

# Primjena numeričke metode Runge-Kutta na rješavanje problema početnih i rubnih uvjeta

---

**Banić, Ivan**

**Master's thesis / Diplomski rad**

**2014**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:292157>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-07-22**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: PROFESOR FIZIKE I INFORMATIKE

**Ivan Banić**

Diplomski rad

**Primjena numeričke metode Runge-Kutta  
na rješavanje problema početnih i rubnih  
uvjeta**

Voditelj diplomskog rada: doc. dr. sc. Vito Despoja

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

4. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2014.

*Zahvaljujem svom mentoru doc. dr. sc. Viti Despoji na ogromnom strpljenju, pomoći i vodstvu pri izradi ovog diplomskog rada.*

*Veliko hvala svim kolegama i prijateljima bez kojih studij ne bi prošao tako zabavno.*

*Najveće hvala mojim roditeljima i bratu na razumijevanju i podršci tokom studiranja.*

## Sažetak

U ovom diplomskom radu proučavali smo kako se numerička metoda Runge-Kutta četvrtog reda može primijeniti na problem početnih i problem rubnih uvjeta koji se javljaju u fizici. U kasnijoj fazi istraživanja primijenili smo metodu na rješavanje konkretnih fizikalnih problema kao što su oscilacije matematičkog njihala i rješavanje Schroedingerove jednačbe za beskonačno duboku potencijalnu jamu.

# Application of numerical method Runge-Kutta to solve the problem of initial and boundary conditions

## Abstract

In this diploma thesis we studied the numerical Runge-Kutta fourth order method which was applied to solve the problem of initial and the boundary condition problems that occur in physics. In a later stage of the research we applied the method to solve concrete physical problems such as fluctuations of mathematical pendulum and solving the Schroedinger equation for the infinitely deep potential well.

# Sadržaj

1. Uvod	1
1.1. 1D dinamički sustavi	3
1.1.1. Sila ovisi o vremenu	4
1.1.2. Sila ovisi o brzini	5
1.1.3. Sila ovisi o položaju	7
1.2. Linearne i nelinearne diferencijalne jednačbe	10
1.3. Runge-Kutta metoda	10
2. Primjena na rješenje početnih uvjeta	12
2.1. Izvod matematičkog njihala	13
2.2. Harmonijska aproksimacija	18
2.3. Fizičko njihalo	20
3. Primjena na rješenje rubnih uvjeta	23
3.1. Problem rubnog uvjeta	23
3.1.1. Dirichletov rubni uvjet	27
3.1.2. Neumannov rubni uvjet	28
3.1.3. Robinov rubni uvjet	31
3.2. Izvod Schrödingerove jednačbe	32
3.3. Beskonačna potencijalna jama	35
4. Rezultati i diskusija	40
4.1. Harmonijska aproksimacija	41
4.1.1. Rezultati numeričkog i analitičkog računa za matematičko njihalo	41
4.2. Beskonačna potencijalna jama	58
4.2.1. Rezultati numeričkog i analitičkog računa Schrödingerove jednačbe za beskonačno duboku potencijalnu jamu	60
5. Metodički dio - Njihalo	67
6. Zaključak	73
7. Dodaci	74
8. Literatura	82

## 1. Uvod

U prirodi postoje mnoge pojave i fenomeni koje pokušavamo shvatiti, a prvi korak u tome smjeru je da iste pojave i fenomene pokušavamo nekako matematički opisati. Jedan od takvih matematičkih zapisa su i diferencijalne jednačbe. Diferencijalne jednačbe matematički su proučavane iz mnogih različitih perspektiva, pri čemu se najviše pažnje davalo njihovom rješenju, što je zapravo skupina funkcija koje zadovoljavaju tu jednačbu. Dijelimo ih na opće diferencijalne jednačbe, linearne i nelinearne diferencijalne jednačbe.

Diferencijalne jednačbe su matematičke jednačbe za nepoznatu funkciju jedne ili više varijabli i njezine derivacije. Diferencijalne jednačbe koje opisuju primjere iz stvarnog života nisu uopće jednostavne, a nekada ih je jako teško ili možda čak i nemoguće riješiti. Imaju široku primjenu u raznim granama znanosti, od ekonomije, kemije, biologije, fizike, pa sve do medicine. Neki primjeri diferencijalnih jednačbi u fizici su Maxwell-ove jednačbe u elektromagnetizmu, jednačba toka topline u termodinamici, Laplaceova jednačba, Poissonova jednačba, Schroedingerova jednačba u kvantnoj mehanici, Navier-Stokesova jednačba u dinamici fluida, kao i Newtonova jednačba koja opisuje gibanje tijela u polju sile, na primjer, gibanje planete Zemlje. Na taj aspekt gibanja koncentrirati ćemo se u ovom radu.

Kao što smo ranije spomenuli, suvremena znanost i tehnika postavljaju niz problema kada je u pitanju rješavanje složenih diferencijalnih jednačbi. Problemi su toliko veliki da i kada se rade različite idealizacije stvarne fizikalne slike promatranog problema (zanemarivanje nekih faktora, linearizacija nelinearnih problema,

uzimanja približnih vrijednosti ulaznih veličina u fizikalnom modelu...) i dalje se problemi ne mogu riješiti klasičnim matematičkim metodama ili je njihovo rješavanje suviše veliko i komplicirano.

Za rješavanje takvih problema koristimo numeričke metode, a vrlo često bez pomoći računala ne možemo ni zamisliti njihovo rješavanje. Međutim, rješavanjem diferencijalne jednačbe numeričkom metodom ne dobivamo analitičko rješenje, što znači da rješenje nije analitička funkcija, već niz brojeva koji mogu sadržavati određenu grešku.

Numerička metoda koja će se koristiti u ovom diplomskom radu je klasična Runge-Kutta metoda, ili kako se u literaturi najčešće naziva metoda Runge-Kutta četvrtog reda (RK4 ili RK-4). To je iterativna metoda zasnovana na Taylor-ovom razvoju. Uspoređujući je s Eulerovom metodom, ima bolji algoritam, zahtjeva izvođenje više operacija, no daje veću stabilnost rješenja. Metoda će biti primijenjena na dva različita problema, na problem početnih uvjeta u klasičnoj mehanici, na primjer, njihanje matematičkog njihala, i na problem rubnih uvjeta, na primjer, rješavanje Schrödingerove jednačbe za jednodimenzionalnu potencijalnu jamu.



## 1.1 1D Dinamički sustavi

Drugi Newtonov zakon nam govori kako se giba neko tijelo mase  $m$  u polju sile  $\vec{F}(\vec{r})$ . Pri tome akceleracija  $\vec{a}$  koja je nastala zbog te sile, proporcionalna je sili  $\vec{F}$  koja djeluje na to tijelo i obrnuto proporcionalna masi tijela  $m$ .

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}) = -\Delta \vec{V}(\vec{r}) \quad (1.1)$$

Ova formula vrijedi samo ukoliko sustav ima konstantnu masu. Kada je masa promjenjiva (na primjer, raketa koja se giba), drugi Newtonov zakon ima oblik:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} \quad (1.2)$$

gdje je  $\vec{p} = m\vec{v}$  količina gibanja tog tijela.

Općenito, sila  $\vec{F}$  može ovisiti i o brzini  $\vec{v}$  i vremenu  $t$ .

$$\vec{F} = \vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (1.3)$$

Navest ćemo nekoliko specijalnih slučajeva gdje sila  $\vec{F}$  ovisi isključivo o jednoj od ovih varijabli.

### 1.1.1 Sila ovisi o vremenu: $F = F(t)$

Pretpostavljajući da je gibanje tijela jednodimenzionalno, drugi Newtonov zakon je zapisan kao diferencijalna jednadžba drugog reda:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(t). \quad (1.4)$$

Ako iskoristimo supstituciju  $v(x) = \frac{dx}{dt}$  dobivamo  $m \frac{dv}{dt} = F(t)$ . Integrirajući samo jednom  $dv = \frac{1}{m} F(t) dt / \int_0^t$ , pa dobivamo da je izraz za brzinu tijela  $v(t)$ :

$$v(t) = v_0 + \frac{1}{m} \int_0^t F(\tau) d\tau, \quad (1.5)$$

gdje smo pretpostavili da tijelo u trenutku  $t = 0$  ima početnu brzinu

$v(t = 0) = v_0$ . Ako iskoristimo  $v = \frac{dx}{dt}$  i ponovo integriramo

$$dx = v_0 dt + \frac{1}{m} \left[ \int_0^t F(\tau) d\tau \right] dt / \int_0^t$$

dobijemo zakon gibanja  $x(t)$ :

$$x(t) = x_0 + v_0 t + \frac{1}{m} \int_0^t d\delta \int_0^{\delta} F(\tau) d\tau \quad (1.6)$$

gdje smo pretpostavili da je  $x_0$  početna koordinata tijela.

### 1.1.2 Sila ovisi o brzini $F = F(v)$

Kada se čvrsto tijelo giba u nekom fluidu ili plinovitom okruženju na njega djeluje sila otpora (sila trenja). Pri malim brzinama  $\vec{v}$ , sila otpora je proporcionalna brzini  $\vec{v}$ .

$$\vec{F} = -k\vec{v}. \quad (1.7)$$

Koeficijent  $k$  je u principu proporcionalan viskozitetu  $\eta$ , što znači ukoliko je viskozitet fluida veći, veća je i sila otpora. Konkretno, ako je tijelo sfernog oblika, sila otpora je definirana Stokesovim zakonom.

$$\vec{F} = -6\pi\eta R \vec{v} \quad (1.8)$$

gdje je  $R$  radijus sfere, a  $\eta$  viskozitet fluida u kojem se tijelo nalazi. U ovom slučaju gibanja drugi Newtonov zakon se može zapisati u obliku slijedeće diferencijalne jednadžbe:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = m \frac{dv}{dt} = -kv \quad (1.9)$$

U ovom slučaju jednadžbu rješavamo separacijom varijabli  $v$  i  $t$ , te dobivamo

$$\frac{dv}{v} = -\frac{k}{m} dt \Rightarrow \int_{v_0}^v \frac{du}{u} = -\frac{k}{m} \int_0^t dt \quad (1.10)$$

Ovdje su  $u$  i  $\tau$  varijable integracije i pretpostavili smo početni uvjet  $v(t=0) = v_0$ .

Nakon integracije lijeve i desne u (1.10) dobivamo

$$\ln v - \ln v_0 = -\frac{k}{m} t \Rightarrow \ln \frac{v}{v_0} = -\frac{k}{m} t \quad (1.11)$$

↓

$$v(t) = v_0 \exp\left\{-\frac{k}{m} t\right\}$$

Dakle, ako je sila otpora proporcionalna brzini gibanja tijela, brzina tijela će se eksponencijalno smanjivati. Zakon gibanja  $x(t)$  uz početni uvjet  $x(0) = x_0$ , može se lako naći ponovnim integriranjem.

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v(\tau) d\tau \quad (1.12)$$

↓

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v_0 \exp\left(-\frac{k}{m} \tau\right) d\tau$$

↓

$$x(t) = x_0 - \frac{mv_0}{k} \left[ \exp\left(-\frac{k}{m} \tau\right) - 1 \right]$$

↓

$$x(t) = x_0 + \frac{mv_0}{k} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{k}{m} \tau\right) \right].$$

Zadnja formula pokazuje da je put koji prođe tijelo prije nego li se zaustavi,  $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = x_0 + \frac{mv_0}{k}$ , tj. proporcionalna početnoj količini gibanja tijela  $mv_0$ .

