie k to globalny numer węzła brzegowego, a następnie ustawienie wartości $H_{kk} = 1$ oraz $S_{kk} = -1$. Spowoduje to, że dostaniemy zdegenerowaną wartość własną równą -1 tylu krotnie ile jest węzłów brzegowych.

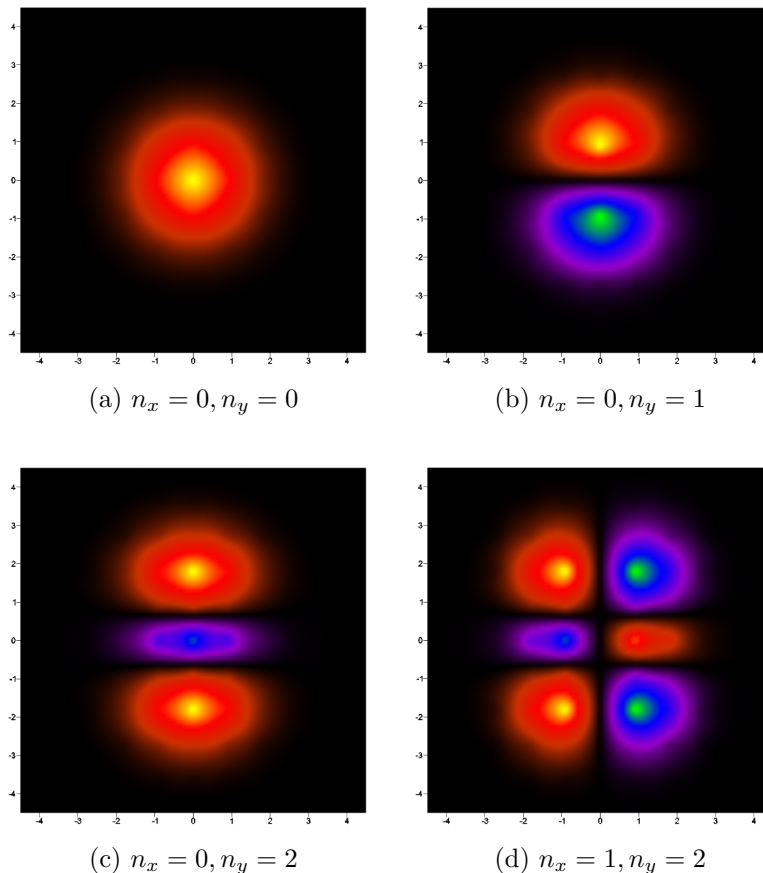
Tak przygotowane macierze wstawiamy do układu równań i znajdujemy wartości współczynników c_i . Następnie ze wzoru

$$u(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^9 c_i^m g_i(\xi_1, \xi_2). \quad (72)$$

znajdujemy rozwiązanie w każdym z węzłów siatki.

3.2.1 Pierwsze wyniki

Rozwiązujemy równanie własne dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego na obszarze podzielonym na 25 elementów. Wykresy funkcji falowych dla kilku pierwszych stanów własnych przedstawiają się następująco:



Rysunek 13: Wykresy funkcji falowych kilku stanów własnych

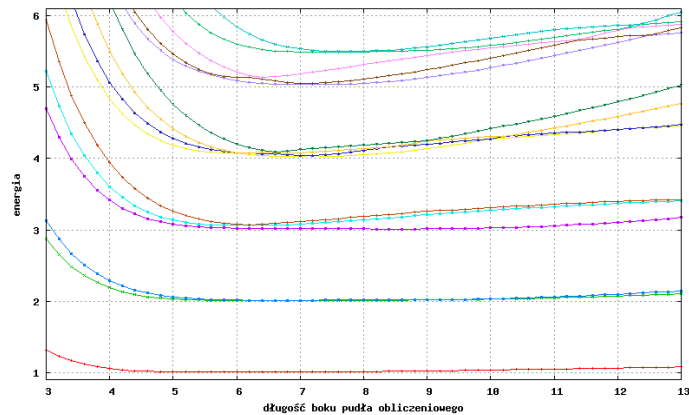
W poniższej tabeli przedstawiono kilka pierwszych wartości własnych oraz błąd rozwiązania numerycznego.

liczby falowe		rozwiązanie		
i	j	analityczne	numeryczne	błąd
0	0	1.0	1.0032	0.0032
1	0	2.0	2.0800	0.0800
0	1	2.0	2.1075	0.1075
2	0	3.0	3.0432	0.0432
0	2	3.0	3.0911	0.0911
1	1	3.0	3.1843	0.1843

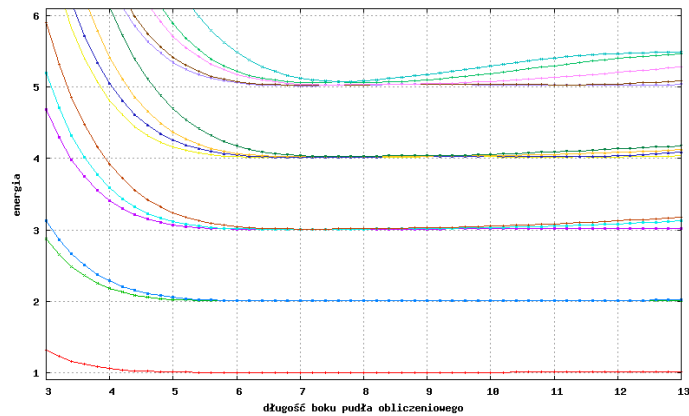
Widzimy, że odchylenie rozwiązania numerycznego od analitycznego jest stosunkowo duże oraz znacząco wzrasta dla wyższych wartości własnych. Jednym z parametrów modelu, który możemy zmienić w celu poprawienia dokładności rozwiązania, jest rozmiar pudła obliczeniowego. Z wykresu funkcji falowej widzimy, że na brzegach jest praktycznie stała, a zmienia swoje wartości w środkowej części obszaru obliczeń. Odpowiednio dobierając pudło obliczeniowe uzyskamy dokładniejsze wartości dla elementów mających największy ‘wkład’ w rozwiązanie.

3.2.2 Optymalizacja pudła obliczeniowego

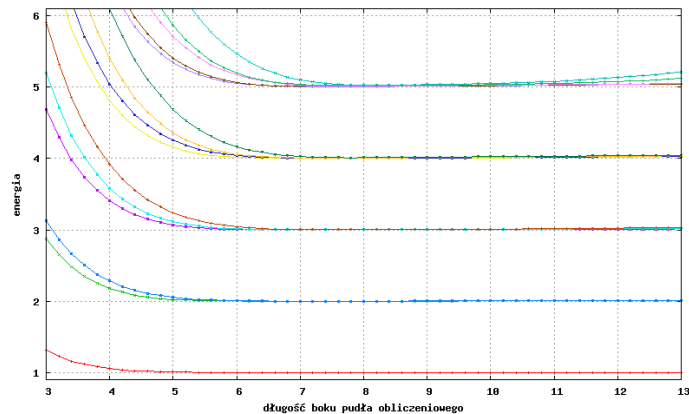
Zbadamy wartości energii dla stanów własnych oscylatora w funkcji długości boku pudła obliczeniowego. Rachunki przeprowadzimy dla obszaru podzielonego na 36, 100 oraz 196 identycznych, kwadratowych elementów.



(a) siatka 6×6



(b) siatka 10×10

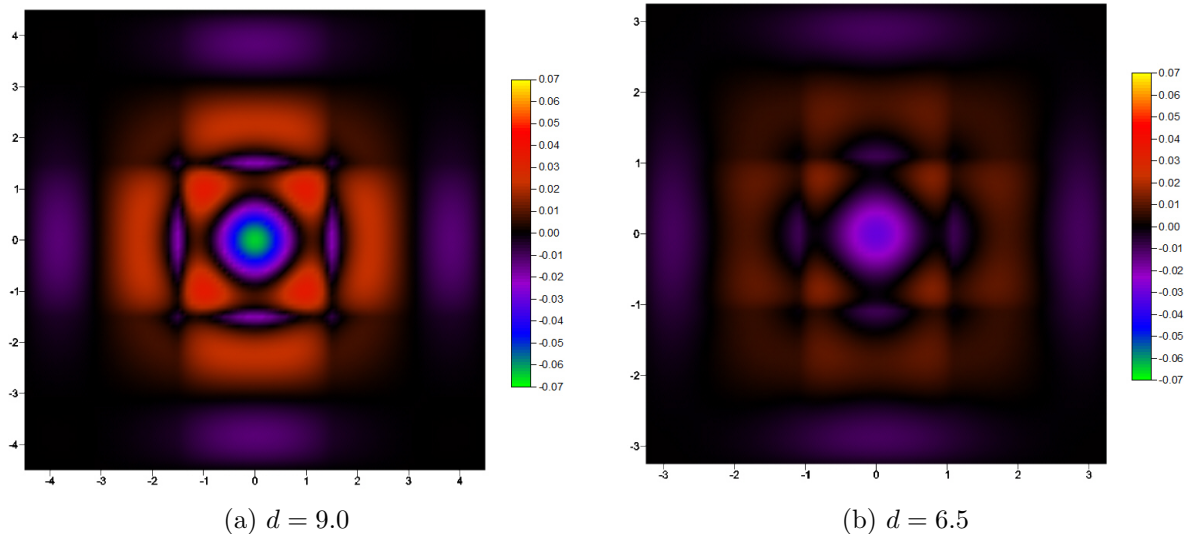


(c) siatka 14×14

Rysunek 14: Wartości energii w funkcji rozmiaru pudła obliczeniowego dla różnych siatek

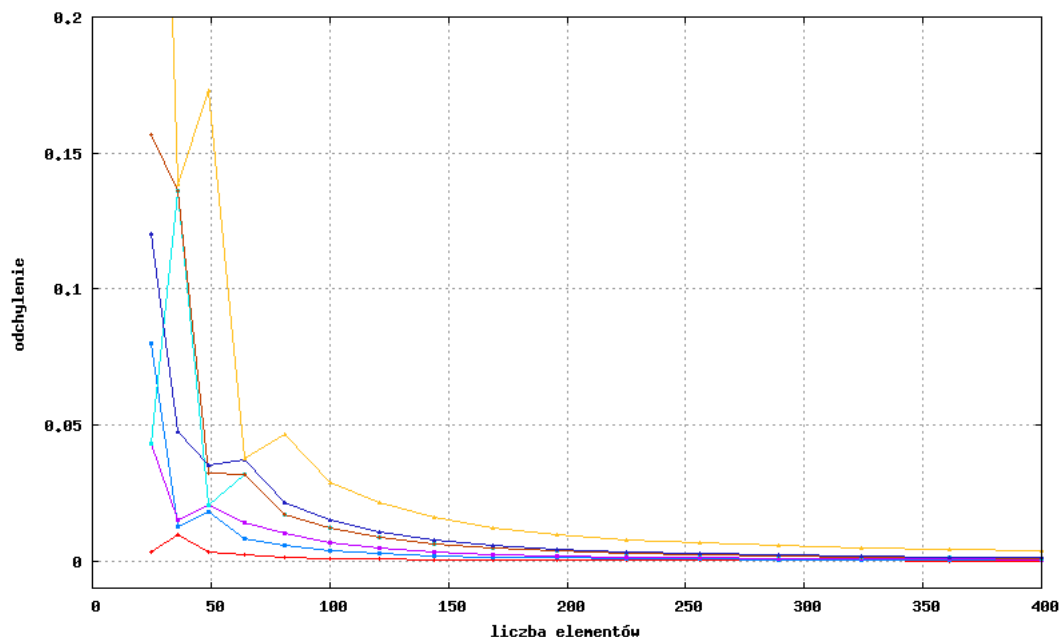
Z powyższych wykresów wynika, że rozmiar pudła obliczeniowego, ma znaczący wpływ na rozwiązanie obliczane na siatce o małej liczbie elementów. Jak widzimy na wykresie 14a najdokładniejsze rozwiązanie dla siatki 6×6 , otrzymany ustawiając rozmiar obszaru obliczeniowego na wartość $d \approx 6.5$. Natomiast dla siatek o znacznej liczbie elementów, długość boku pudła obliczeniowego ma mniejszy wpływ na błąd rozwiązania. Jednak, żeby otrzymać małe odchylenie od wartości analitycznych, rozmiar obszaru musi osiągnąć pewną minimalną wartość tak, aby rozwiązanie się w nim 'zmieściło' - w powyższym przypadku jest to długość boku równa $d \approx 8$.

