Computerphysik WS 2015/2016

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 10: Partielle Differentialgleichungen

Alexander Schlaich, Johann Hansig
7. Januar 2016

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 10.01., 24:00 Uhr.**

10.1: Eigenwertprobleme - Schrödingergleichung (10 Punkte)

Gegeben sei die 1-dimensionale reskalierte Schrödingergleichung

$$-\frac{d^2\Phi(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + V(\tilde{x})\Phi(\tilde{x}) = \epsilon \cdot \Phi(\tilde{x}). \tag{1}$$

Dabei wurde die Länge x skaliert entsprechend $\tilde{x} = \frac{x}{\hbar}\sqrt{2m}$, mit der Masse m und der Planck-Konstante $\hbar$. Das Eigenwertproblem kann gelöst werden, indem die Schrödingergleichung numerisch gelöst wird. Wir betrachten zunächst einen Potentialtopf der Breite $\tilde{L} = \pi$ mit unendlich hohen Wänden, den wir durch geeignete Randbedingungen

$$\Phi(\tilde{x}) = 0 \qquad \text{für} \qquad |\tilde{x}| \geq \tilde{L}/2 \tag{2}$$

beschreiben. Für ein Teilchen im Potentialtopf ohne externes Potential gilt folglich $V = 0$.

- **Aufgabe 10.1.1 (3 Punkte):** Wir ermitteln zunächst den untersten Energieeigenwert ϵ_1 und die dazugehörige Eigenfunktion $\Phi_1(\tilde{x})$. Nutzen Sie das Runge-Kutta Verfahren vierter Ordnung (RK4) vom Übungszettel 9, um das Differentialgleichungssystem für einen geschätzten Wert ϵ mit den Startwerten $\Phi(-\tilde{L}/2) = 0$ und $\Phi'(-\tilde{L}/2) = 1$ zu lösen. Nutzen Sie das Bisektionsverfahren im Intervall mit geeigneten Startwerten für ϵ um die Eigenfunktion $\Phi_1(\tilde{x})$ zu ermitteln, für welche die Randbedingung $\Phi_1(\tilde{L}/2) = 0$ erfüllt ist. Für das Teilchen im unendlichen Potentialtopf gilt $\epsilon_1 = 1$. Plotten Sie Ihr Resultat für $\Phi_1(\tilde{x})$.

  Hinweis: Es ist hier wichtig eine ausreichende Anzahl Stützstellen N zu verwenden!
  Wie groß sollte N mindestens sein?

- **Aufgabe 10.1.2 (3 Punkte):** Nun implementieren wir eine Methode, die geeignete Suchintervalle $[\epsilon - 0.1, \epsilon + 0.1]$ für das Bisektionsverahren ermittelt. Dazu erhöhen wir startend von $\epsilon = 0.1$ die Energiewerte in Schritten von 0.1 und überprüfen, ob $\Phi(\tilde{L}/2)$ zwischen zwei Energiewerten $\epsilon \pm 0.1$ das Vorzeichen wechselt. Ist dies nicht der Fall, soll ϵ weiter erhöht werden. Findet man einen Vorzeichenwechsel, soll wie in Aufgabe 10.1.1, mit dem Bisektionsverfahren die Eigenfunktion $\Phi_n(\tilde{x})$ und der dazugehörigen Eigenwert ϵ_n ermittelt werden. Berechnen Sie so die untersten drei ($n = 1,2,3$) Eigenwerte ϵ_n und plotten Sie die dazugehörigen $\Phi_n(\tilde{x})$. Überprüfen Sie ihr Ergebnis durch Vergleich mit den analytischen Eigenwerten $\epsilon_n = (n\pi/\tilde{L})^2$.

Ein Atom in einer Laserfalle "spürt" ein Gauß-förmiges Potential

$$V_G(\tilde{x}) = V_0(1 - \exp(-\tilde{x}^2/k^2)) \,, \tag{3}$$

wobei V_0 die Potentialstärke und k die Reichweite sind. Wir wollen untersuchen, ob wir unser Teilchen im Potentialtopf in einer Laserfalle "einsperren" können, d.h. ob die Aufenthaltswahrscheinlichkeit dort wesentlich erhöht wird.

- **Aufgabe 10.1.3 (2 Punkte):** Plotten Sie zunächst das Potential der Laserfalle im Potentialtopf (unter Verwendung der Randbedingungen aus (2) also $V(\tilde{x}) = V_G(\tilde{x})$) mit den Parametern $\tilde{L} = \pi$, $k = 0.05$ und $V_0 = 20$. Nutzen Sie dann das Verfahren aus 10.1.2 um die untersten drei Energie Eigenwerte ϵ_n und die dazugehörigen $\Phi_n(x)$ zu erhalten. Stellen Sie Ihr Ergebnis in einem aussagekräftigen Plot dar.

  Hinweis: Zur Verifikation testen Sie dass Sie $\epsilon_1 \approx 19.5$ erhalten. Sollte Ihr Algorithmus in 10.1.2 nicht funktionieren, dann können Sie die ϵ_n auch durch Ausprobieren mit dem Bisektionsverfahren aus 10.1.1 ermitteln.