Za veće brzine, fizika cijelog procesa se zapravo mijenja. Na kinetičku energiju tijela počinje utjecati ne samo otpor između slojeva fluida, već i na gibanje fluida koji se nalazi ispred tijela koje se giba. Tada, sila otpora postaje proporcionalna kvadratu brzine:

$$F = -\mu\rho S v^2 \quad (1.13)$$

gdje je  $\mu$  koeficijent proporcionalnosti,  $S$  površina prednjeg dijela tijela, dok je  $\rho$  gustoća medija u kojem se tijelo nalazi.

### 1.1.3 Sila ovisi o položaju: $F = F(x)$

Primjeri sila koje ovise isključivo o položaju tijela su konkretno:

- Elastična sila  $\vec{F} = -kx$ ,
- Gravitacijska sila privlačnosti  $\vec{F} = -G \frac{m_1 m_2}{x^2}$ .

Gibanje tijela mase  $m$  za elastičnu silu ovisi o opruzi na koju djeluje elastična sila koja je određena linearnom diferencijalnom jednačinom

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + kx = 0 \quad (1.14)$$

Ukoliko želimo riješiti ovu diferencijalnu jednadžbu potrebno je uvesti supstituciju. Nakon što  $x = A\sin\omega t + B\cos\omega t$  uvrstimo u (1.14) je dobivamo

$$\omega = \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1.15)$$

Pa iz ovog slijedi da je period neprigušenog titranja

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (1.16)$$

Za slučaj gravitacijske privlačnosti, gibanje tijela u jednoj dimenziji (1D gibanje) je opisano nelinearnom diferencijalnom jednadžbom

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -G \frac{M}{x^2}, \quad (1.17)$$

gdje je  $M$  je masa tijela na koje djeluje privlačna sila (na primjer, masa Zemlje ili Sunca), dok je  $G$  univerzalna gravitacijska konstanta.

Akceleraciju možemo zapisati:

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{dv}{dx} \frac{dx}{dt} = v \frac{dv}{dx} \quad (1.18)$$

Tada, diferencijalna jednađba može biti napisana u obliku

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = m \frac{dv}{dt} = mv \frac{dv}{dx} = F(x) \quad (1.19)$$

Separirajući varijable  $v$  i  $x$ , dobivamo

$$mvdv = F(x)dx \quad (1.20)$$

i ako iskoristimo činjenicu da je  $F(x) = -\frac{V(x)}{dx}$  gdje je  $V(x)$  potencijalna energija, dobivamo:

$$\frac{m}{2} \int_{v_1}^{v_2} dv^2 = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{dV}{dx} dx = \frac{m}{2} \{v_2^2 - v_1^2\} = V(x_2) - V(x_1) \quad (1.21)$$

$$\frac{mv_1^2}{2} + V(x_1) = \frac{mv_2^2}{2} + V(x_2) \quad (1.22)$$

Posljednja jednađba (1.22) predstavlja zakon o očuvanju energije. Lijeva strana jednađbe je suma kinetičke energije i potencijalne energije u točki  $x_1$ , dok je na desnoj strani suma kinetičke energije i potencijalne energije u točki  $x_2$ .

## 1.2 Linearne i nelinearne diferencijalne jednađbe

U ovom dijelu rada imali smo se priliku upoznati s nekim diferencijalnim jednađbama. I mogli smo primijetiti, diferencijalne jednađbe se dijele na linearne i nelinearne diferencijalne jednađbe. Diferencijalna jednađba je linearna ako su nepoznata funkcija i sve njezine derivacije linearne, tj. prvog reda, a nelinearna ako su drugog ili višeg reda. Da pojednostavimo,  $x$  je linearan, a  $x^2$  je nelinearan. Također, svaka funkcija oblika  $\cos(x)$  je također nelinearna. Općenito, u fizici i matematici, „linearan“ obično znači „rješiv“, a „nelinearan“ znači „nerješiv“. Teorija za rješavanje linearnih jednađbi je veoma dobro razvijena zato što su linearne diferencijalne jednađbe dovoljno jednostavne za riješiti. Nelinearne jednađbe najčešće se ne mogu točno riješiti i za njihovo rješavanje potrebno je puno više istraživanja.

## 1.3 Runge-Kutta metoda

Runge-Kutta metode su razvijene početkom 19.st. od strane dvojice Njemačkih matematičara, C. Runge i M. W. Kutta. U numeričkoj analizi, Runge-Kutta metode su važan skup implicitnih i eksplicitnih iterativnih metoda koje se koriste u temporalnoj (vremenskoj) diskretizaciji za aproksimaciju rješenja općih diferencijalnih jednađbi. Ima nekoliko Runge-Kutta metoda, no u ovom radu, kao što smo već naveli, koristiti ćemo samo Runge-Kutta četvrtu metodu, poznatiju kao „klasična“ Runge-Kutta metoda ili „RK4“.

Navedimo jedan primjer, početni uvjeti su nam

$$\dot{y} = f(t, y) \quad y(t_0) = y_0 \quad (1.23)$$



Ovdje nam je  $y$  nepoznata funkcija (skalarna ili vektorska) vremena  $t$ , koju želimo aproksimirati. Rečeno nam je da  $\dot{y}$ , stopa za koju se  $y$  mijenja, je funkcija od  $t$  i samog  $y$ . Za početno vrijeme  $t_0$  odgovarajuća  $y$ -vrijednost je  $y_0$ .

Funkcija  $f$  i podatci  $t_0$  i  $y_0$  su zadani.

Sada odabiremo korak  $h > 0$  i definiramo

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}h(k_1 + k_2 + k_3 + k_4) \quad (1.24)$$

$$t_{n+1} = t_n + h$$

za  $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ , koristeći

$$k_1 = f(t_n, y_n) \quad (1.25)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3)$$

$y_{n+1}$  je RK4 aproksimacija  $y(t_{n+1})$ , i slijedeća vrijednost  $y_{n+1}$  je određena zbrojem trenutne vrijednosti  $y_n$  i ponderiranog prosjeka četiri koraka, gdje je svaki korak produkt veličine intervala.  $h$  je procjena nagiba

pravca i određen je funkcijom  $f$  koja se nalazi na desnoj strani diferencijalne jednačbe.

- $k_1$  je korak određen nagibom na početku intervala koristeći  $y$
- $k_2$  je korak određen nagibom u sredini intervala koristeći  $y + \frac{1}{2}hk_1$
- $k_3$  je korak određen nagibom u sredini intervala koristeći  $y + \frac{1}{2}hk_2$
- $k_4$  je korak određen nagibom na početku intervala koristeći  $y + hk_3$

Kod računanja prosjeka sva četiri koraka, dana je veća težinska vrijednost koracima koji se nalaze u središtu intervala. Težinska vrijednost je određena na takav način da je  $f$  neovisan o  $y$ , tako da je diferencijalna jednačba ekvivalentna jednostavnom integralu, tada je Runge-Kutta četvrta metoda zapravo Simpsonovo pravilo za integraciju.

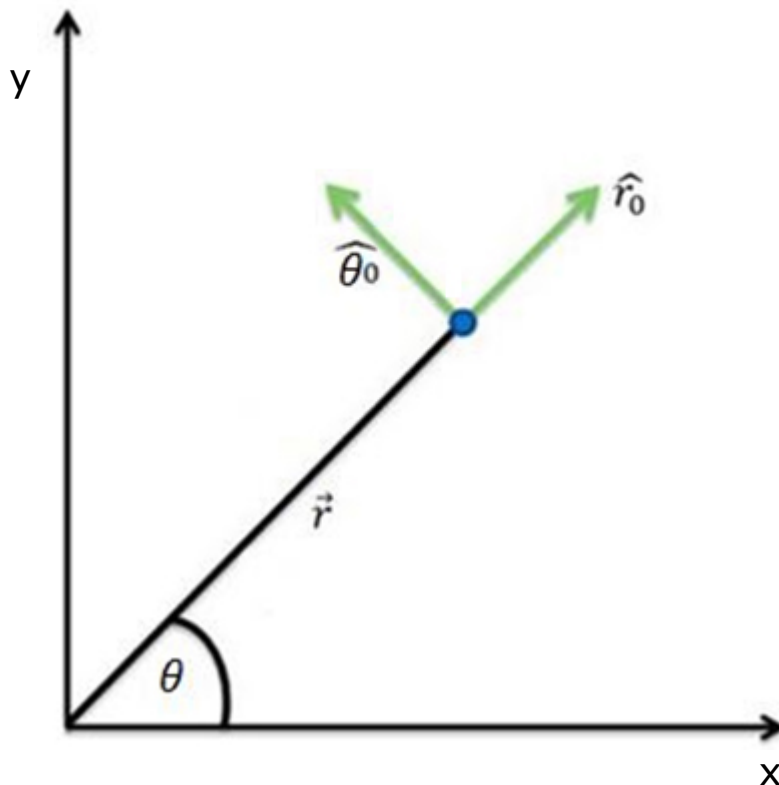
## 2. Primjena na rješenje početnih uvjeta

U ovom djelu rada pokušat ćemo objasniti kako se ponaša matematičko njihalo u različitim slučajevima. Konkretno, pratit ćemo gibanje matematičkog njihala za različite početne uvjete. Iako, sa strane fizike bilo bi puno pravilnije koristiti fizičko umjesto matematičkog njihala. Da smo koristili fizičko njihalo, diferencijalna jednačba bila bi nešto kompliciranija.

## 2.1 Izvod matematičkog njihala

Matematičko njihalo se sastoji od kuglice koju promatramo kao materijalnu točku mase  $m$ . Pretpostavimo da konac na koji je obješena kuglica nije rastezljiv, te pretpostavljamo da mu masu možemo zanemariti. Gibanje kuglice odvija po luku kružnice, smještene u vertikalnoj ravnini, sa središtem u točki za koju je konac zakačen na horizontalnu plohu (objesište), a polumjerom jednakim duljini konca, kao na slici 1. Gibanje njihala odvija se u zrakopraznom prostoru, tj. u idealiziranom mediju koji ne predstavlja otpor gibanu kuglice. Gibanje njihala se opisuje u inercijalnom sustavu, tj. zanemarujemo rotaciju Zemlje.

Za rješavanje problema kako se čestica giba, najprikladniji je polarni koordinatni sustav, u vertikalnoj ravnini, koja prolazi kroz objesište i točku  $T$ , sa koordinatom  $0$  u objesištu i koordinatnoj osi  $y$  usmjerenoj u smjeru vektora  $\vec{g}$ .