Porównując odchylenie funkcji falowej pierwszego stanu własnego wyliczonej numerycznie od wartości analitycznej również widzimy, że zastosowanie odpowiedniej wielkości pudła pozwoliło na osiągnięcie o blisko połowę mniejszego błędu obliczeń.



Rysunek 15: Błąd rozwiązania numerycznego dla pudeł o różnym rozmiarze

Kolejnym parametrem umożliwiającym poprawienie dokładności wyliczeń jest liczba elementów skończonych użytych w modelu. Sprawdźmy jak zmieniają się wartości błędów obliczeń, dla energii poszczególnych stanów własnych, w zależności od ilości elementów w siatce.



Rysunek 16: Błędy rozwiązania dla energii poszczególnych stanów w funkcji liczby elementów

Z wykresu widzimy, iż zwiększanie liczby elementów siatki, a przez to ilości węzłów, wpływa na znaczne zmniejszenie odchylenia rozwiązania numerycznego od wartości analitycznych.

Degeneracja wartości własnych

O zdegenerowanych wartościach własnych mówimy w przypadku, gdy jednej wartości własnej odpowiada kilka różnych funkcji własnych. Krotnością degeneracji nazywamy liczbę niezależnych funkcji odpowiadających jednej wartości własnej. W tabeli ?? widzimy, że dla trzecia wartość własna jest zdegenerowana trzykrotnie. Degeneracja wartości własnych w przypadku kwantowego oscylatora w 2-wymiarowej przestrzeni wynika z symetrii modelu. W celu zniesienia degeneracji musimy 'zaburzyć' symetrię wprowadzając inną wartość potencjału w kierunku x niż w kierunku y . Zgodnie ze wzorem (36) wiemy, że hamiltonian 2-wymiarowego oscylatora harmonicznego jest sumą hamiltonianów w każdym z kierunków

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y = \frac{-\hbar^2}{2ma^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) + \frac{-\hbar^2}{2ma^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) \quad (73)$$

gdzie $V_x(x) = \frac{m\omega_x^2}{2}x^2$ oraz $V_y(y) = \frac{m\omega_y^2}{2}y^2$ określają potencjały w kierunkach odpowiednio x i y . Ustawienie $\omega_x \neq \omega_y$ pozwoli na otrzymanie różnych wartości potencjałów.

Popatrzmy jak przedstawiać się będą wartości energii dla poszczególnych stanów własnych, jeżeli zastosujemy różne wartości potencjałów. Zgodnie ze wzorem (10) za jednostkę energii przyjmujemy wartość $\epsilon = \hbar\omega$ przez co energia układu wyraża się przez

$$E_{n_x n_y} = E_{n_x} + E_{n_y} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \epsilon_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \epsilon_y \quad (74)$$

Przyjmując $\omega_x = 1.1\omega_y$ wartości energii poszczególnych stanów własnych będą określone zależnością

$$E_{n_x n_y} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) 1.1\epsilon + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \epsilon \quad (75)$$

dzięki czemu zniesiona zostanie degeneracja wszystkich stanów wzbudzonych, ponieważ każdym stanowi własnemu odpowiadać będzie inna wartość energii, przykładowo $E_{12} \neq E_{21}$.

Znajdujemy wartości energii kilku pierwszych stanów własnych dla siatki 10×10 i zniesionej degeneracji.

liczby falowe		rozwiązanie		
n_x	n_y	analityczne	numeryczne	błąd
0	1	2.05	2.05619	0.00619
1	0	2.15	2.15740	0.00740
0	2	3.05	3.06946	0.01946
1	1	3.15	3.16174	0.01174
2	0	3.25	3.27590	0.02590
0	3	4.05	4.08615	0.03615
1	2	4.15	4.17502	0.02502
2	1	4.25	4.28024	0.03024
3	0	4.35	4.39059	0.04059

W powyższej tabeli widzimy, że wszystkim stanom własnym odpowiadają różne wartości energii.

3.2.3 Zagęszczanie siatki dla elementów czworokątnych

Zwiększanie liczby węzłów w siatce pozwala na znaczne poprawienie dokładności wyników obliczeń, jednak skutkuje to wydłużeniem czasu kalkulacji i zwiększeniem zapotrzebowania na zasoby pamięciowe. Z uwagi na fakt, że cała siatka jest równomiernie pokryta punktami często liczymy bardzo dokładnie obszary, w których funkcja jest mało zmienna i nie wymaga obliczeń z dużą dokładnością, np. na brzegach pudła obliczeniowego. Dlatego lepszym rozwiązaniem jest znalezienie obszarów, w których funkcja wykazuje dużą zmienność i pokrycie ich bardziej gęstą siatką - mającą większą liczbę elementów, niż obszary, w których rozwiązanie zmienia się tylko nieznacznie.

W celu zoptymalizowania siatki, w miejscach gdzie funkcja jest najbardziej zmienna, musimy znaleźć "wkład" każdego elementu w modelu do ogólnego rozwiązania. Wiemy, że wartość własna jest równa wartości oczekiwanej dla unormowanego wektora własnego, więc:

$$E_\mu = \frac{\langle \Psi_\mu | H \Psi_\mu \rangle}{\langle \Psi_\mu | \Psi_\mu \rangle} = \sum_{i=1}^m \epsilon_m^\mu \quad (76)$$

gdzie m jest liczbą elementów siatki, a ϵ_m^μ jest poszukiwaną wartością przyczynka do energii stanu μ pochodząca od elementu m .

Rozpisując ϵ_m^μ mamy:

$$\epsilon_m^\mu = \frac{\sum_{k=1}^9 \sum_{l=1}^9 C(lg(m, k), \mu) C(lg(m, l), \mu) \mathbf{H}(k, l, m)}{\langle \Psi_\mu | \Psi_\mu \rangle} \quad (77)$$

gdzie:

$lg(m, i)$ - funkcja przyporządkowująca globalny numer dla lokalnego węzła i w elemencie m ,

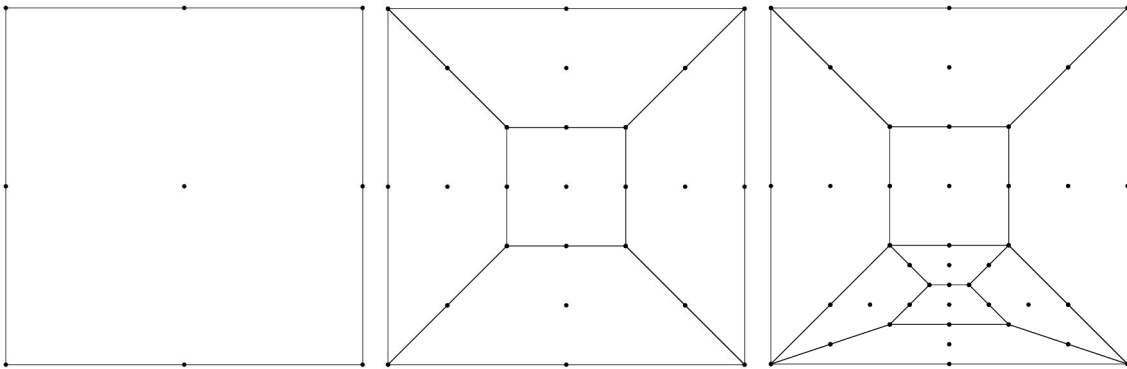
$C(i, \mu)$ - obliczona wartość współczynnika globalnego numeru węzła i dla stanu μ ,

\mathbf{H} - lokalny hamiltonian dla elementu m ,

a norma $\langle \Psi_\mu | \Psi_\mu \rangle$ rozpisana po elementach wyraża się przez:

$$\langle \Psi_\mu | \Psi_\mu \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^9 \sum_{l=1}^9 C(lg(i, k), \mu) C(lg(i, l), \mu) \mathbf{E} \mathbf{S}(k, l, i) \quad (78)$$

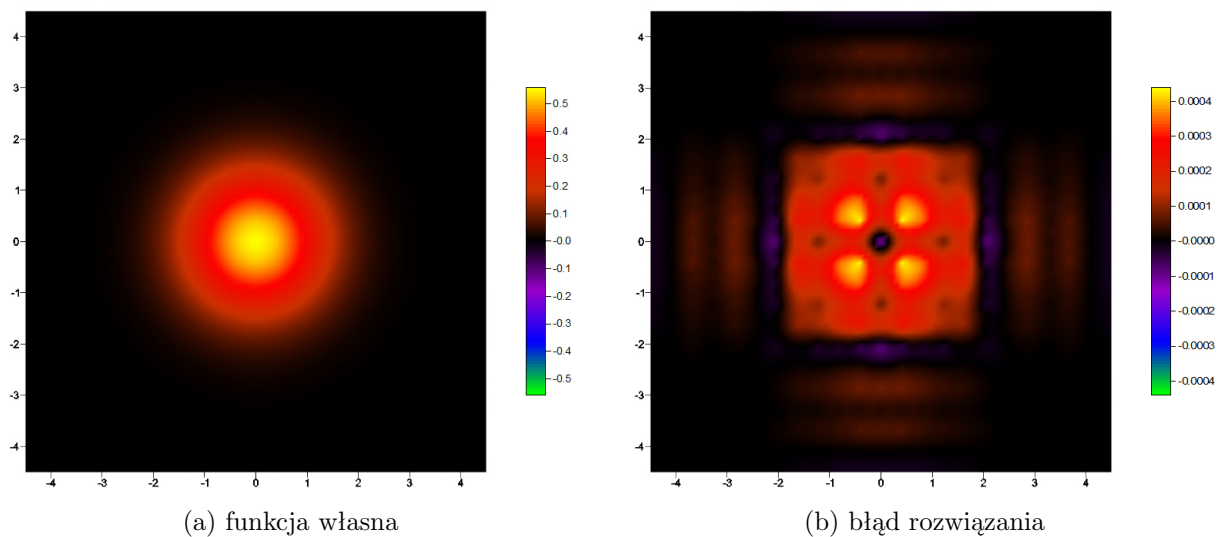
Zgodnie ze wzorem (77) obliczamy wartość przyczynka do całkowitej energii dla każdego elementu w siatce. Następnie element mający największy wkład w rozwiązanie dzielimy na 5 mniejszych elementów. Sposób podziału przedstawiony jest na poniższych rysunkach:



Rysunek 17: Kolejne etapy podziału pojedynczego elementu na mniejsze części

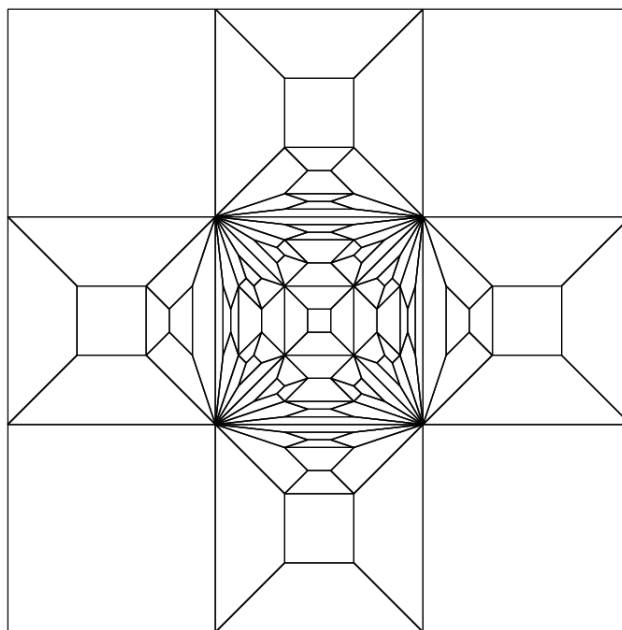
Siatkę zagęszczamy do momentu uzyskania żądanej liczby elementów lub węzłów.

Porównamy rezultat otrzymany przy zagęszczaniu siatki z rozwiązaniem obliczonym na siatce równomiernie rozłożonych elementów. Znajdujemy odchylenie od rozwiązania analitycznego dla pierwszej wartości własnej na siatce 121 kwadratowych elementów.



Rysunek 18: Rozwiązanie dla 1. wartości własnej na siatce 11x11 elementów

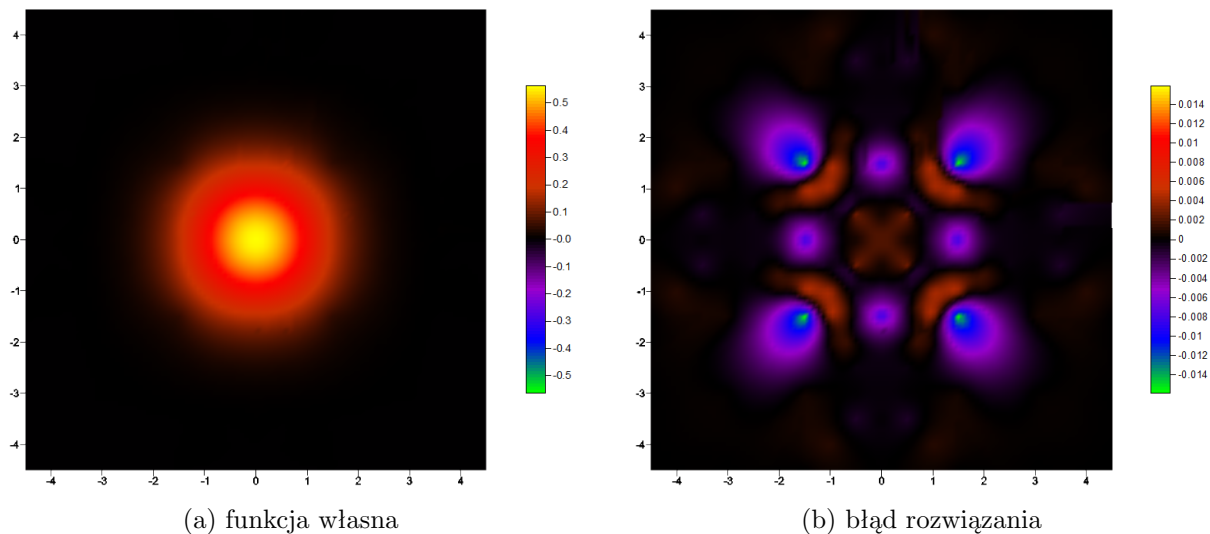
Następnie znajdujemy rozwiązanie dla pierwszej wartości własnej metodą zagęszczania siatki zaczynając o siatki 3x3 elementów. Siatkę zagęszczamy do momentu uzyskania 121 elementów.



Rysunek 19: Zagęszczona siatka 121 elementów

Widzimy, że siatka została najbardziej zagęszczona w okolicach centrum pudła. Na brzegach pudła obliczeniowego elementy nie zostały podzielone, gdyż mają najmniejszy wpływ na rozwiązanie.

Sprawdźmy jak przedstawia się rozwiązanie dla powyższej siatki.



Rysunek 20: Rozwiązanie dla 1. wartości własnej na zagęszczonej siatce 121 elementów

Po zagęszczeniu siatki wartość energii dla pierwszej wartości własnej równa jest $E=1.006$, co w porównaniu do energii $E=1.001$ obliczonej dla siatki równomiernej, jest nieco gorszym wynikiem.

Porównując wartości błędów obliczeń dla zagęszczonej oraz równomiernej siatki 121 elementów widzimy, że poprzez zwiększenie liczby elementów w środkowym obszarze pudła obliczeniowego, uzyskaliśmy mniejszy błąd rozwiązania na tym obszarze. Natomiast na brzegach pudła, gdzie pozostały elementy o stosunkowo dużej powierzchni, błąd rozwiązania jest znacząco większy w porównaniu do wyników dla siatki kwadratowych równomiernie rozłożonych elementów.

3.2.4 Wygładzanie siatki metodą Laplace'a

Optymalizując siatkę elementy dzielone są na coraz mniejsze części, co po kilku podziałach tego samego elementu, może skutkować nieoptymalnymi elementami o wydłużonym kształcie prowadzącymi do pogorszenia dokładności obliczeń. Sposobem na poprawienie jakości optymalizowanej siatki jest jej wygładzanie. Pozwala ono na uzyskanie elementów o bardziej optymalnych kształtach. Do wygładzania siatki użyjemy wygładzania Laplace'a.

Wygładzanie Laplace'a jest prostym algorytmem lokalnego wygładzania siatki. Algorytm wyznacza nowe położenie optymalizowanego węzła względem współrzędnych sąsiadujących z nim węzłów.

Funkcja kosztu dla wygładzania Laplace'a jest sumą kwadratów długości krawędzi mających wspólny węzeł i przedstawia się następująco:

$$f(x, y) = \sum_{i=1}^k (\|v_i\|_{L_2})^2 = \sum_{i=1}^k ((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2) \quad (79)$$

gdzie k - liczba sąsiednich węzłów.

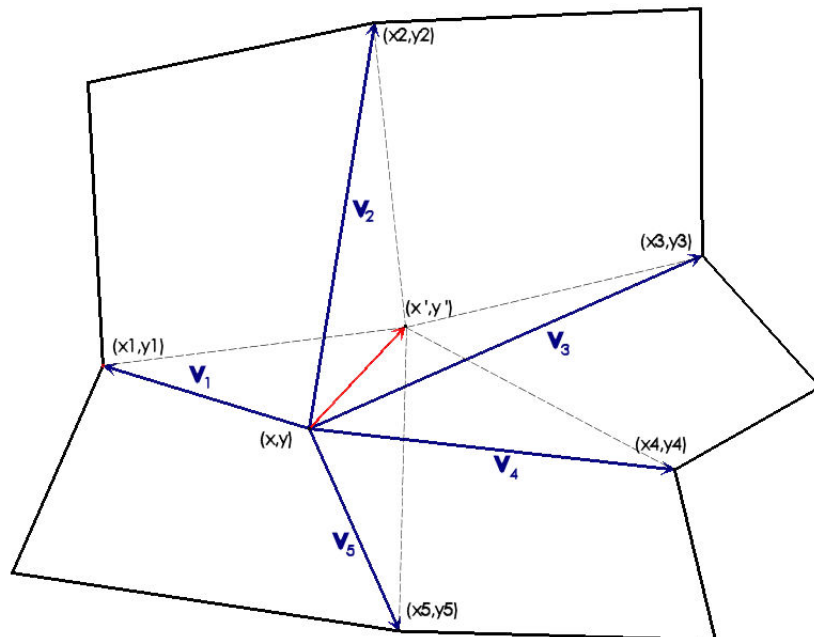
Znalezienie minimum tej funkcji sprowadza się do znalezienia środka geometrycznego węzłów sąsiadujących z optymalizowanym:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (80)$$

więc nowe współrzędne optymalizowanego węzła (x', y') obliczamy ze wzorów:

$$x' = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k x_i, \quad y' = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_i \quad (81)$$

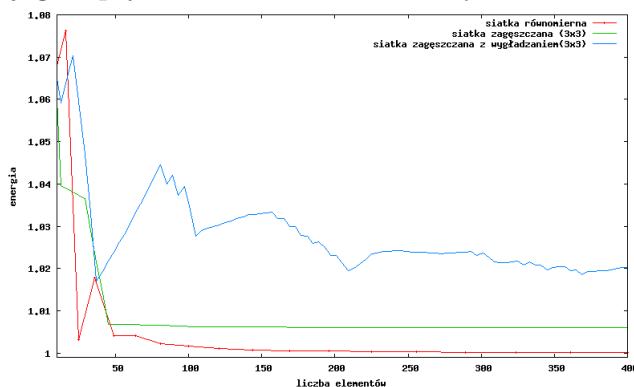
Optymalizację węzłów przeprowadzamy dla każdego węzła siatki poza węzłami brzegowymi. Cały algorytm wygładzania Laplace'a uruchamiamy kilka razy w celu maksymalnego zoptymalizowania kształtu elementów.