- **Aufgabe 10.1.4 (2 Punkte)** Mit welcher Wahrscheinlichkeit

  $$W = \frac{\int_{-k}^{k} \mathrm{d}x |\Phi(x)|^2}{\int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x |\Phi(x)|^2} \tag{4}$$

  befindet sich das Teilchen innerhalb des Strahls der Breite k mit dem niedrigsten Energiewert ϵ_1? Welche Wahrscheinlichkeit erhalten Sie für die zwei nächsthöheren Energieeigenwerte?

10.2. Diffusionsgleichung (10 Punkte)

Wir betrachten in dieser Aufgabe einen Diffussionsprozess durch Haut. Das Verständnis der Transportvorgänge im Gewebe ist von großer Bedeutung u.a. für die gezielte Behandlung von Hautkrankheiten durch lokal applizierte Medikamente [1].

Wir verwenden die in der Vorlesung behandelte Gleichung für die eindimensionale Diffussion in einem Potential $U(x)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} n(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} D \mathrm{e}^{-U(x)/k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \mathrm{e}^{U(x)/k_B T} n(x,t). \tag{5}$$

Hier ist D die Diffussionskonstante und $n(x,t)$ die Konzentration zum Zeitpunkt t an der Stelle x. Für $U(x) = 0$ erhält man die freie Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial n\,(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n\,(x,t)}{\partial x^2}. \tag{6}$$

Ziel dieser Aufgabe ist es die Diffusionsgleichung numerisch zu lösen. Dazu diskretisieren wir sowohl Raum (Schrittweite δx) als auch Zeit (Schrittweite δt). Vereinfachend betrachten wir im folgenden die Diffusion von Wasser durch eine Potentialbarriere, welche eine Hautschicht modellieren soll.

Wir bringen nun einen Wasserfilm der Breite $b = 10\mu\,$m auf eine Hautprobe auf und beobachten die Diffusion, wobei wir annehmen, dass bei $x = 0$ und bei $x = 100\mu\,$m reflektierende Randbedingungen sind. Wasser hat eine Dichte von $n_0 = 33 \cdot 10^{-9} (\mu\mathrm{m})^{-3}$.

[1] Die Medikamentenaufnahme mittels Nanocarriern durch Haut wird an der FU Berlin im Rahmen des SFB 1112 aktiv erforscht, siehe`http://www.sfb1112.de/`

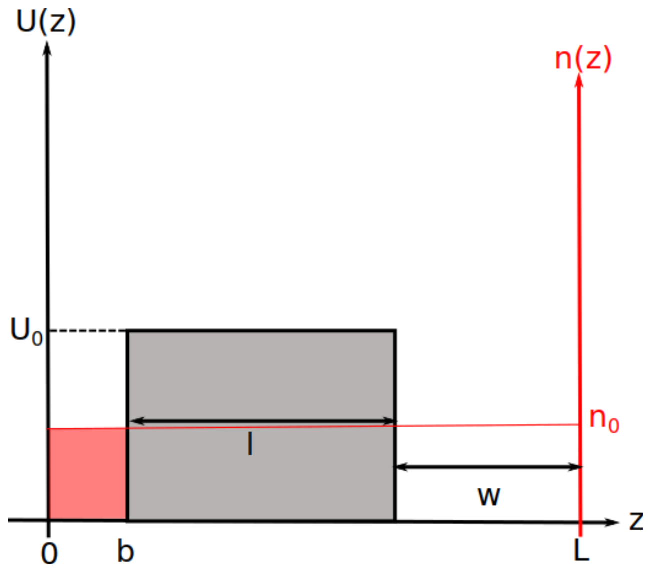

Abbildung 1: Schematische Illustration des Wasserfilms vor der Potentialbarriere

- **Aufgabe 10.2.1 (1 Punkt) Erstellen der Startkonfiguration:**

  Implementieren Sie eine Funktion, die für die Werte n_0, b, L und δx ein Tupel aus den x- und n-Werten für die oben genannten Parameter zurückliefert. Verwenden Sie $\delta x = 1\mu$m.

- **Aufgabe 10.2.2 (2 Punkte) Implementieren der numerischen Lösung der Diffusionsgleichung:** Wir lösen nun die Diffusionsgleichung ohne externes Potential, (6), mit der expliziten Euler-Methode. Zunächst führen wir die Notation

$$n_j^i := n(j \cdot \delta x,\, i \cdot \delta t) \tag{7}$$

  ein. Diskretisieren der Ableitungen in Gleichung (6) führt damit zu

$$\frac{n_j^{i+1} - n_j^i}{\delta t} = D\frac{n_{j+1}^i - 2n_j^i + n_{j-1}^i}{(\delta x)^2} \qquad i \in \{0,\ldots,N\},\ j \in \{1,\ldots,M-1\}, \tag{8}$$

  wobei $M \cdot \delta x = 100\mu$m und $N \cdot \delta t = T_{max}$ die maximale Zeit ist, für die wir die Lösung berechnen wollen. Auflösen von Gleichung (8) nach c_j^{i+1} liefert dann die Formel

$$n_j^{i+1} = n_j^i + D\frac{\delta t}{(\delta x)^2}\left(n_{j+1}^i - 2n_j^i + n_{j-1}^i\right), \tag{9}$$

  mit der die Zeitentwicklung von n berechnet werden kann. Eine reflektierende Randbedingung wird durch

$$n_0^{i+1} = n_0^i + D\frac{\delta t}{(\delta x)^2}\left(n_1^i - n_0^i\right), \tag{10}$$

  bzw.