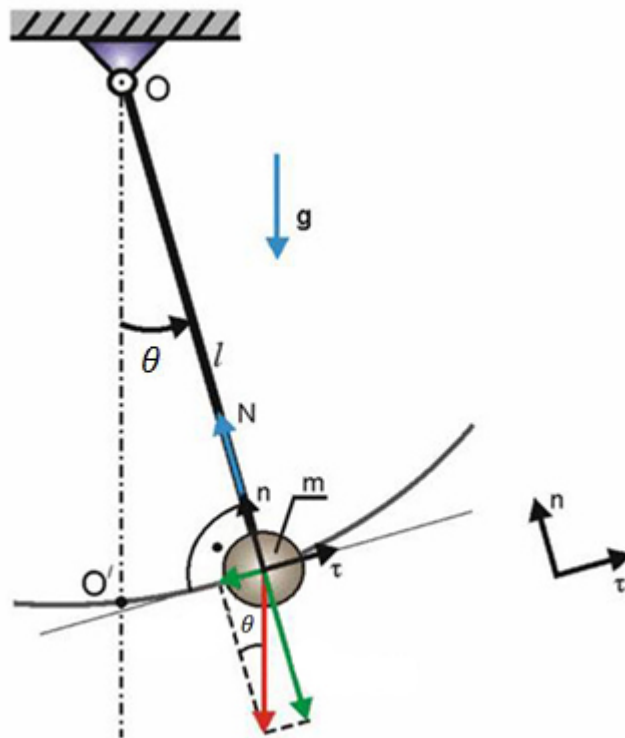


Slika 2.1. Polarni koordinatni sustav

Koordinate su  $\theta$  i  $r$ , a radij vektor je dan formulom:

$$\vec{r} = r \cdot \hat{r}_0 \quad (2.1)$$

gdje je  $\hat{r}_0$  jedinični vektor u smjeru radij vektora  $\vec{r}$ , a  $\hat{\theta}_0$  je jedinični vektor okomit na taj isti vektor  $\vec{r}$ .



Slika 2.2. Matematičko njihalo

Čestica mase  $m$  giba se pod utjecajem rezultantne sile teže  $m\vec{g}$  i napetosti konca

$$\vec{N} = -N\hat{r}_0 \quad (2.2)$$

Uz pretpostavku konstantne mase, drugi Newtonov zakon poprima oblik

$$m\vec{g} + \vec{N} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} \quad (2.3)$$

Akceleracija zapisana u polarnim koordinatama ima oblik:

$$\vec{a} = \frac{d}{dt} (\dot{r}\hat{r}_0 + r\dot{\theta}\hat{\theta}_0) \quad (2.4)$$

Budući da konac ima stalnu duljinu, za radijus vektor čestice  $\vec{r} = r \cdot \vec{r}_0$  vrijedi da se samo njegov smjer mijenja s vremenom, dok je iznos  $r$  konstantan, pa sve vremenske derivacije iznosa  $r$  iščezavaju, pa vrijedi:

$$r = l \quad (2.5)$$

$$\dot{r} = \ddot{r} = 0 \quad (2.6)$$

Gdje smo isto pretpostavili da je gibanje ravninsko, tj.:

$$\dot{z} = \ddot{z} = 0. \quad (2.7)$$

Nakon što smo iskoristili (2.5), (2.6) i (2.7), akceleraciju u polarnim koordinatama možemo zapisati kao:

$$\vec{a} = l\ddot{\theta}\hat{\theta}_0 - l\dot{\theta}^2\hat{r}_0 \quad (2.8)$$

Nakon što ovo uvrstimo u Newtonovu jednadžbu (2.3) ona postaje

$$ml\ddot{\theta}\hat{\theta}_0 - ml\dot{\theta}^2\hat{r}_0 = m\vec{g} + \vec{N} \quad (2.9)$$

Raspišemo sada silu napetosti niti  $\vec{N}$  i gravitacijsku silu  $m\vec{g}$  u polarnim koordinatama:

$$\begin{aligned} \vec{N} &= -N\hat{r}_0 \\ mg &= mg\cos\theta\hat{r}_0 - mg\sin\theta\hat{\theta}_0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Nakon što (2.10) uvrstimo u (2.9) dobivamo Newtonovu jednadžbu raspisanu u polarnim koordinatama

$$ml\ddot{\theta}\hat{\theta}_0 - ml\dot{\theta}^2\hat{r}_0 = mg\cos\theta\hat{r}_0 - mg\sin\theta\hat{\theta}_0 - N\hat{r}_0 \quad (2.11)$$

Sada izjednačimo iznose vektora u smjeru  $\hat{r}_0$  i  $\hat{\theta}_0$  na lijevoj i desnoj strani pa dobijemo:

$$ml\ddot{\theta} = -mg\sin\theta \quad \Leftarrow \hat{\theta}_0 \quad (2.12)$$

$$-ml\dot{\theta}^2 = mg\cos\theta - N \quad \Leftarrow \hat{r}_0. \quad (2.13)$$

Iz jednadžbe (2.13) možemo direktno odrediti napetost niti

$$N = mg\cos\theta + ml\dot{\theta}^2. \quad (2.14)$$

Ako iskoristimo činjenicu da trenutnu obodnu brzinu kuglice možemo zapisati kao:

$$v(t) = l \cdot \dot{\theta}, \quad (2.15)$$

izraz za napetost postaje

$$N = mg\cos\theta + \frac{mv^2}{l} \quad (2.16)$$

što prepoznajemo kao zbroj radijalne komponente gravitacijske sile i centrifugalne sile.

Jednadžba (2.12) nam opisuje gibanje čestice po luku kružnice radijusa  $l$  i u prikladnijoj formi može biti zapisana kao

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \sin\theta = 0 \quad (2.17)$$

Ovo je nelinearna jednadžba drugog reda, te kao takva ne može biti riješena analitički. Za njeno rješavanje moramo se pouzdati u numerički račun koji dovoljno točno aproksimira rješenje jednadžbe. i za to ćemo koristiti već ranije spomenutu Runge-Kutta metodu 4. reda.

## 2.2 Harmonijska aproksimacija

Ograničimo se najprije na malene kutove odklona. Tada  $\sin\theta$  možemo zamijeniti sa  $\theta$ . Uz takvo ograničenje jednadžba (2.17) prelazi u homogenu linearnu diferencijalnu jednadžbu drugog reda s konstantnim koeficijentima

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \theta = 0 \quad (2.18)$$

Opće rješenje ove jednadžbe je superpozicija dvaju linearno nezavisnih rješenja za koja se lako pokaže da su eksponencijalne funkcije oblika  $\exp(\pm i \sqrt{\frac{g}{l}} t)$ . Nakon što pretpostavimo da je rješenje oblika  $\theta = Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t}$ , uvrštavanjem u (2.18) dobivamo:

$$\theta = A \exp\left(i \sqrt{\frac{g}{l}} t\right) + B \exp\left(-i \sqrt{\frac{g}{l}} t\right). \quad (2.19)$$



Konstante  $A$  i  $B$  određujemo iz početnih uvjeta  $\theta(0) = \theta_M$  i  $\dot{\theta}(0) = 0$ . Gdje je  $\theta_M$  kut otklona u trenutku  $t = 0$ , a 0 iznos brzine u tom istom trenutku  $t = 0$ . Nakon što iskoristimo početne uvijete i jednadžbu (2.19) dobivamo:

$$\theta_M = A + B \quad (2.20)$$

$$0 = A - B$$

Nakon što (2.20) uvrstimo u (2.19) dobivamo rješenje:

$$\theta = \theta_M \cos \sqrt{\frac{g}{l}} t. \quad (2.21)$$

Rezultat (2.21) pokazuje da njihalo u ovom slučaju nije harmonijski. tj. kutna elongacija  $\theta$  ovisi o vremenu po zakonu kosinusa sa fazom  $\sqrt{\frac{g}{l}} t$ .

$\theta_M$  je kutna amplituda tog njihanja, tj. maksimalna elongacija.

Koliki smije biti  $\theta_0$  da naša pretpostavka  $\sin\theta = \theta$  još uvijek vrijedi?

Otklon u stupnjevima	Period $\div 2\pi\sqrt{l/g}$
0	1,0000
5	1,0005
10	1,0019
15	1,0043
20	1,0077
30	1,0174
45	1,0396

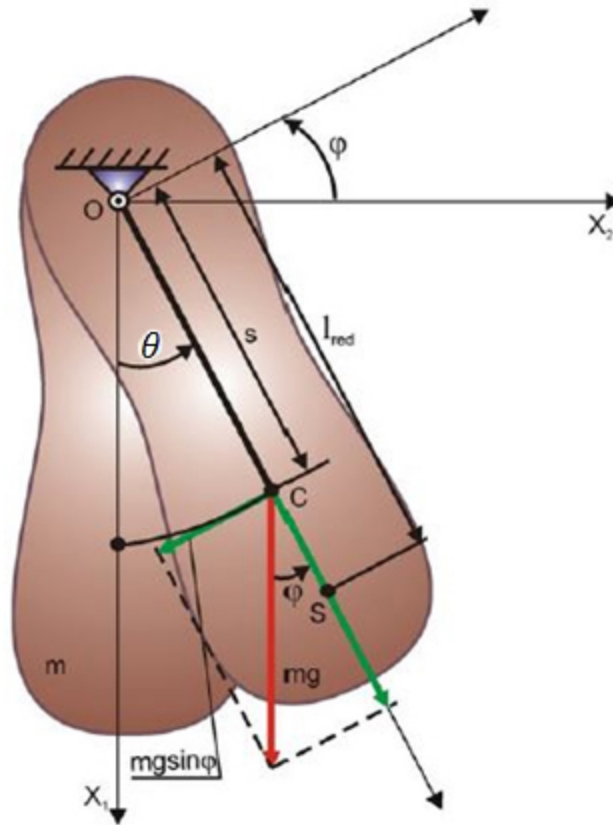
*Tablica 2.1 Vrijednosti perioda za različite otklone*

U tablici (2.1) navedene su neke vrijednosti perioda za različite amplitude. Očito je da vrijednost  $\theta$  može prijeći i preko  $20^\circ$  a da stvarna vrijednost perioda ne odskoče više od 1 posto od njegove vrijednosti dobivene u aproksimaciji male amplitude.

### 2.3 Fizičko njihalo

Uz matematičko njihalo, postoji i fizičko njihalo, no njega u ovom radu nećemo posebno obrađivati, već ga samo navesti kao primjer kako bi pokazali razliku između ta dva njihala.

Fizičko njihalo je stvarno njihalo, s tijelom konačnih dimenzija, ne zanemarive mase, za razliku od matematičkog njihala kod kojeg je tijelo materijalna točka.



Slika 2.3 Fizičko njihalo

Za male oscilacije vrijedi jednaka aproksimacija kao i za matematičko njihalo (2.18).

U ravnotežnom položaju centar mase nalazi se na ispod hvatišta. Udaljenost od hvatišta do centra mase je udaljenost  $s$ , moment tromosti tijela oko osi rotacije koja prolazi kroz hvatište je  $I$ , a masa tijela je  $m$ .

Period titranja je:

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{I}{msg}} \quad (2.22)$$

Postoje razne vrste njihala s različitim primjenama. Balističko njihalo koristi se za određivanje brzine metka, otklanja se iz ravnotežnog položaja kada u njega udari metak. Iz otklona njihala može se izračunati brzina metka. Foucaultovo njihalo njiše se u svim smjerovima, tj. zakreće ravninu njihanja pa služi kao dokaz da se Zemlja vrti oko svoje osi.