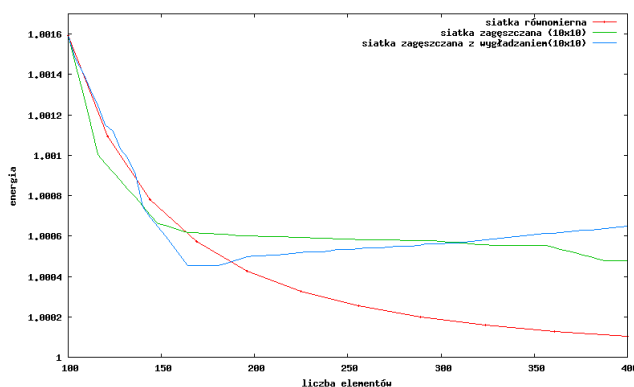
Rysunek 21: Optymalizacja położenia węzła dla siatki kwadratowych elementów

Rysunek 21 ilustruje przykładowe działanie algorytmu wygładzania Laplace'a dla węzła o współrzędnych (x, y) . Widzimy, że zoptymalizowanie położenia rozpatrywanego węzła, poprzez przesunięcie go do punktu o współrzędnych (x', y') , pozwoliło na uzyskanie siatki o elementach, których kształty są zbliżone do kwadratów, a przez to bardziej optymalne z punktu widzenia obliczeń metodą elementów skończonych.

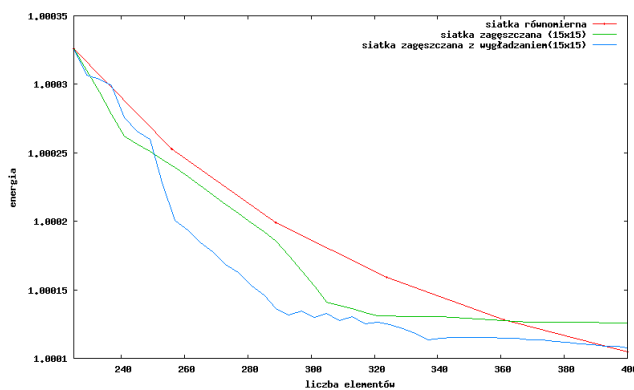
Sprawdźmy, czy wygładzanie siatki pozwoli na poprawienie dokładności obliczeń. Porównamy wartości energii dla kilku pierwszych wartości własnych obliczonych na optymalizowanych siatkach, a także zastosujemy wygładzanie Laplace'a w celu uzyskania poprawy kształtu elementów oraz zbadamy jego wpływ na dokładność rozwiązania.



(a) start z siatki 3×3



(b) start z siatki 10×10



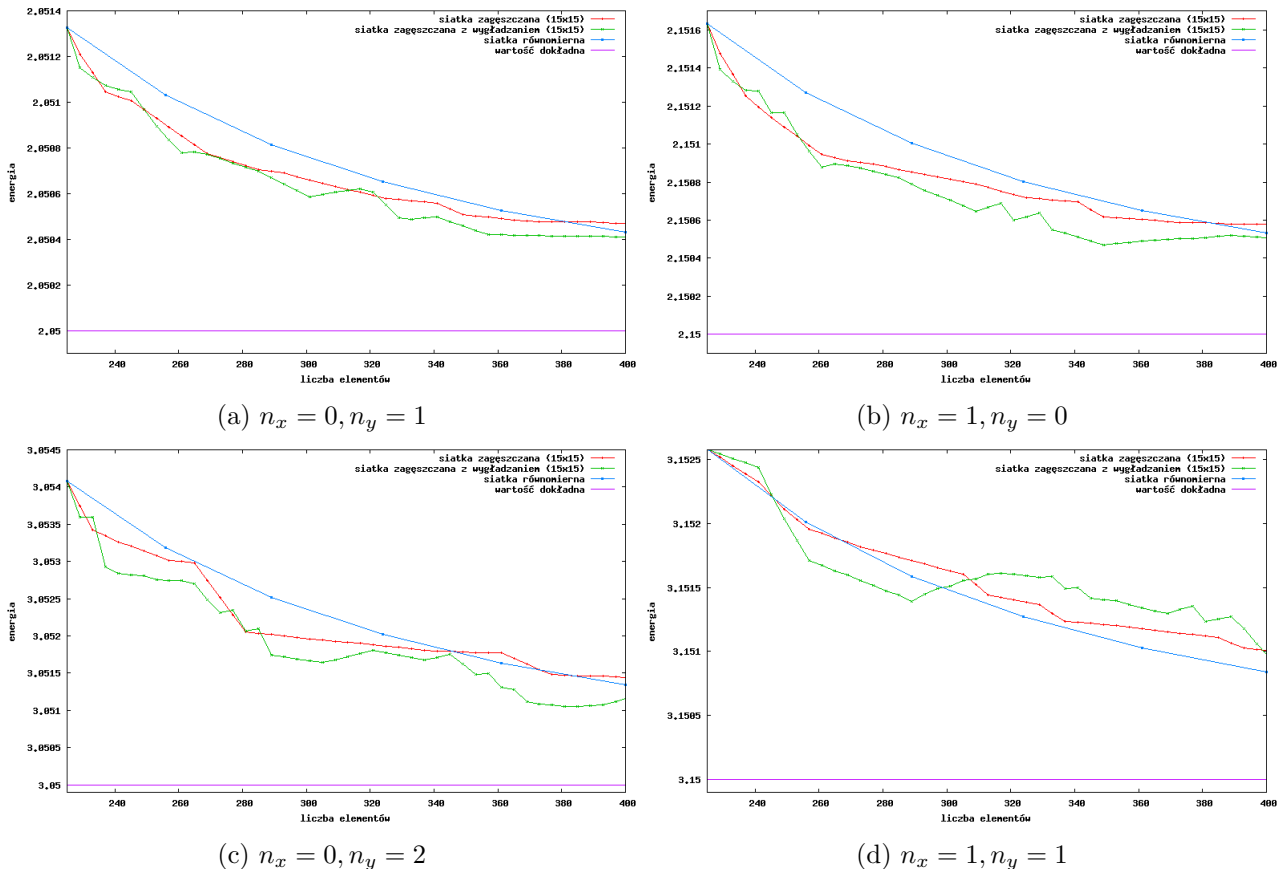
(c) start z siatki 15×15

Rysunek 22: Wykres energii dla pierwszej wartości własnej w funkcji liczby elementów siatki. Na wykresie 22 przedstawiono wartości energii dla pierwszego stanu własnego w zależności od liczby elementów siatki. Obliczenia przeprowadzono startując z siatek o różnej liczbie identycznych kwadratowych elementów oraz rozmiarze pudła $d = 9.0$. Siatki zagęszczano do momentu uzyskania co najmniej 400 elementów.

Z wykresu widzimy, że najgorsze rezultaty otrzymaliśmy startując z siatek o małej początkowej liczbie elementów. Zaczynając obliczenia od większej liczby kwadratowych elementów uzyskaliśmy znaczną poprawę dokładności rozwiązania. Zastosowanie wygładzania Laplace'a do optymalizacji kształtu elementów w zagęszczanych siatkach zmniejszyło błąd obliczeń, ale

tylko w przypadku, gdy obliczenia były rozpoczynane od siatek o dużej liczbie elementów. Startując z siatki składającej się z 15×15 elementów i stosując zagęszczanie uzyskaliśmy poprawę dokładności obliczeń w stosunku do siatki równomiernej. Ponadto wygładzając tę siatkę dodatkowo zmniejszyliśmy błąd obliczeń. Jednak przewaga dokładności siatek zagęszczanych jest widoczna tylko dla siatek składających się z mniej niż 350 elementów. Powyżej tej wartości stosując siatkę równomierną uzyskujemy dokładniejsze rozwiązanie.

Popatrzmy jak przedstawiają się rozwiązania dla energii stanów wzbudzonych. Obliczenia przeprowadzimy rozpoczynając od siatek złożonych z 15×15 kwadratowych elementów oraz rozmiarze pudła $d = 9.0$.



Rysunek 23: Wykresy energii stanów własnych w funkcji liczby elementów siatki

Widzimy, że podobnie jak w przypadku pierwszej wartości własnej, tak i dla wyższych stanów własnych, zastosowanie wygładzania Laplace'a pozwoliło na uzyskanie nieco mniejszego błędu obliczeń dla zagęszczanej siatki, poza stanem ($n_x = 1, n_y = 1$) gdzie zagęszczanie siatki nie przyniosło poprawy dokładności rozwiązania.

Podsumowując dochodzimy do wniosku że, rozpoczynanie obliczeń od siatki o znacznej liczbie elementów oraz wygładzanie zagęszczanej siatki daje najlepsze rezultaty, jednak wyniki nie są znacząco lepsze niż dla siatek równomiernych. Generalnie możemy stwierdzić, że rozwiązania otrzymane dla adaptacyjnych siatek oscylują w granicach błędów otrzymywanych dla niezagęszczanych równomiernych siatek posiadających symetrycznie rozłożone kwadratowe elementy.

3.3 Metoda elementów skończonych - elementy trójkątne

Tak jak poprzednio zastosujemy metodę elementów skończonych do znalezienia rozwiązania niezależnego od czasu równania Schroedinger'a

$$(\hat{H} - E)\Psi = 0 \quad (82)$$

w podprzestrzeni $\Omega \subset R^2$, gdzie $E \in \sigma(\hat{H})$.

Przybliżonym rozwiązaniem równania (82) będzie funkcja falowa określona wzorem

$$\Psi(x, y) = \sum_i c_i \phi_i(x, y) \quad (83)$$

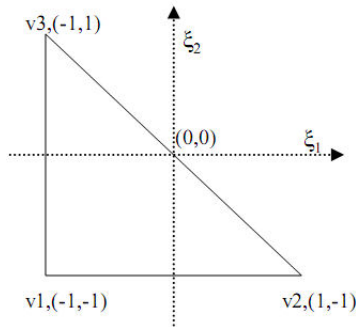
gdzie funkcje $\phi_i(x, y)$ stanowią bazę przestrzeni Ω , a wartości c_i są liczbami rzeczywistymi, które znajdziemy rozwiązując równanie macierzowe

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c} \quad (84)$$

w którym \mathbf{H} to macierz Hamiltonianu, a \mathbf{S} określa macierz przekrywania.

W tym przypadku obszar Ω podzielimy na m trójkątnych elementów skończonych, w których zdefiniujemy funkcje bazowe.

Pojedynczy element w przestrzeni referencyjnej będzie trójkątem prostokątnym o wierzchołkach w punktach $(1, -1)$, $(-1, -1)$ oraz $(-1, 1)$.