$$n_M^{i+1} = n_M^i + D\frac{\delta t}{(\delta x)^2}\left(n_{M-1}^i - n_M^i\right) \tag{11}$$

  erzeugt, d.h. wir setzen den Fluss durch den Rand gleich Null.

  Implementieren Sie eine Funktion, die die Diffusionsgleichung für gegebene Parameter (δx, δt, x_0, n_0, D und s mithilfe von Gleichung (9) löst. Hierbei ist s die Anzahl der Integrationsschritte δt.

Hinweis: Ihre Funktion sollte entsprechend ein Array $n(t)$ zurückliefern. Aus Effizienzgründen können Sie die Integrations als Matrixprodukt mit Numpy implementieren, so wie in (12) für den Fall mit externem Potential angedeutet.

- **Aufgabe 10.2.3 (2 Punkte) Visualisierung der Lösung:** Laden Sie das auf der Vorlesungs-website bereitgestellte Notebook `AnimationExample.ipynb` herunter und verwenden Sie es als Vorlage, um eine Visualisierung Ihrer Lösung aus der vorherigen Teilaufgabe für verschiedene Zeiten t zu erstellen.

- **Aufgabe 10.2.4 (1 Punkt) Freie Diffusion** Lösen Sie die Diffusionsgleichung mit den Parametern $\delta x = 1\,\mu$m, $\delta t = 0.25$ s, $D = 1\mu\text{m}^2/s$. Integrieren Sie dabei immer $s = 25$ Schritte und visualisieren Sie den Verlauf für $T_{max} = 30$ Minuten.

- **Aufgabe 10.2.5 (1 Punkt) Größerer Zeitschritt:** Wiederholen Sie Teilaufgabe 10.2.4, verwenden Sie nun jedoch $\delta t = 0.51$ s.

  Was stellen sie beim Vergleich der beiden Animationen fest?

  Was sind die jeweiligen Werte der dimensionslosen Größe $K = D\delta t/(\delta x)^2$, die in Gleichung (9) auftaucht?

- **Aufgabe 10.2.6 (2 Punkte) Diffusion mit Potentialbarriere:** Die diskretisierte Version von Gleichung (5) lässt sich mit reflektierenden Randbedingungen schreiben als

$$\begin{pmatrix} n_0^{i+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ n_M^{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-KE_0^+ & KD_0^+ & 0 & \dots & 0 \\ KD_1^- & 1-K(E_1^+ + E_1^-) & KD_1^+ & \dots & 0 \\ 0 & KD_2^- & 1-K(E_2^+ + E_2^-) & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \dots & KD_{M-1}^- & 1-K(E_{M-1}^+ + E_{M-1}^-) & KD_{M-1}^+ \\ 0 & \dots & 0 & KD_M^- & 1-KE_M^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0^i \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ n_M^i \end{pmatrix}, \tag{12}$$

  mit den Abkürzungen $E_j^- = e^{(U_j - U_{j-1})/2k_BT}$, $E_j^+ = e^{(U_j - U_{j+1})/2k_BT}$, $D_j^- = e^{(U_{j-1} - U_j)/2k_BT}$ und $D_j^+ = e^{(U_{j+1} - U_j)/2k_BT}$ und $j = 0, \dots, M$.

  Erweitern Sie Ihre Funktion zum Lösen der Diffusionsgleichung aus 10.2.2 entsprechend, wobei der zusätzliche Parameter U ein Array mit Werten des Potentials an der Stelle x, gemessen in Einheiten der thermischen Energie k_BT sein soll.

  Verwenden Sie für die Höhe der Barriere $U_0 = 1\,k_BT$ und $l = 15\,\mu$m als Breite der Barriere. Visualisieren Sie die Lösung als Funktion der Zeit wie in 10.2.4.

- **Aufgabe 10.2.7 (1 Punkt) Konzentration hinter der Barriere:**

  Erweitern Sie Ihr Programm schließlich noch so, dass Sie jeweils nach s Schritten auch die Gesamtmenge Wasser $N_w^\star$ jenseits der Potentialbarriere erhalten. Vergleichen Sie mit der zu erwartenden Wasserkonzentration für den Fall dass das Wasser gleichmäßig im gesamten Intevall $[0,L]$ verteilt ist.

  Was für einen funktionalen Zusammenhang beobachten Sie?