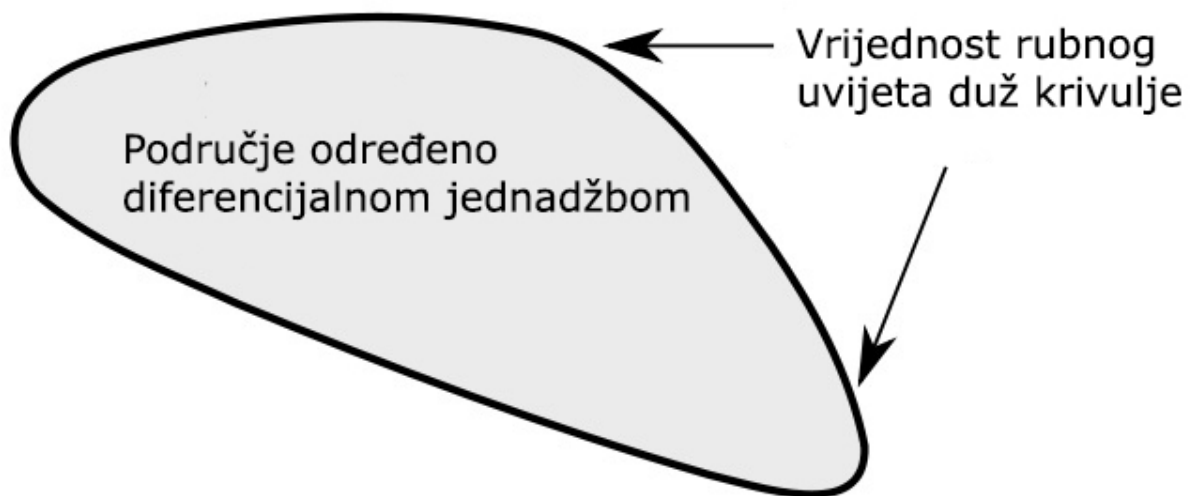
*Slika 2.4 Foucaultovo njihalo u Panthéonu, Paris*

### 3. Primjena na rješenje rubnih uvjeta

U ovom djelu rada pokušat ćemo objasniti kako se četvrta metoda Runge-Kutta ponaša kada imamo, ne samo početne uvjete kao u slučaju matematičkog njihala, već i rubne uvjete kao u sadašnjem slučaju kada imamo Schrödingerovu jednadžbu za beskonačnu potencijalnu jamu.

#### 3.1 Problem rubnog uvjeta

U matematici, dijelu koji se bavi diferencijalnim jednadžbama, problem rubnog uvjeta je opisan kao diferencijalna jednadžba sa nizom dodatnih ograničenja, koji se zovu rubni uvjeti. Problemi rubnih uvjeta zapravo dolaze iz nekoliko grana fizike, i svaka diferencijalna jednadžba koja opisuje neku prirodnu pojavu ili fizikalni problem, sadrži problem rubnog uvjeta. Problemi koji uključuju valnu jednadžbu, kao što je određivanje normalnih modova, najbolji su primjer problema rubnog uvjeta. Veliki dio veoma važnih problema rubnog uvjeta su Sturm-Liouvilleovi problemi. Da bi bio koristan za primjenu, problem rubnog uvjeta treba biti dobro postavljen, što znači da za dane početne vrijednosti, za problem koji rješavamo mora postojati jedinstveno rješenje, koje stalno ovisi o početnim vrijednostima. Puno je teorijskog istraživanja u dijelu parcijalnih diferencijalnih jednadžbi, koji je posvećen dokazivanju da li su problemi rubnih uvjeta koji proizlaze iz znanstvenog i inženjerskog rada dobro postavljeni. Prvi problem rubnog uvjeta koji se proučavao je Dirichletov problem, u kojem su se tražile harmonijske funkcije, tj. rješenja Laplaceove jednadžbe, rješenje tog problema zovemo Dirichletov princip.



*Slika 3.1 Problem rubnog uvjeta*

Problemi rubnog uvjeta su slični problemu početnih uvjeta. Problem rubnog uvjeta ima uvjet koji je definiran u ekstremima, tj. „granicama“ nezavisne varijable u jednažbi, dok početni uvjet ima sve uvjete definirane u samoj nezavisnoj varijabli, i ta vrijednost je na donjoj granici, tj. početku domene, što nam zapravo govori i sam naziv „početni“ uvjet.

Na primjer, ako je nezavisna varijabla vrijeme u domeni  $[0,1]$ , problem rubnog uvjeta bi definirao vrijednosti  $y(t)$  za obje vrijednosti,  $t = 0$  i  $t = 1$ , dok bi onda problem početnog uvjeta definirao vrijednost  $y(t)$  i  $y'(t)$  u trenutku  $t = 0$ .

Ako je rješenje ovisno o prostoru i vremenu, njegovu vrijednost moguće je odrediti dvojako, kao vrijednost za danu točku unutar cijelog vremenskog intervala ili kao vrijednost u danom trenutku za cjelokupni

prostor. Čak je vjerojatnije za cjelokupni prostor nego za bilo koju točku.

Konkretni primjer na kojem ćemo demonstrirati problem rubnog uvjeta je jednodimenzionalna diferencijalna jednačba oblika

$$y''(x) + y(x) = 0 \quad (3.1)$$

Jednačbu (3.1) želimo riješiti za neku nepoznatu funkciju  $y(x)$  sa koja zadovoljava rubne uvijete

$$y(0) = 0, y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 2. \quad (3.2)$$

Opće rješenje dane jednačbe je

$$y(x) = A\sin(x) + B\cos(x) \quad (3.3)$$

Iz prvog rubnog uvjeta  $y(0) = 0$  dobivamo

$$0 = A \cdot 0 + B \cdot 1 \quad (3.4)$$

što implicira da je  $B = 0$ . Iz drugog rubnog uvjeta  $y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 2$  dobivamo

$$2 = A \cdot 1 \quad (3.5)$$

što znači da nam je  $A = 2$ . Iz ovoga vidimo da nam je ograničenje rješenja rubnim uvjetom dalo jedinstveno rješenje

$$y(x) = 2\sin(x) \quad (3.6)$$

Ako pak želimo problem rubnog uvjeta objasniti na životnom primjeru u praksi. Najbolje da zamislimo dugačku metalnu žicu na gitari. Već smo ranije spomenuli da diferencijalne jednadžbe imaju beskonačno mnogo rješenja, no na primjeru žice na gitari, žica u stvarnosti ipak zauzme sasvim određen ravnotežni položaj. Isto tako oscilira na sasvim određen način. To je zbog toga što su u stvarnosti određeni uvjeti na rubu žice i početni uvjeti, tj. način na koji je žica izvučena iz položaja ravnoteže.

Iako rubnih uvjeta ima beskonačno mnogo, neki od najjednostavnijih i najpoznatijih rubnih uvjeta su:

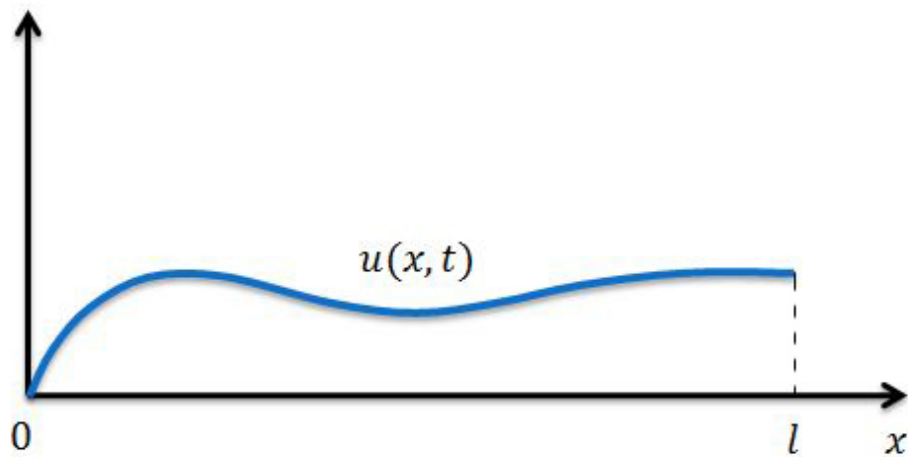
- Dirichletov (kinematički, geometrijski, prvi) rubni uvjet
- Neumannov (dinamički, prirodni, drugi) rubni uvjet
- Robinov rubni uvjet



### 3.1.1 Dirichletov rubni uvjet

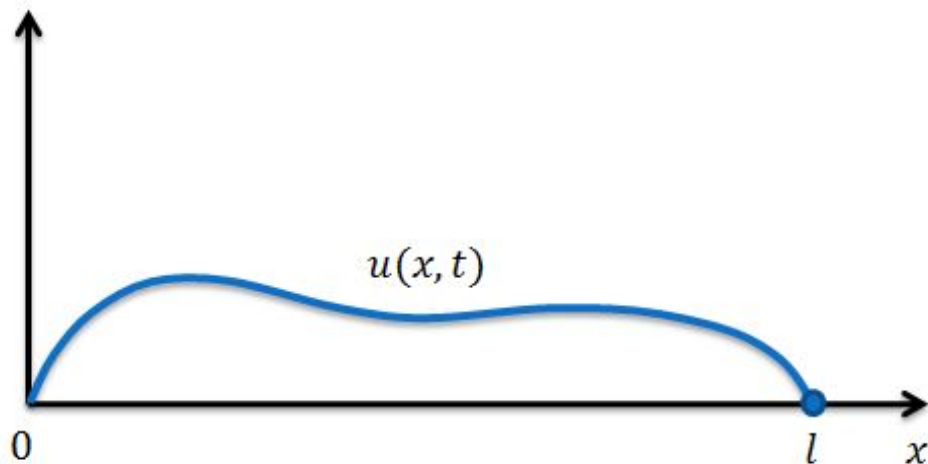
Dirichletov rubni uvjet je uvjet koji određuje vrijednost kinematičkog polja na rubovima, na primjer

$$u(0,t) = a \quad u(l,t) = b \quad (3.7)$$



*Slika 3.2 Dirichletov rubni uvjet*

Za rub u kojem je zadan Dirichletov rubni uvjet kažemo da je **učvršćen**. Ako je  $a = b = 0$ , onda kažemo da su rubni uvjeti **homogeni**.



*Slika 3.3 Učvršćeni Dirichletov rubni uvjet*

Dirichletov rubni uvjet znači u slučaju:

- oscilacija ili ravnoteže žice, longitudinalnih oscilacija grede, torzijskih oscilacija tankog štapa, da su rubovi učvršćeni
- provođenja topline, da se rub održava na stalnoj temperaturi, i to na temperaturi  $a$  na lijevom rubu,  $b$  na desnom rubu štapa
- filtracije, da su tlakovi na rubovima zadani. Ako su rubni uvjeti homogeni, onda to znači da tekućina može slobodno protjecati kroz rub

### 3.1.2 Neumannov rubni uvjet

Dinamički rubni uvjet je uvjet koji određuje vrijednost dinamičkog polja  $\psi$  na rubovima, na primjer

$$\psi(0, t) = a \quad \psi(l, t) = b \quad (3.8)$$

Zakoni ponašanja povezuju  $\psi$  i  $u$  pa se tako i dinamički rubni uvjeti mogu izraziti pomoću polja  $u$ , ali preko njegovih derivacija. Za već ranije navedenu žicu bi imali

$$\psi(x, t) = p(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \quad (3.9)$$

pa zadati na primjer  $\psi(0, t) = a$  znači zapravo zadati

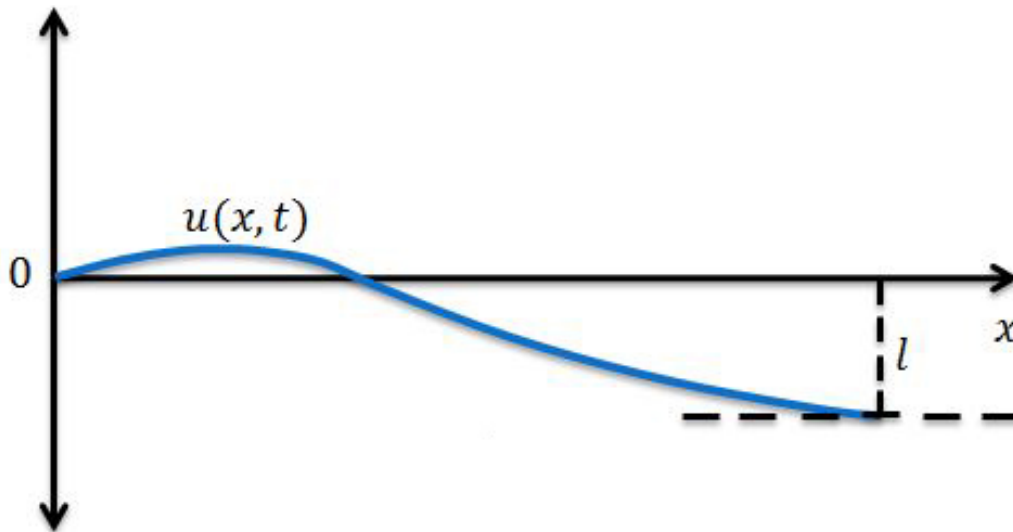
$$p(0) \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = a \quad (3.10)$$

tj.