Rysunek 24: Element odniesienia w przestrzeni referencyjnej

Mapowanie elementu odniesienia (ξ_1, ξ_2) do trójkątnego elementu fizycznego dane jest przez wzór:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^3 \begin{pmatrix} x_i^{(m)} \\ y_i^{(m)} \end{pmatrix} \phi_i(\xi_1, \xi_2) \quad (85)$$

gdzie $(x_i^{(m)}, y_i^{(m)})$ są współrzędnymi i -tego wierzchołka elementu m w przestrzeni fizycznej, natomiast funkcje ϕ_i to liniowe funkcje kształtu określone wzorami

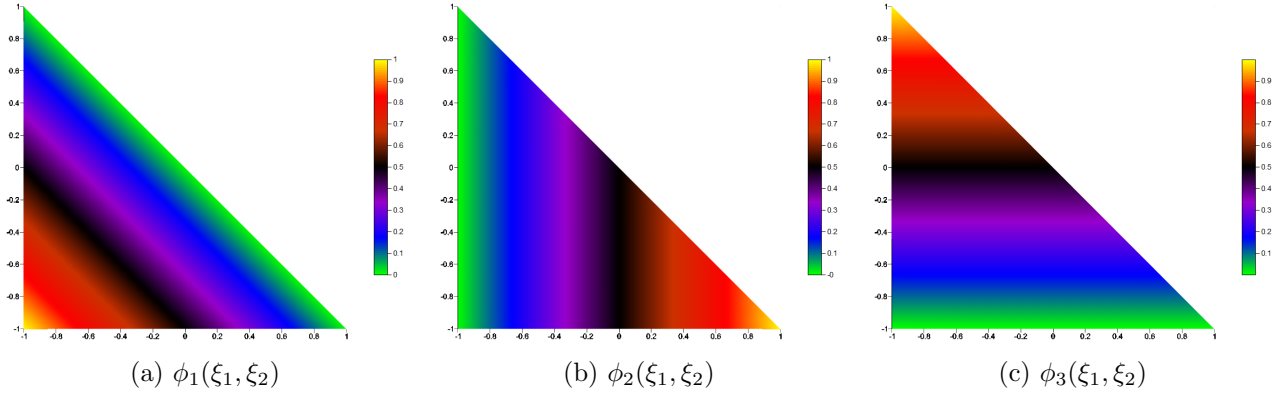
$$\phi_1(\xi_1, \xi_2) = -\frac{\xi_1 + \xi_2}{2} \quad (86)$$

$$\phi_2(\xi_1, \xi_2) = \frac{1 + \xi_1}{2} \quad (87)$$

$$\phi_3(\xi_1, \xi_2) = \frac{1 + \xi_2}{2} \quad (88)$$

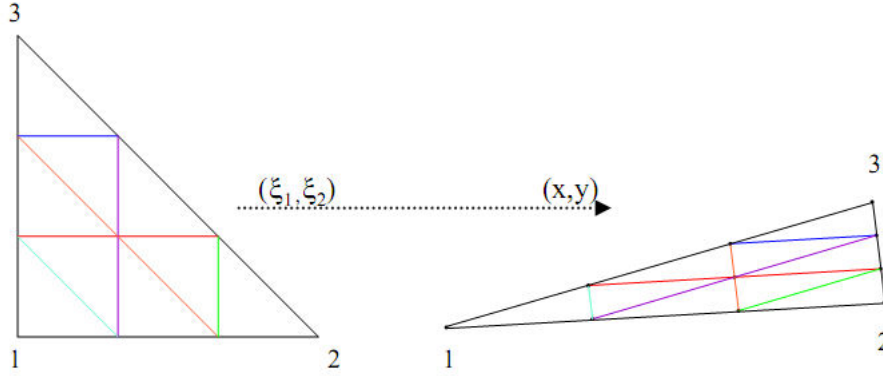
Powyższe funkcje kształtu stanowią jednocześnie bazę przestrzeni, w której podzukujemy rozwiązania.

Wykresy funkcji bazowych dla trójkątnego elementu referencyjnego przedstawiają się następująco:



Rysunek 25: Funkcje bazowe elementu trójkątnego

Ponieważ mapowanie elementu odniesienia do fizycznego jest ściśle liniowe, a nie biliniowe jak w przypadku czworokątów, mamy pewność, że przy przechodzeniu z przestrzeni referencyjnej do fizycznej zostanie zachowana równoległość ścian elementów.



Rysunek 26: Transformacja elementu z przestrzeni referencyjnej do fizycznej

Mając określone funkcje bazowe rozwiązania możemy zdefiniować wzór na obliczenie lokalnej macierzy sztywności dla elementu m , który zgodnie ze wzorem (57) przedstawia się następująco:

$$H_{ij}^m = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \nabla \phi_i(x, y) \cdot \nabla \phi_j(x, y) dx dy + \frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \phi_i(x, y) \phi_j(x, y) (x^2 + y^2) dx dy \quad (89)$$

natomiast lokalna macierz przekrywania określona jest zależnością

$$S_{ij}^m = \int_{\Omega_m} \phi_i(x, y) \phi_j(x, y) dx dy. \quad (90)$$

Przenosząc powyższe równania do przestrzeni referencyjnej otrzymujemy odpowiednio

$$H_{ij}^m = -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^{\xi_1} d\xi_2 J^{(m)}(\xi_1, \xi_2) \nabla g_i(\xi_1, \xi_2) \cdot \nabla g_j(\xi_1, \xi_2) + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^{\xi_1} d\xi_2 J^{(m)} g_i(\xi_1, \xi_2) g_j(\xi_1, \xi_2) (x(\xi_1, \xi_2)^2 + y(\xi_1, \xi_2)^2) \quad (91)$$

oraz

$$S_{ij}^m = \int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^{\xi_1} d\xi_2 J^{(m)} g_i(\xi_1, \xi_2) g_j(\xi_1, \xi_2) \quad (92)$$

Wartość wyrażenia $\nabla g_i(\xi_1, \xi_2) \cdot \nabla g_j(\xi_1, \xi_2)$ znajdziemy zgodnie ze wzorem (61).

Natomiast jacobian $J^{(m)}$ określony jest wzorem

$$J^{(m)} = \frac{\partial x}{\partial \xi_1} \frac{\partial y}{\partial \xi_2} - \frac{\partial y}{\partial \xi_1} \frac{\partial x}{\partial \xi_2} = \frac{1}{4} [(-x_1 + x_2)(-y_1 + y_3) - (-y_1 + y_2)(-x_1 + x_3)] \quad (93)$$

skąd wynika, że

$$J^{(m)} = \frac{\Delta}{\Delta_{ref}} \quad (94)$$

gdzie Δ_{ref} jest polem trójkąta w przestrzeni referencyjnej i ma stałą wartośćią równą $\Delta_{ref} = 2$, a Δ jest polem trójkąta w przestrzeni fizycznej i jest równa

$$\Delta = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} \quad (95)$$

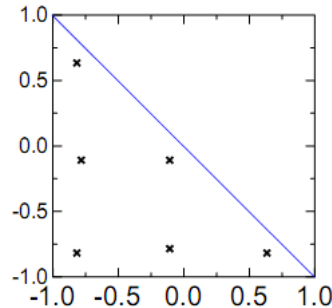
Jak widzimy wartość jacobianu zależy jedynie od pola powierzchni trójkąta w przestrzeni fizycznej, a nie od położenia, jak to miało miejsce w przypadku elementów czworokątnych.

Ponieważ we wzorach (91) oraz (92) górna granica całkowania po zmiennej ξ_2 jest zmienna, do scałkowania posłużymy się ekonomiczną kwadraturą Gauss'a dla trójkąta odniesienia [1]. Jest to sześciopunktowa kwadratura pozwalająca na scałkowanie wielomianów 4. stopnia, której punkty i wagi określone są następująco:

współrzędna ξ_1	współrzędna ξ_2	waga
-0.108103018168070	-0.108103018168070	0.446763179356022
-0.108103018168070	-0.783793963663860	0.446763179356022
-0.783793963663860	-0.108103018168070	0.446763179356022
-0.816847572980458	-0.816847572980458	0.219903487310644
-0.816847572980458	0.633695145960918	0.219903487310644
0.633695145960918	-0.816847572980458	0.219903487310644

Tabela 1: Wartości współrzędnych i wag ekonomicznej kwadratury Gauss'a

Graficzne przedstawienie rozkładu punktów ekonomicznej kwadratury Gauss'a w trójkącie odniesienia przedstawia poniższy wykres.



Rysunek 27: Rozkład punktów kwadratury

Całki we wzorach (91) oraz (92) liczymy numerycznie według zależności:

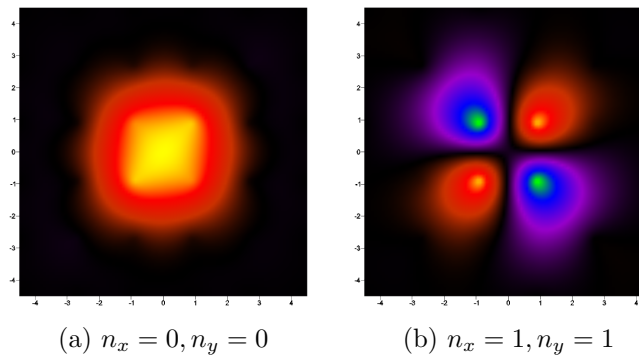
$$\int_{-1}^1 d\xi_1 \int_{-1}^{\xi_1} d\xi_2 g(\xi_1, \xi_2) = \sum_k w_k g(\xi_1^k, \xi_2^k) \quad (96)$$

gdzie w_k - wagi kwadratury, ξ_1^k, ξ_2^k - węzły kwadratury, $g(\xi_1^k, \xi_2^k)$ - funkcja podcałkowa.

Mając określone metodę całkowania numerycznego oraz wzory na lokalne macierze, dalsze obliczenia przeprowadzamy analogicznie do przypadku z elementami czworokątnymi, czyli znajdujemy lokalne macierze dla każdego elementu, które następnie składamy w macierze globalne, kolejnym krokiem jest wprowadzenie warunków brzegowych, a na końcu znalezienie szukanych współczynników c_i oraz określenie rozwiązania w każdym punkcie siatki zgodnie ze wzorem (83).

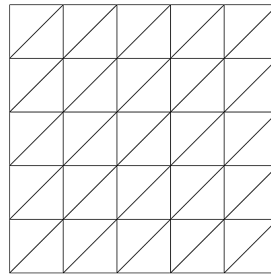
3.3.1 Pierwsze wyniki

Znajdźmy rozwiązanie równania własnego oscylatora na siatce podzielonej na 50 trójkątów.



Rysunek 28: Funkcje falowe obliczone na siatce trójkątnych elementów

Powyższe funkcje falowe zostały znalezione na siatce, składającej się z 50 równomiernie rozłożonych prostokątnych trójkątów, przedstawionej na rysunku 29.

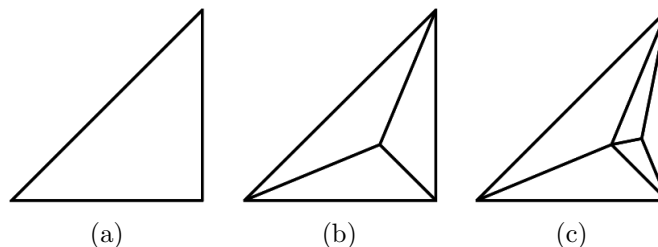


Rysunek 29: Siatka złożona z trójkątnych elementów

3.3.2 Zagęszczanie siatki

Zastosujemy automatyczne zagęszczanie siatki trójkątnych elementów i sprawdzimy czy pozwoli to na uzyskanie mniejszego błędu rozwiązania.

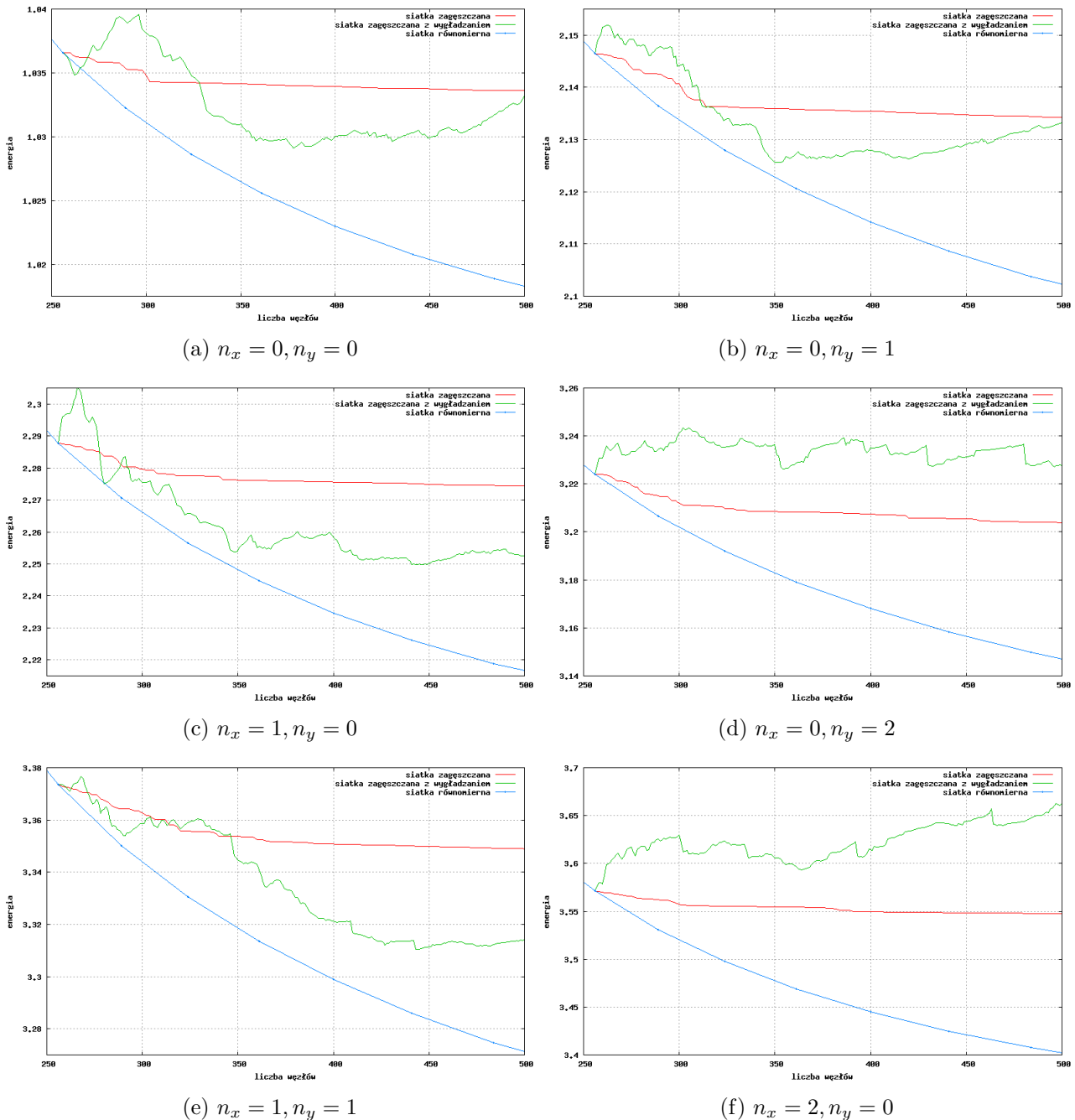
Siatkę zagęszczamy analogicznie jak w przypadku elementów czworokątnych. Dla każdego elementu zgodnie ze wzorem (77) znajdujemy wartość 'wkładu' w rozwiązanie, a następnie element o najwyższym przyczynku do całkowitej energii dzielimy na mniejsze części. W przypadku trójkątów, podział pojedynczego elementu nastąpi poprzez znalezienie środka ciężkości i utworzeniu trzech mniejszych trójkątów o wspólnym wierzchołku w znalezionym środku ciężkości.



Rysunek 30: Kolejne etapy podziału trójkątnego elementu na mniejsze części

Jak widzimy na rysunku 30 kolejne podziały na mniejsze części mogą skutkować w powstawaniu trójkątów o wydłużonym kształcie, a przez to nieoptymalnych z punktu widzenia metody elementów skończonych. Zastosujemy również algorytm wygładzania Laplace'a w celu optymalizacji siatki.

Popatrzmy jak przedstawiają się wartości energii poszczególnych stanów własnych w funkcji liczby węzłów siatki.

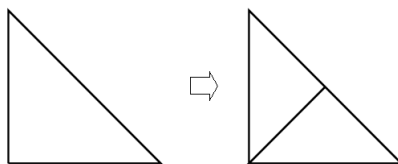


Rysunek 31: Wartości energii stanów własnych w funkcji liczby elementów siatki

Na powyższych wykresach widzimy, że zagęszczanie siatki, poprzez dzielenie pojedynczego elementu na 3 mniejsze trójkąty, nie przyniosło poprawy dokładności rozwiązania. Wyniki uzyskiwane przy stosowaniu zagęszczania siatki są znacznie gorsze od tych, otrzymywanych w przypadku, gdy używamy siatki z równomiernie rozłożonymi elementami. Wprowadzenie wygładzania Laplace'a pozwoliło na uzyskanie znacznie dokładniejszego rozwiązania, w porównaniu do siatki niewygładzanej, dla stanów własnych o liczbach falowych ($n_x = 1, n_y = 0$) i ($n_x = 1, n_y = 1$), oraz nieznacznie lepszego dla stanów ($n_x = 0, n_y = 0$) i ($n_x = 0, n_y = 1$). Jednak wygładzanie siatki poprawiło wyniki tylko w pojedynczych przypadkach i na ich podstawie nie możemy stwierdzić, że wygładzanie Laplace'a pozwala na uzyskanie mniejszego błędu obliczeń.

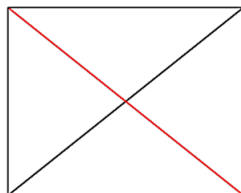
Zagęszczanie przez podział rekurencyjny

Pokazaliśmy, że zagęszczanie siatki poprzez podział elementu na trzy mniejsze trójkąty nie przynosi poprawy rezultatu, a najlepsze wyniki uzyskujemy dla siatek o równomierźnie rozłożonych elementach. Spróbujemy zastosować zagęszczanie siatki, które nie powoduje tworzenia się elementów trójkątnych o bardzo wydłużonych kształtach. Zwiększenie liczby elementów w danym obszarze siatki uzyskamy poprzez podział trójkąta na dwa mniejsze trójkąty, tak jak to pokazano na rysunku 32.



Rysunek 32: Podział pojedynczego trójkąta

Zauważmy, że po takim podziale jeden z węzłów, będący wierzchołkiem dwóch mniejszych trójkątów, będzie leżał na przeciwprostokątnej sąsiedniego trójkąta przystającego, a do takiej sytuacji nie możemy doprowadzić, gdyż zaburzyłoby to całkowicie wynik końcowy. Dlatego, aby można było w taki sposób przeprowadzić podział musimy również, w taki sam sposób, podzielić trójkąt sąsiadujący. Podział obu trójkątów uzyskamy poprzez połączenie ich niewspólnych wierzchołków, tak jak to przedstawiono na rysunku 33.



Rysunek 33: Podział dwóch sąsiadujących trójkątów

Jednak opisany podział trójkąta przystającego jest możliwy tylko wtedy, gdy ma on taki sam kształt jak trójkąt pierwotnie wybrany. W celu zapewnienia poprawnego podziału elementów do zagęszczania siatki musimy zastosować rekurencyjny algorytm dzielenia trójkątów.

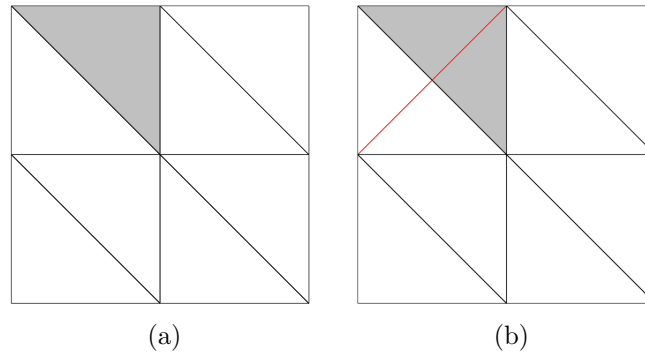
Założmy, że chcemy podzielić trójkąt m , wtedy kolejne kroki algorytmu przedstawiają się następująco:

- znajdź element n 'przystający' do przeciwprostokątnej trójkąta m
- jeżeli element n ma większe pole powierzchni od trójkąta m to wykonaj algorytm dzielenia dla elementu n
- jeżeli element m nie ma trójkąta 'przystającego' - oznacza to, że jest to element brzegowy i można podzielić trójkąt m
- jeżeli element n oraz m mają takie samo pole powierzchni to można podzielić oba trójkąty

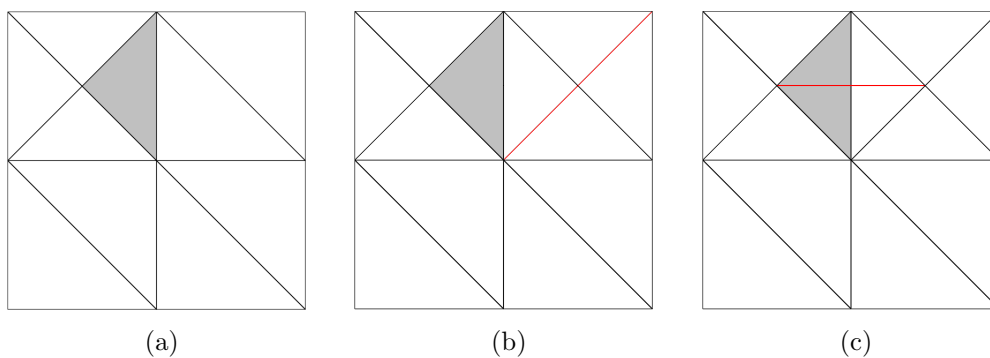
Powyższy algorytm podziału pozwala na uzyskanie siatki składającej się z trójkątów prostokątnych o różnych wielkościach. Wadą tego rozwiązania może być fakt, że trudno jest określić ile dodatkowych elementów trzeba będzie podzielić w jednym kroku, aby móc wykonać operację dzielenia wybranego elementu.

Kryterium wyboru elementu do podziału jest identyczne jak w przypadku elementów czworokątnych. Znajdujemy rozwiązanie na rzadkiej siatce, następnie zgodnie ze wzorem (77) obliczamy wartość przyczynka do energii każdego elementu. Znajdujemy element o najwyższej wartości wkładu w rozwiązanie i uruchamiamy dla niego algorytm podziału opisany powyżej. Po przeprowadzeniu podziału siatki ponownie rozwiązujemy równanie własne dla większej liczby elementów. Cały proces powtarzamy do momentu uzyskania żądanej liczby węzłów siatki.