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \frac{a}{p(0)}$$

Ako je  $\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = 0$  onda kažemo da je lijevi rub **slobodan**. Za takav rubni uvjet kažemo da je **homogen**.

Na sljedećoj slici (slika 3.4) imamo na desnom rubu homogen Neumannov uvjet.



*Slika 3.4 Homogeni Neumannov uvjet*

Neumannov rubni uvjet znači u slučaju

- oscilacija ili ravnoteže žice, longitudinalnih oscilacija grede, da je na rubu zadana kontaktna sila
- provođenja topline, da se preko ruba prenosi zadana količina topline; ako je uvjet homogen, onda to znači da je rub toplinski izoliran
- filtracije, da je na rubu zadan protok mase. Ako je rubni uvjet homogen, onda to znači da tekućina ne protječe kroz rub, tj. da je rub ne propustan

### 3.1.3 Robinov rubni uvjet

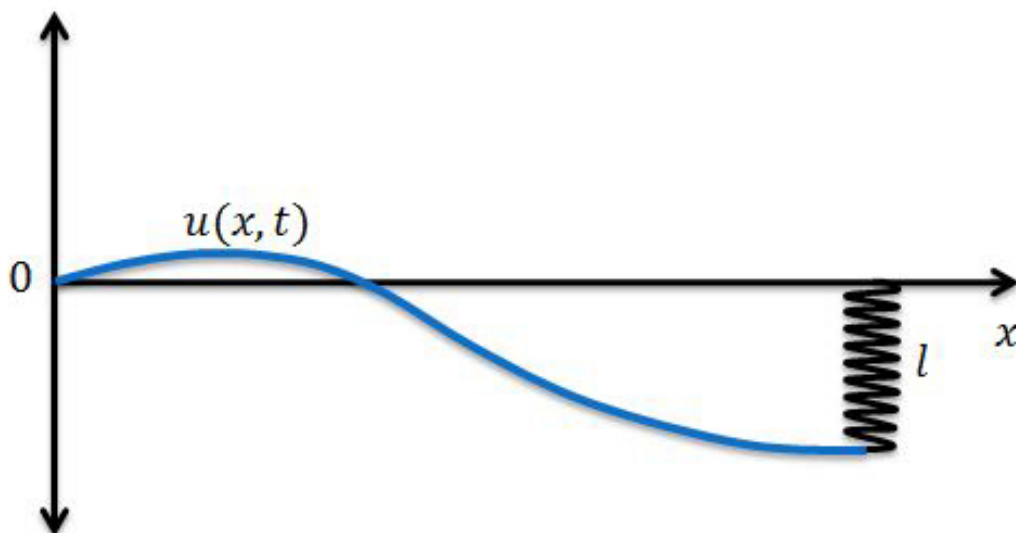
Ako je na primjer, desni rub oprugom spojen s fiksnom podlogom, onda je količina gibanja u jedinici vremena koja se na desnom kraju prenese na žicu jednaka sili kojom opruga djeluje na desni kraj

$$\psi(l, t) = -ku(l, t) \quad (3.11)$$

tj.

$$\frac{\partial u(l, t)}{\partial x} + \frac{k}{p(l)} u(l, t) = 0 \quad (3.12)$$

Na sljedećoj slici (slika 3.5) imamo na desnom rubu Robinov uvjet.



Slika 3.5 Robinov uvjet

### 3.2 Izvod Schrödingerove jednadžbe

Kao svi osnovni zakoni fizike, Schrödingerova jednadžba je jednostavno relacija, postulat koji se ne može se dokazati, kao i drugi Newtonov zakon. Naravno, najjednostavniji način bi bio samo napisati jednadžbu i početi je koristiti, međutim, bilo bi veoma korisno i ponuditi neke argumente koji nam govore zašto je to tako.

Skoro svi zakoni u fizici mogu biti izraženi kao diferencijalne jednadžbe, tj. kao jednadžbu koja uključuje varijablu koja nas zanima i neke njene derivacije. Jednadžba gibanja za klasične valove je također diferencijalna jednadžba i prirodno je očekivati da jednadžba koje određuje sve moguće valove kvantnog sustava također bude diferencijalna jednadžba. Na primjer, funkcije prostornog vala za beskonačnu potencijalnu jamu imaju oblik

$$\psi(x) = A \sin kx \quad (3.13)$$

Kada želimo naći diferencijalnu jednadžbu koja zadovoljava tu funkciju diferenciramo tako da dobijemo

$$\frac{d\psi}{dx} = kA \cos kx. \quad (3.14)$$

Postoji više načina kako možemo doći od relacije  $\cos kx$  u (3.14) do relacije  $\sin kx$  u (3.13) i time dobiti jednadžbu koja povezuje  $d\psi/dx$  sa  $\psi$ . Najjednostavniji način na koji ćemo to napraviti tako da jednadžbu drugi puta deriviramo da bi dobili

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A \sin kx. \quad (3.15)$$

Ako usporedimo (3.15) i (3.13) vidimo da je  $d^2\psi/dx^2$  proporcionalan  $\psi$ ,  
točnije

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad (3.16)$$

$k^2$  iz (3.16) možemo napisati u obliku kinetičke energije čestice  $K$ . Ako  
iskoristimo De Broglievu relaciju  $p = \hbar k$ , dobivamo

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.17)$$

i dalje iz toga

$$k^2 = \frac{2mK}{\hbar^2}. \quad (3.18)$$

Iz toga proizlazi da (3.16) možemo zapisati kao

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mK}{\hbar^2}\psi \quad (3.19)$$

što nam daje diferencijalnu jednadžbu drugog reda koja zadovoljava  
valnu funkciju  $\psi(x)$  beskonačne potencijalne jame.

Čestica u beskonačnoj potencijalnoj jami je veoma jednostavan sustav, s potencijalnom energijom jednakom nuli u području gdje se čestica giba. Uopće nije jednostavno jednadžbu (3.19) poopćiti tako da uključuje mogućnost da potencijalna energija  $U(x)$  nije jednaka nuli, već može varirati od točke do točke. Međutim, pošto je kinetička energija  $K$  razlika između ukupne energije  $E$  i potencijalne energije  $U(x)$ , potpuno je prirodno zamijeniti  $K$  u (3.19) sa

$$K = E - U(x) \quad (3.20)$$

Pomoću (3.20) diferencijalnu jednadžbu (3.19) možemo poopćiti, to nam daje diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]\psi \quad (3.21)$$

Ova jednadžba se zove vremenski neovisna Schrödingerova jednadžba. U naprednijim tekstovima i udžbenicima Schrödingerova jednadžba je obično napisana u obliku

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x) \right\} \psi = E\psi. \quad (3.22)$$

Zbog toga što vrijedi  $E = K + U(x)$  diferencijalni operator  $-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$  je nakon što usporedimo lijevu i desnu stranu jednadžbe (3.22) povezan sa kinetičkom energijom.



Schrödingerova jednađba kao što je napisana u (3.21) se odnosi na jednu česticu koja se giba u jednoj dimenziji. Da bi jednađba uključivala sustav više čestica, u dvije ili tri dimenzije, tada ju je potrebno dodatno poopćiti. Jednađba je osnova nerelativističke kvantne mehanike, jednako kao što je i drugi Newtonov zakona osnova nerelativističke klasične mehanike.

U većini slučajeva, ispada da za proizvoljnu vrijednost energije  $E$  Schrödingerova jednađba nema zadovoljavajućeg rješenja koje zadovoljava rubne uvijete. To je ono što nas vodi ka kvantizaciji energije. Vrijednosti energije  $E$  za koje Schrödingerova jednađba nema rješenje su zabranjene vrijednosti energije sustava.

Kao što smo već ranije naveli, fizikalna situacija zahtjeva da valna funkcija  $\psi(x)$  mora zadovoljavati određene rubne uvijete. Primjer, uvjet da  $\psi(x)$  mora iščeznuti kad dođe do zida potencijalne jame. Uz to, imamo i određena opća ograničenja, kao na primjer,  $\psi(x)$  mora biti kontinuirana, i čak u većini slučajeva, prva derivacija također mora biti kontinuirana. Kada pričamo o prihvatljivom rješenju Schrödingerove jednađbe, tada mislimo na rješenje koje zadovoljava sve uvijete koje nam je postavio fizikalni problem.

### 3.3 Beskonačno duboka potencijalna jama

Zamislimo prvo jednostavnu analogiju koristeći prijašnje znanje i iskustvo o valovima. Imamo česticu koja se nalazi na nekom konačnom intervalu na  $x$  osi, i slobodno se giba unutar tog intervala. To je situacija koju zapravo ovdje pokušavamo objasniti kao jednodimenzionalna

beskonačna potencijalna jama. Na primjer, u klasičnoj mehanici mogli bi smo razmotriti perlicu koja klizi na niti između dva čvora bez utjecaja trenja, perlica se može slobodno kretati između dva čvora, ali ne može pobjeći van granica omeđenih čvorovima. U kvantnoj mehanici možemo zamisliti elektron u vodiču veoma malog presjeka, i taj elektron se može slobodno kretati naprijed, natrag unutar tog vodiča, ali ne može pobjeći iz njega.

Razmotrimo, kvantna čestica mase  $m$  giba se u jednodimenzionalnoj beskonačnoj potencijalnoj jami neke duljine  $a$ , i na nju ne djeluju nikakve sile u intervalu  $x = 0$  i  $x = a$ . S obzirom da nemamo djelovanje nikakvih sila, potencijalna energija u beskonačnoj potencijalnoj jami je konstantna. Pošto je potencijalna energija konstanta, proizvoljno odlučujemo da bude jednaka nuli, što nam znači da je ukupna energija jednaka kinetičkoj energiji. Potencijalna energija je također beskonačno velika u točkama  $x = 0$  i  $x = a$ . Ovo nam kao što smo napomenuli ograničava gibanje čestice na područje  $x \in [0, a]$  za koje je

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{za } x < 0 \text{ i } x > a \end{cases} \quad (3.23)$$

pa Schrödingerova jednažba (3.22) možemo u području  $x \in [0, a]$  zapisati kao

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi \quad (3.24)$$

Ako pretpostavimo rješenje oblika

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \quad (3.25)$$

i uvrsti u jednadžbu (3.24) lako se pokaže da su valni vektor  $k$  i energija  $E$  povezani kao

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.26)$$

Pošto je nemoguće da čestica pobjegne iz potencijalne jame, valna funkcija na rubu i van potencijalne jame mora biti jednaka nuli, tj.:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (3.27)$$

Ovo su rubni uvjeti koje valna funkcija (3.25) mora zadovoljiti. Možemo primijetiti da su ovi rubni uvjeti identični onima za klasičan val na niti koja je stegnuta u  $x = 0$  i  $x = a$ .