Popatrzmy na dwa przypadki zagęszczania siatki. Na rysunkach dzielony trójkąt zaznaczony jest szarym kolorem, a kolejne kroki dzielenia elementów oznaczone są czerwoną linią.



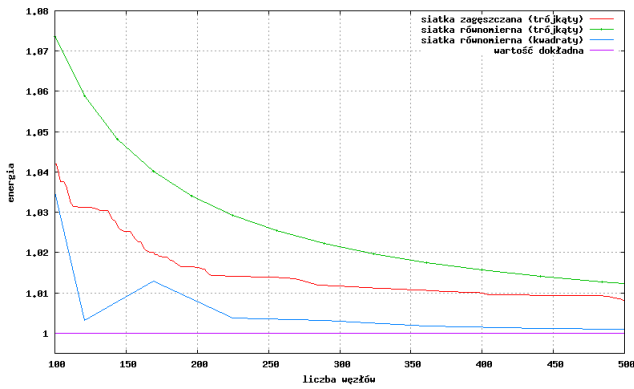
Rysunek 34: Pierwszy przypadek zagęszczania siatki



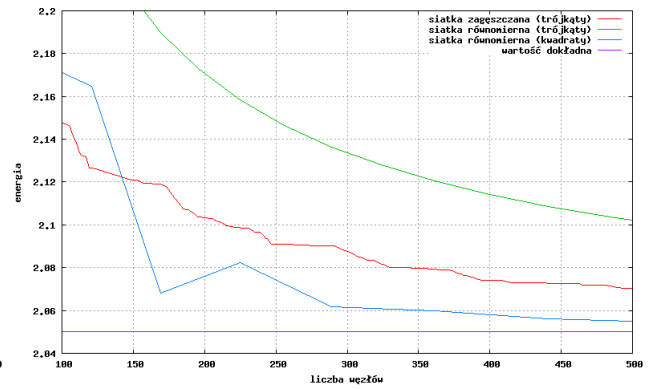
Rysunek 35: Drugi przypadek zagęszczania siatki

Widzimy, że w pierwszym przypadku do podziału wybranego elementu wystarczył podział tylko jednego dodatkowego elementu. Natomiast w drugim wariantcie, żeby podzielić wskazany element, algorytm musiał podzielić również kilka sąsiadnych elementów.

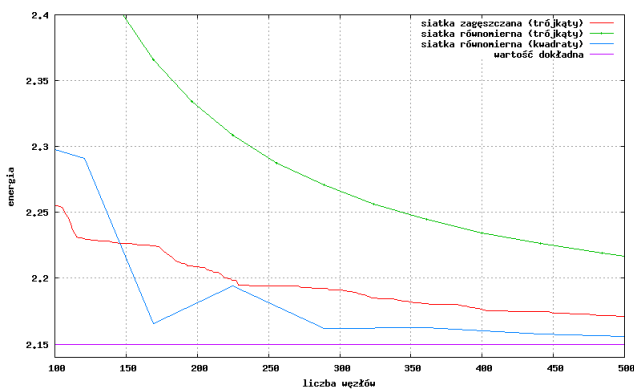
Sprawdźmy, czy zagęszczanie siatki przy pomocy opisanego algorytmu, zmniejszy błąd rozwiązania dla energii kilku pierwszych stanów własnych. Obliczenia przeprowadzimy zaczynając od siatki składającej się z 18 równomiernie rozłożonych trójkątnych elementów.



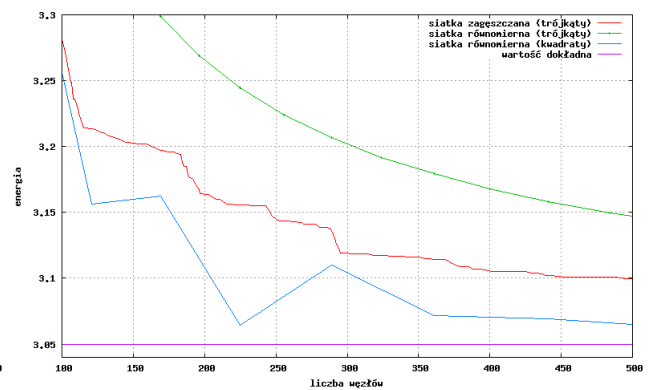
(a) $n_x = 0, n_y = 0$



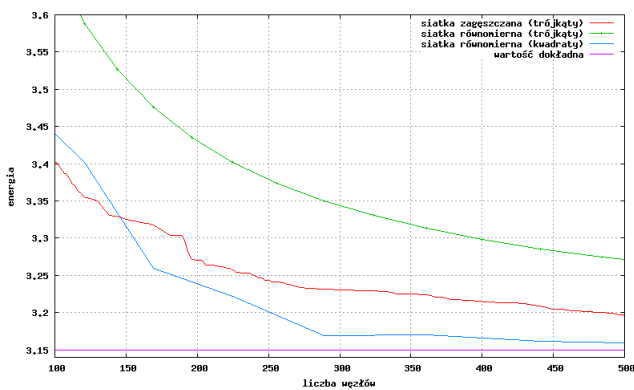
(b) $n_x = 0, n_y = 1$



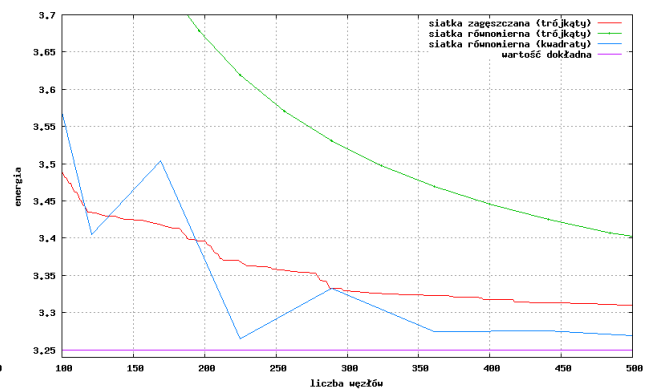
(c) $n_x = 1, n_y = 0$



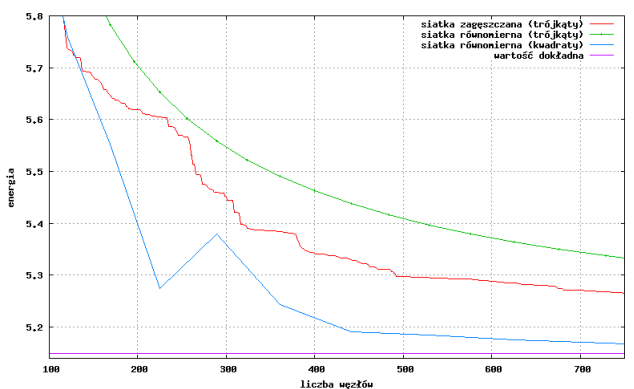
(d) $n_x = 0, n_y = 2$



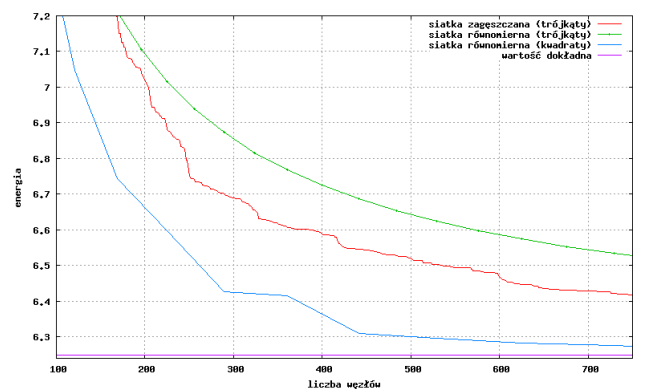
(e) $n_x = 1, n_y = 1$



(f) $n_x = 2, n_y = 0$



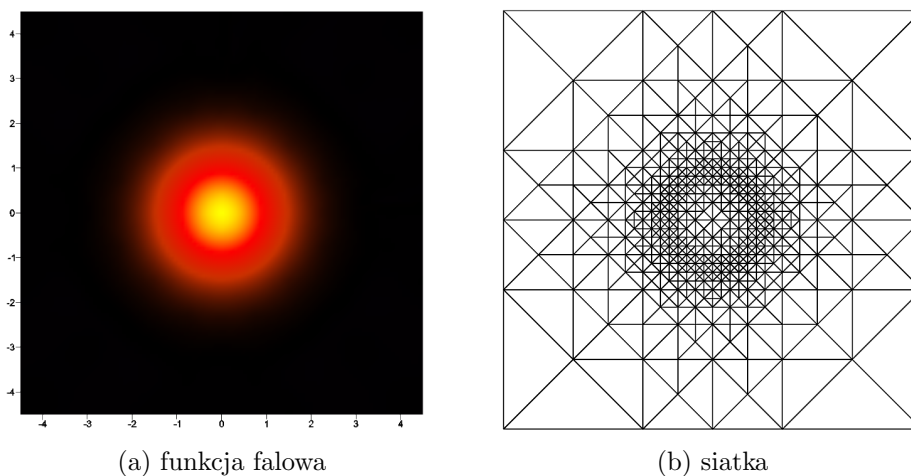
(g) $n_x = 1, n_y = 3$



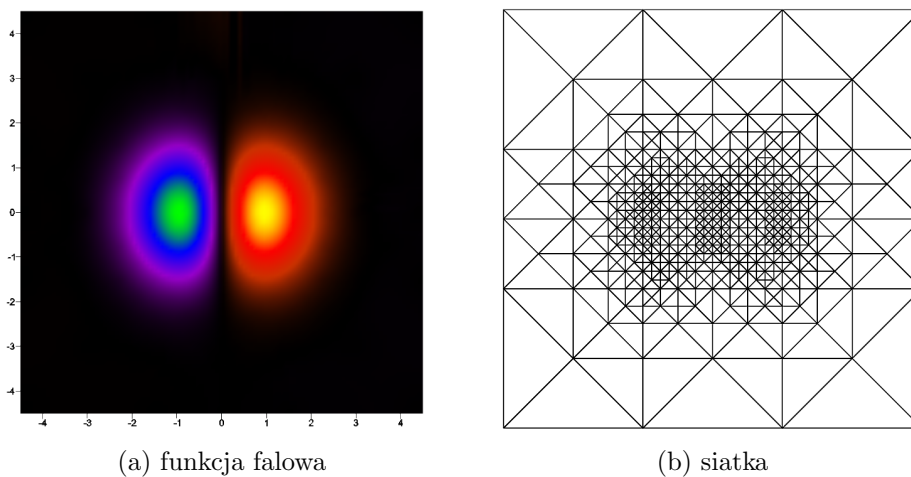
(h) $n_x = 2, n_y = 3$

Na powyższych wykresach widzimy, że po zastosowaniu zagęszczania rekurencyjnego, dzielącego elementy na mniejsze trójkąty prostokątne, dla wszystkich wyników, uzyskaliśmy znaczną poprawę dokładności obliczeń energii poszczególnych stanów, w porównaniu do trójkątnej siatki równomiernej mającej taką samą liczbę węzłów. Dla niektórych stanów dokładność rozwiązania poprawiła się o ponad połowę. Dla porównania przedstawione są również wartości energii poszczególnych stanów własnych oscylatora znalezionych na siatce złożonej z kwadratowych elementów skończonych. Z uwagi na fakt, że w elemencie trójkątnym mamy trzy węzły, natomiast w czworokątnym mamy pięć węzłów, porównanie dokładności obliczeń poszczególnych siatek przeprowadzono w funkcji całkowitej liczby węzłów siatki. Widzimy, że wyniki otrzymane dla zagęszczanej rekurencyjnie siatki trójkątnej są jednak gorsze od tych dla równomiernej siatki czworokątnej.