Iz (3.25) vidimo da je  $\psi(0) = B$ . Međutim, valna funkcija (3.25) može zadovoljiti rubne uvijete (3.27) samo ako je koeficijent  $B$  jednak nuli, tj. uvjet  $\psi(0) = 0$  ograničava  $\psi(x)$  tako da ima oblik

$$\psi(x) = A\sin kx \quad (3.28)$$

Slijedeće, rubni uvjet  $\psi(a) = 0$  zahtjeva da

$$Asinka = 0 \quad (3.29)$$

što je tada uvjetno samo ako vrijedi:

$$ka = \pi, \text{ ili } 2\pi, \text{ ili } 3\pi\dots \quad (3.30)$$

ili

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (3.31)$$

gdje je

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Slijedeći korak nam je kvantizacija valnih duljina  $\lambda$  koja nam implicira i kvantizaciju momenta, a zbog toga i energije. Supstitucijom (3.32) u de Broglijevu relaciju  $p = h/\lambda$ , dolazimo do

$$p = \frac{nh}{2a} = \frac{n\pi\hbar}{a} \quad (3.33)$$

za vrijednost

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Nakon što uvjet (3.31) uvrstimo u izraz za energiju (3.26) proizlazi da su dopuštene energije beskonačno duboke potencijalne jame dane formulom

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3.34)$$

Valna funkcija (3.28) tada poprima oblik:

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (3.35)$$

Konstantu A određujemo iz uvjeta normiranosti valne funkcije

$$\int_0^a \psi^2(x) dx = 1 \quad (3.36)$$

iz čega dobivamo  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$  pa je konačno valna funkcija potencijalne jame:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (3.37)$$

Iz (3.34) vidimo da najnižu vrijednost energije imamo za  $n = 1$  i ona iznosi

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (3.38)$$

Ovo nam se poklapa s donjom granicom dobivenom iz Heisenbergovog principa neodređenosti.

#### 4. Rezultati i diskusija

U ovom djelu rada primijeniti ćemo numeričku metodu Runge-Kutta četvrtog reda „RK4“ na diferencijalne jednadžbe za gibanje matematičkog njihala i beskonačnu potencijalnu jamu, i pratiti kako se ta numerička metoda ponaša za različite početne i rubne uvijete, tj. za različite vrijednosti kuta  $\theta$  i kutne brzine  $\omega$  kod problema njihala, te za različite vrijednosti energije  $E$  kod problema beskonačno duboke potencijalne jame.

Da bi mogli pratiti ponašanje metode Runge-Kutta četvrtog reda (RK4), uspoređivati ćemo rješenja koje nam daje ta numerička metoda za linearno matematičko njihalo sa analitičkim rješenjem matematičkog njihala za jednake iznose kuta  $\theta$  i kutne brzine  $\omega$ , koji su nam početni uvjeti, dok ćemo kod problema rubnog uvjeta vidjeti kako nam se metoda ponaša kod Schrödingerove jednadžbe za beskonačnu potencijalnu jamu kada imamo i rubne i početne uvjete.

## 4.1 Harmonijska aproksimacija

Kao što smo već ranije naglasili, iako smo u ovom istraživanju pojednostavnili fizikalni model tako što smo odlučili da ćemo promatrati matematičko njihalo, što je samo po sebi vrlo visoki stupanj idealizacije problema naspram fizičkog njihala, te to isto matematičko njihalo promatrati samo za male kutove, tj. njegovu harmonijsku aproksimaciju.

U svrhu ovog diplomskog rada je napisan program RungeKutta 4 4.0 u programskom jeziku C, koji nam je uvelike olakšao rješavanje ovog problema. Samo izvršavanje programa nam ovisi o početnim uvjetima i određenim parametrima koje definiramo prije izvođenja programa. Tako u programu kao početne uvjete možemo definirati vrijeme u trenutku  $t_0$ , iznos početnog kuta  $\theta_0$ , te početne kutne brzine  $(\omega_0) v x_0$ . Program također omogućava i podešavanje određenih parametara koji utječu na samo rješenje, pa tako imamo vremensko ograničenje  $tn$  koje nam ograničava duljinu izvođenja programa, korak Runge-Kutta četvrte metode (*RK4 step*)  $dt$ , broj točaka koje želimo da nam program nacrtava ovisi o parametrima  $dt, tn, t_0$  u samom programu, duljinu niti njihala  $l$ , te akceleraciju sile teže  $g$  koje nam je zapravo konstantno i iznosi  $9.81 \text{ m/s}^2$ .

Nakon što program obradi sve rezultate, zapisuje ih u datoteku pod imenom *data.txt* koja se nalazi u istom direktoriju kao i program.

### 4.1.1 Rezultati numeričkog i analitičkog računa za matematičko njihalo

U ovom dijelu rada simulirati ćemo matematičko njihalo pomoću programa koji smo u tu svrhu napravili. Program će nam dati rezultate s obzirom na različite početne uvjete i za analitički račun i numeričku

metodu matematičkog njihala, pri tome parametri njihala su nam duljina niti njihala  $l = 0,3 \text{ m}$  i akceleracija sile teže  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ . Iz ovih parametara slijedi da je period njihala u aproksimaciji malih otklona jednak  $T = 2\pi\sqrt{\frac{g}{l}} = 1.0987$ .

Međutim, parametri njihala nisu jedini parametri koje možemo odrediti a konkretno nam utječu na vrijednost rezultata, imamo i parametre Runge-Kutta četvrte metode, a to su vrijeme u kojem smo provodili mjerenje je  $t_n = 5\text{s}$ , korak Runge-Kutta metode  $h = 0.01$ , te broj koraka kojih imamo u mjerenju  $num_{points} = 200$ . Zadnji parametar nam je zapravo rezolucija tog mjerenja, pomoću nje programu definiramo za koliko će točaka ispisati vrijednost.

Početno vrijeme u trenutku $t_0$ [s]	Kut $\theta_0$ [°]	Kutna brzina $\omega_0$ [rad/s]
0	1,5	0
0	3	0
0	5	0
0	9	0
0	13	0
0	15	0
0	19	0
0	21	0
0	28	0
0	35	0
0	45	0
0	60	0
0	90	0
0	135	0
0	165	0

Tablica 4.1 Vrijednosti početnih uvjeta

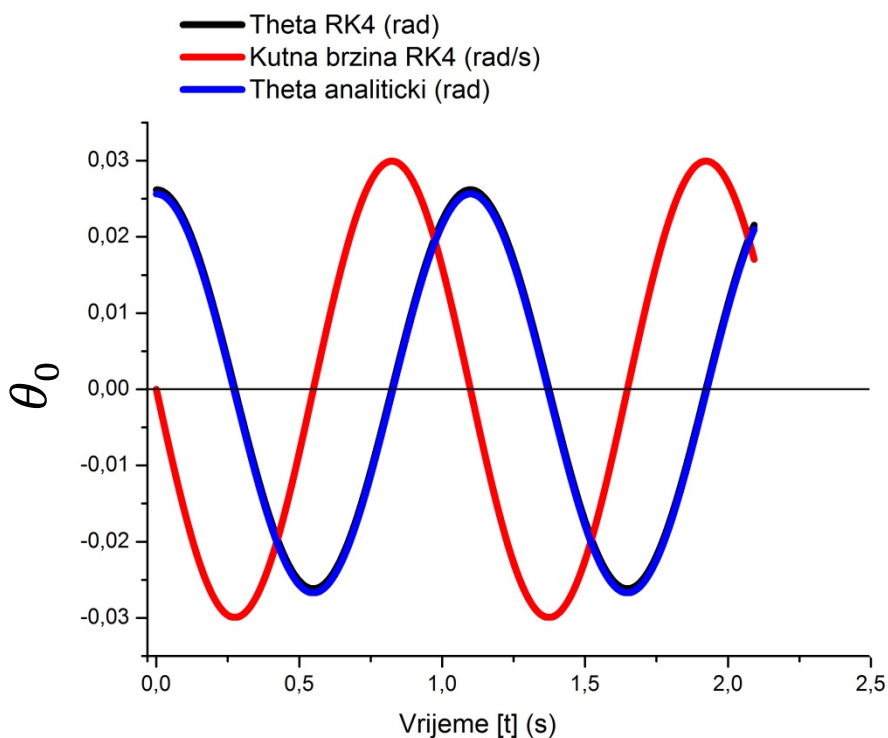


Početni uvjeti su:

$$\theta(0) = \theta_0$$

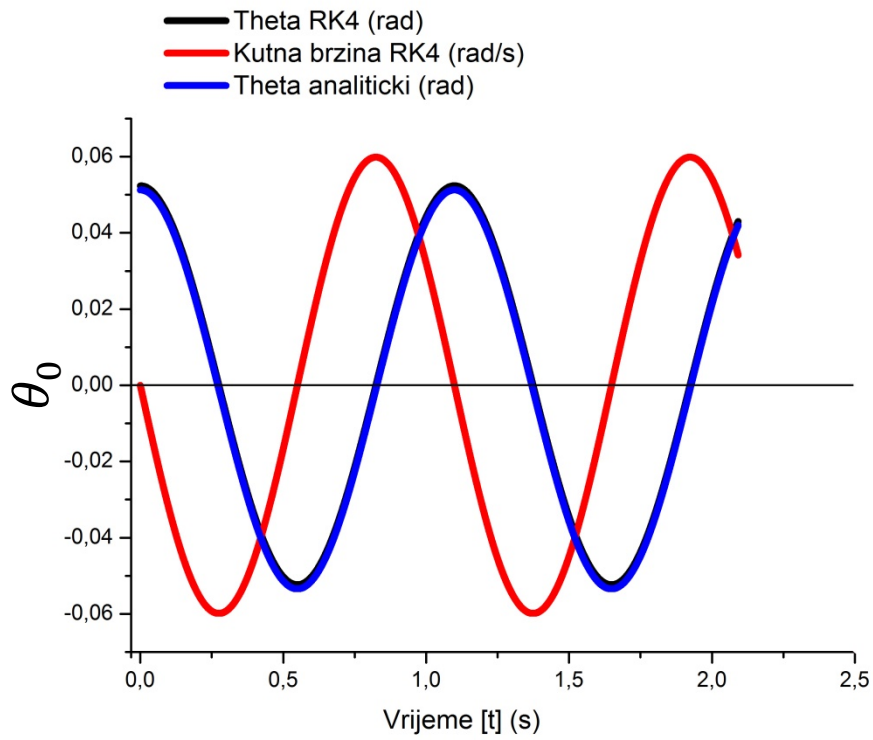
$$\dot{\theta}(0) = \omega_0$$

gdje smo izabrali da nam je  $\omega_0 = 0$ .

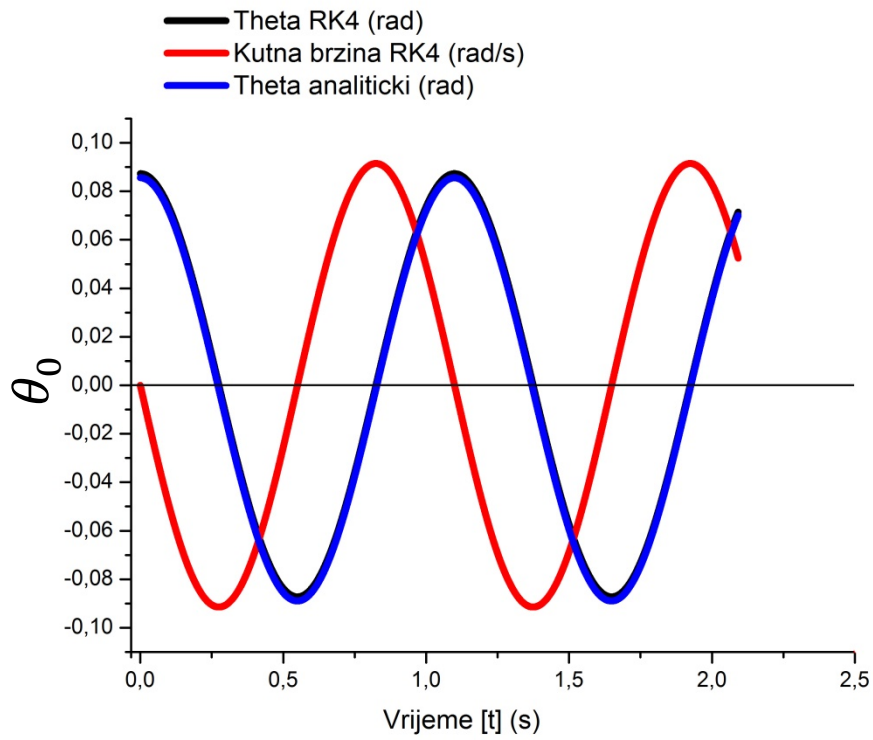


Graf 4.1 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 1.5^\circ$

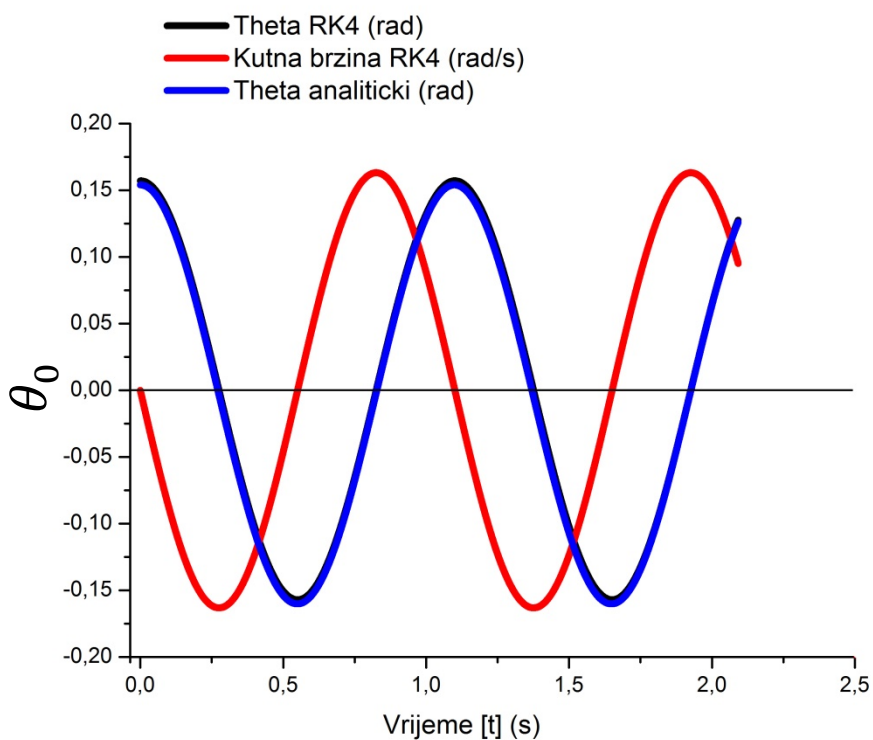
Kao što se može vidjeti iz grafa (4.1) vrijednosti koje nam je dala numerička metoda RK4 su u potpunosti identična ili slična vrijednostima analitičkog računa. Rezultati numeričke metode, u grafu označeni crnom bojom, se za početne uvijete  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 1.5^\circ$  potpuno preklapaju s rezultatima analitičke metode.



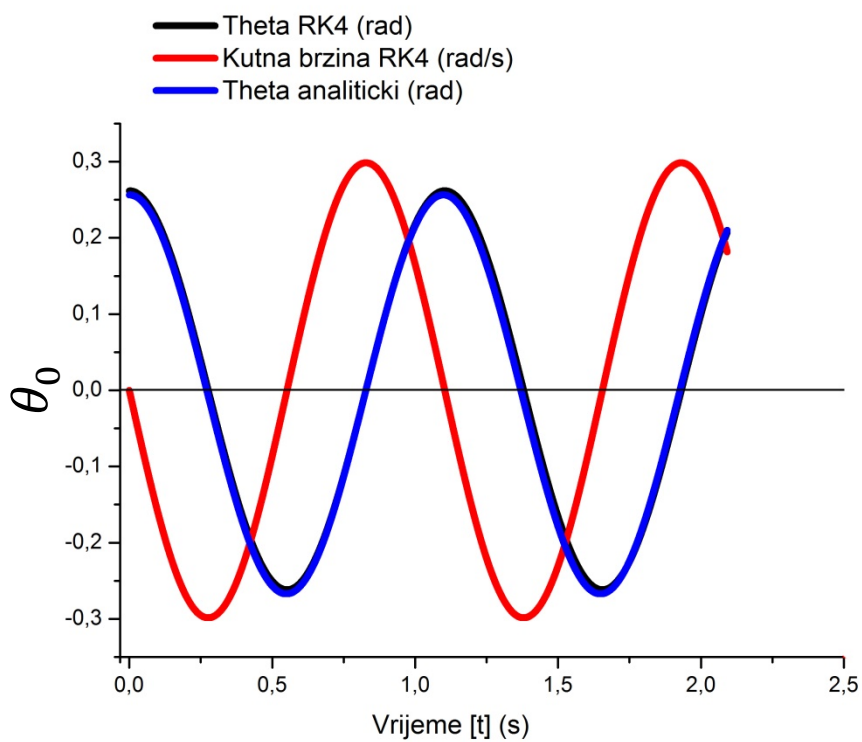
Graf 4.2 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 3^\circ$



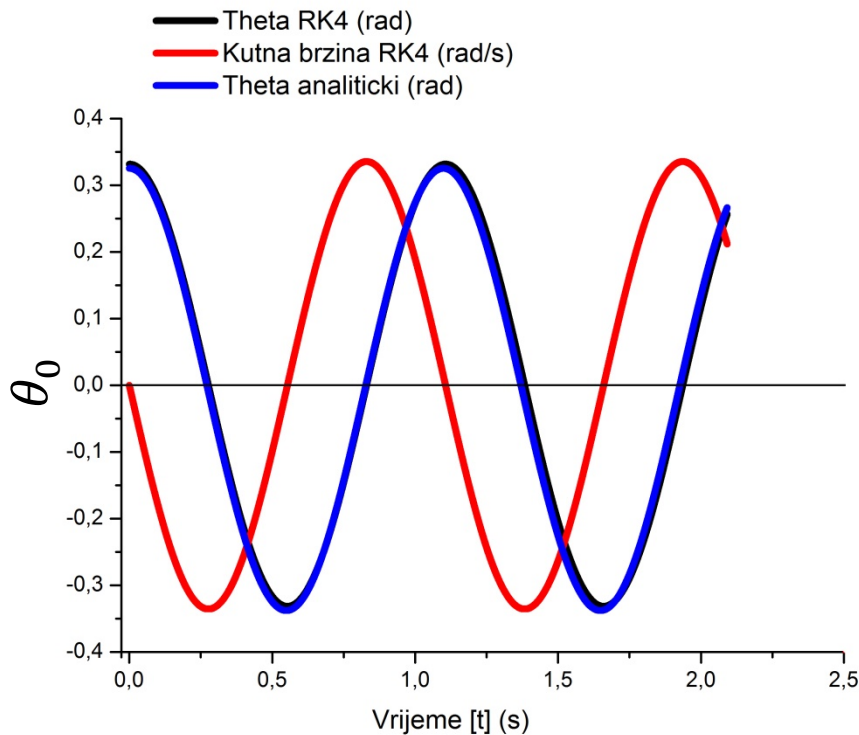
Graf 4.3 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 5^\circ$



Graf 4.4 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 9^\circ$

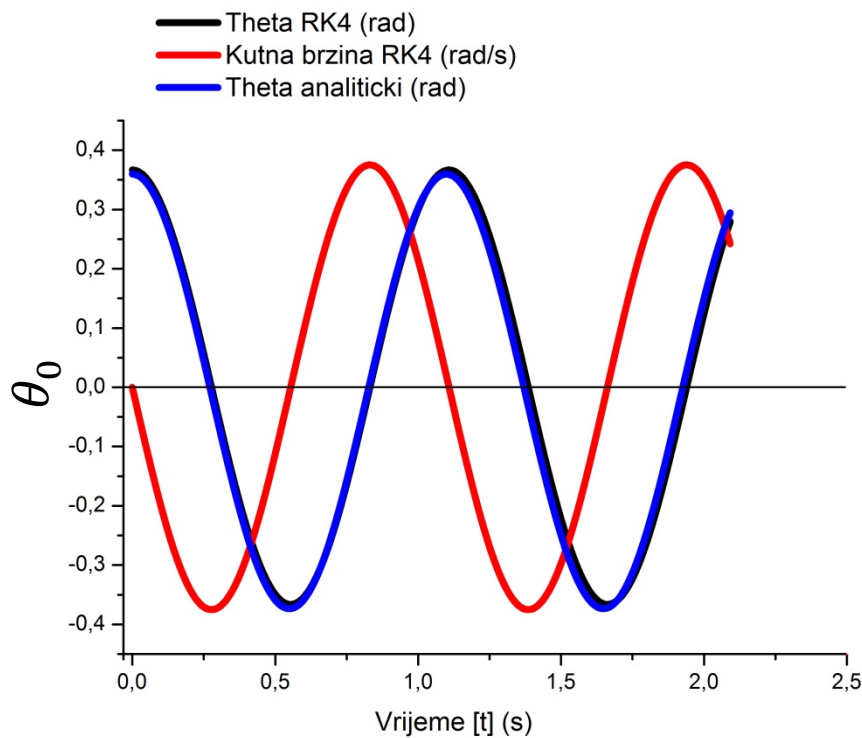


Graf 4.5 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 15^\circ$



Graf 4.6 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 19^\circ$

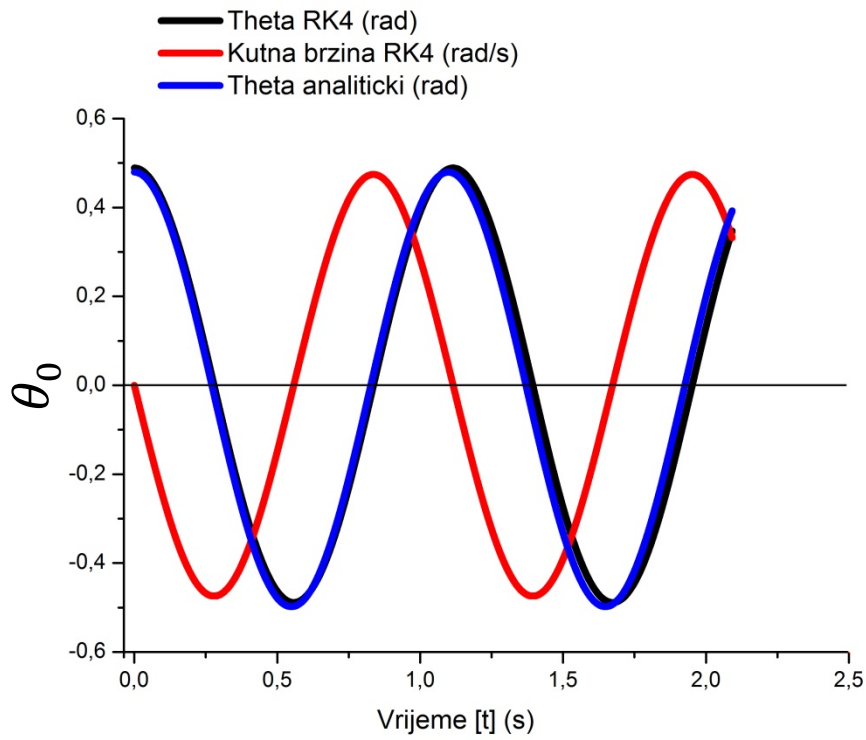
Kao što se vidi iz priloženih grafova (4.1-4.6), za početne uvijete  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 1.5^\circ, 3^\circ, 5^\circ$  analitički rezultat je skoro identičan numeričkom rezultatu, dok za početne uvijete  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 9^\circ, 15^\circ, 19^\circ$  analitički rezultat se vidljivo razlikuje od numeričkog rezultata, međutim ta razlika je toliko mala da u stvarnosti nema velikog utjecaja na točnost rezultata. To nam se događa zbog toga što za male kutove vrijedi harmonijska aproksimacija te bi nam se za velike kutove to trebalo promijeniti. Kutna brzina  $\omega_0$  nam se u svim grafovima ponaša prirodno i nema velikog odstupanja.