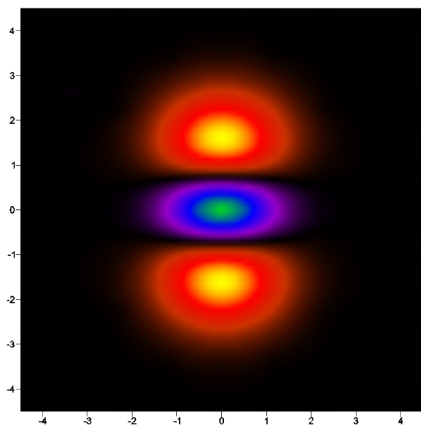
Popatrzmy jak przedstawiają się funkcje falowe stanów własnych oraz zagęzczone rekurencyjnie siatki, na których zostały znalezione te rozwiązania.



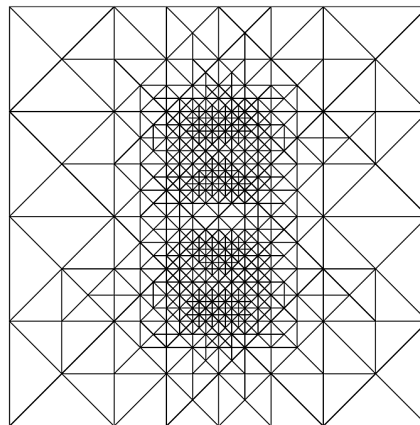
Rysunek 36: Wyniki dla stanu $n_x = 0, n_y = 0$



Rysunek 37: Wyniki dla stanu $n_x = 1, n_y = 0$

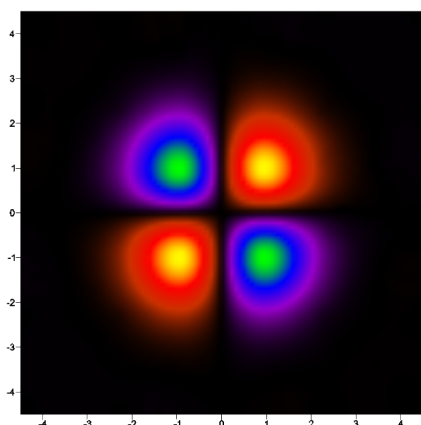


(a) funkcja falowa

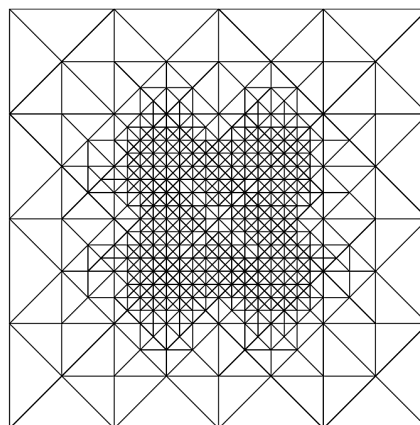


(b) siatka

Rysunek 38: Wyniki dla stanu $n_x = 0, n_y = 2$

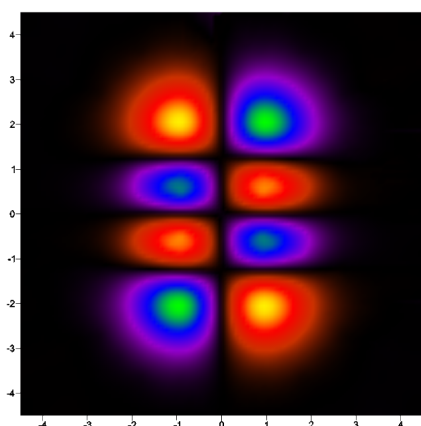


(a) funkcja falowa

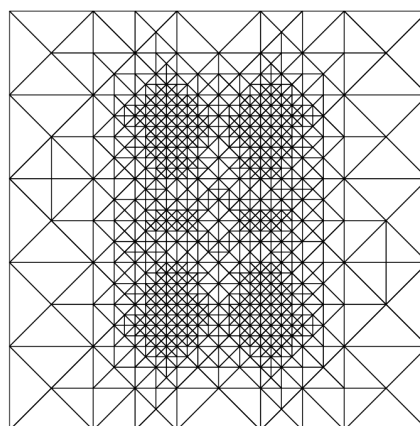


(b) siatka

Rysunek 39: Wyniki dla stanu $n_x = 1, n_y = 1$

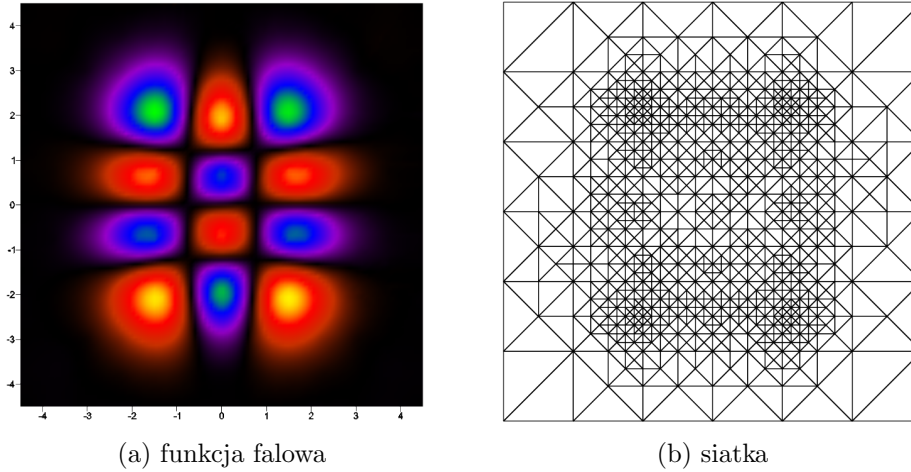


(a) funkcja falowa



(b) siatka

Rysunek 40: Wyniki dla stanu $n_x = 1, n_y = 3$



(a) funkcja falowa
 (b) siatka
 Rysunek 41: Wyniki dla stanu $n_x = 2, n_y = 3$

Widzimy, że dla wszystkich stanów własnych oscylatora siatki zostały poprawnie zagęszczone w miejscach, które mają największy wpływ na rozwiązanie. Natomiast na brzegach pudła obliczeniowego na obszarach, w których funkcje są praktycznie stałe, pozostały elementy o dużym polu powierzchni i o niewielkim zagęszczeniu. Zauważmy, że dla stanu podstawowego siatka jest najgęstsza na okręgu wokół centrum oscylatora.

4 Podsumowanie i wnioski

Podsumowanie

Na początku pracy, dla wprowadzenia metody elementów skończonych dla niezależnego od czasu równania Schroedingera, rozważono jednowymiarowy kwantowy oscylator harmoniczny. W pierwszej aplikacji metody wykorzystano liniowe funkcje kształtu dla jednowymiarowych elementów skończonych oraz zbadano dokładność dla siatki równoodległych węzłów. Przeprowadzono również optymalizacje rozmiaru elementów. W kolejnym kroku opisano metodę elementów skończonych dla równania własnego dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego. W pierwszym rachunku przyjęto elementy kwadratowe oraz dziewięć bikwadratowych funkcji kształtu na element. Następnie przeprowadzono optymalizację rozwiązań odpowiednio przez wariacyjny dobór rozmiaru pudła obliczeniowego. Dla dyskusji zoptymalizowanych położenia węzłów dla stanów wzbudzonych wprowadzono zaburzenie obrotowej symetrii potencjału dla zniesienia degeneracji stanów wzbudzonych oscylatora ze względu na moment pędu. Opisano metody zagęszczania siatki składającej się z elementów czworokątnych oraz wygładzania siatki metodą Laplace'a. Porównano dokładność wyników uzyskanych przy zagęszczaniu i wygładzaniu siatki z wynikami uzyskiwanymi dla siatek równomiernych. Następnie określono sposób rozwiązania problemu własnego oscylatora przy pomocy metody elementów trójkątnych z liniowymi funkcjami kształtu. Przedstawiono dwie metody zagęszczania siatek trójkątnych. Porównano dokładność rozwiązań dla różnych strategii zagęszczania trójkątnej siatki z wynikami otrzymanymi dla siatek złożonych z elementów czworokątnych przy różnym rzędzie użytych funkcji kształtu. Ostatecznie pokazano kilka wykresów funkcji falowych oraz zoptymalizowanych siatek trójkątnych.

Wnioski

Pokazano, że wyniki uzyskiwane przy użyciu algorytmu automatycznego zagęszczania siatki elementów czworokątnych mają podobną dokładność, co rezultaty dla siatki złożonej z równomiernie rozłożonych kwadratów. Wyniki uzyskiwane w obu przypadkach były obarczone podobnym błędem obliczeń. Jednak dla problemów potencjałów bardziej złożonych niż oscylator harmoniczny, bardziej obiecującym wydaje się być algorytm automatycznego zagęszczania siatki. Nieco prostszą w implementacji okazała się metoda elementów skończonych z trójkątnymi elementami, ponieważ w pojedynczym elemencie zastosowano trzy węzły i liniowe funkcje kształtu. W przypadku użycia funkcji liniowych dla trójkątnych elementów, optymalizacja siatki jest znacznie ważniejsza niż dla bardziej elastycznych funkcji bikwadratowych stosowanych dla elementów czworokątnych. Celem trzeciego rozdziału było wyznaczenie optymalnego rozkładu elementów dla stanu podstawowego i stanów wzbudzonych. Wiemy, że potencjał harmoniczny jest gładki, natomiast o lokalnej wartości energii decyduje energia kinetyczna proporcjonalna do kwadratu gradientu funkcji falowej. Uzyskane wyniki faktycznie wskazują, że optymalny rozkład węzłów mapuje obszary najsilniejszej zmienności funkcji falowej.

Literatura

- [1] P. Solin, Partial Differential Equations and the Finite Element Method.
- [2] O.C. Zienkiewicz, Finite Element Method, its basis & fundamentals.
- [3] R.Grzymkowski, A.Kapusta, I. Nowak, D. Słota, Metody Numeryczne, Zagadnienia Brzegowe.
- [4] S. Bednarek, Mechanika kwantowa.
- [5] A. Quarteroni, Numerical mathematics.