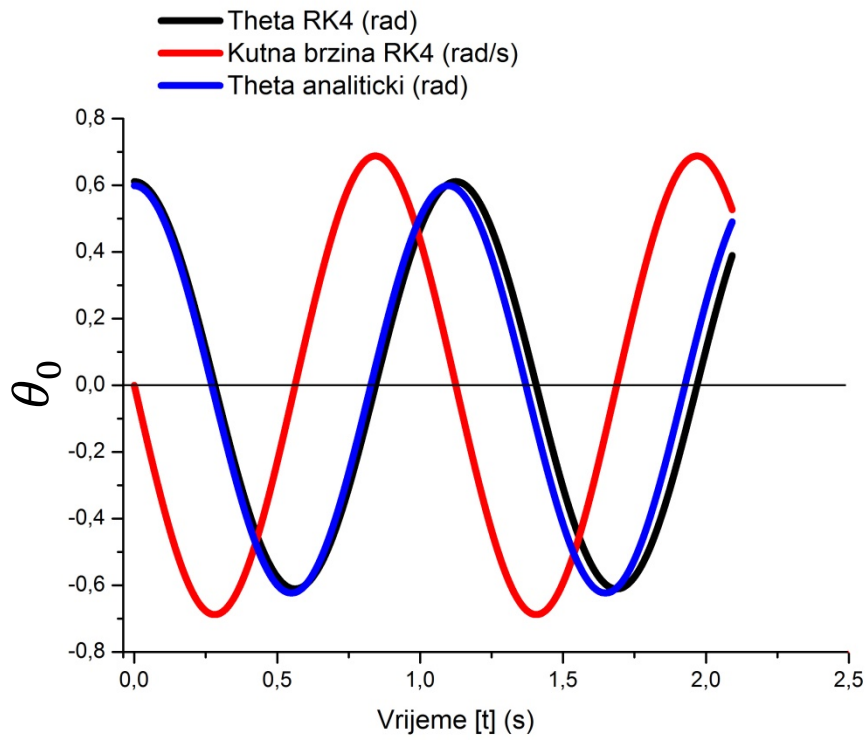
Graf 4.7 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0, t_0 = 0, \theta_0 = 21^\circ$

Iz grafa (4.7) se vidi da za početne uvjete  $\omega_0 = 0, t_0 = 0, \theta_0 = 21^\circ$  analitički izračun počinje polagano davati rezultate koji se razlikuju od Runge-Kutta metode četvrtog reda. Ukoliko pogledamo graf malo bolje, vidimo da se vrijednosti u točkama za koje smo dobili rezultate počinju ne poklapati kako se matematičko njihalo giba, nakon proteklog vremena  $t = 0.5s$  razlika između plavih točaka i crnih kvadratića nam se povećava te možemo zaključiti da harmonijska aproksimacija više ne vrijedi, tj. vrijednost kuta theta  $\theta$  više nije jednaka vrijednosti  $\sin\theta_0$ .

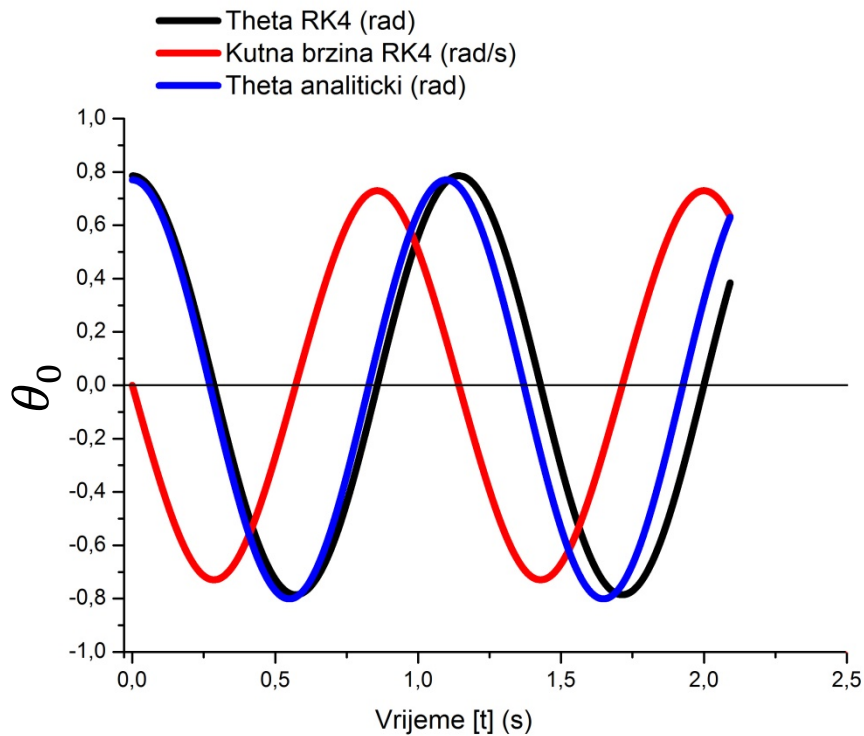
$$\theta_0 \neq \sin\theta_0 \quad (4.1)$$



Graf 4.8 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 28^\circ$

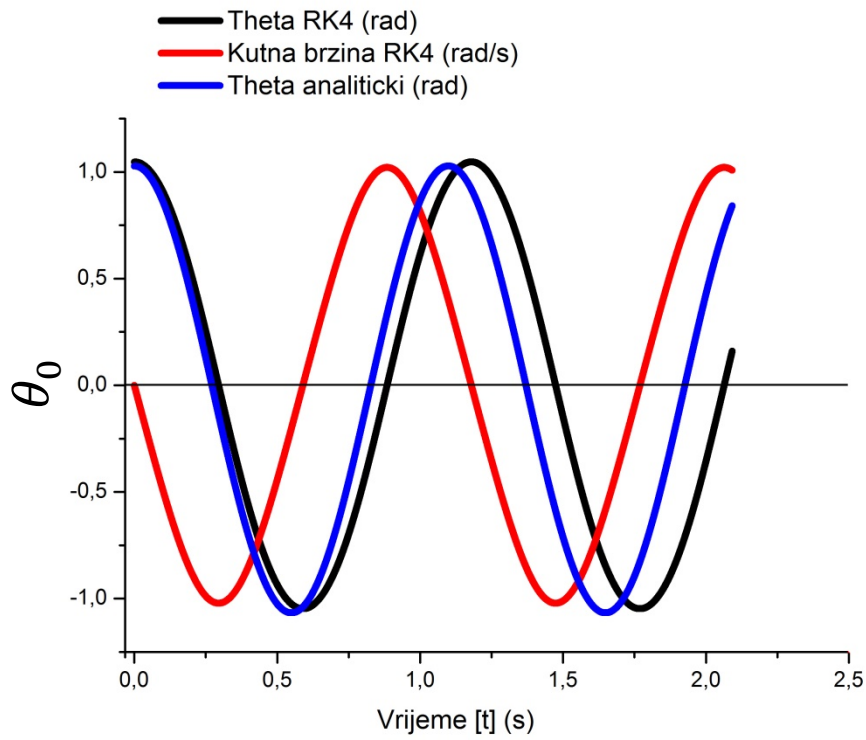


Graf 4.9 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 35^\circ$

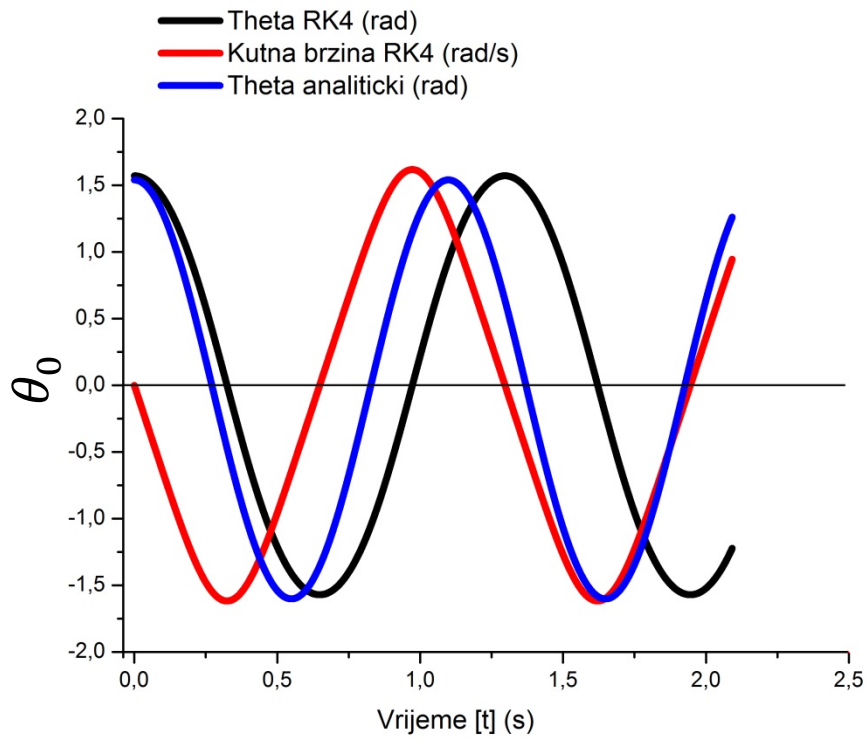


Graf 4.10 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 45^\circ$

Kao što se vidi iz grafa iznad (4.10), za što veći početni kut  $\theta_0$  veće je i odstupanje numeričke metode od analitičkog rješenja. Pa tako za početnu vrijednost kuta  $\theta_0 = 45^\circ$  numerička metoda već bitno odstupa od analitičkog rješenja te za ovoliki početni kut ne možemo koristiti harmonijsku aproksimaciju. Za manja vremena odstupanje je malo, međutim kako vrijeme teče odstupanje se kumulativno povećava.

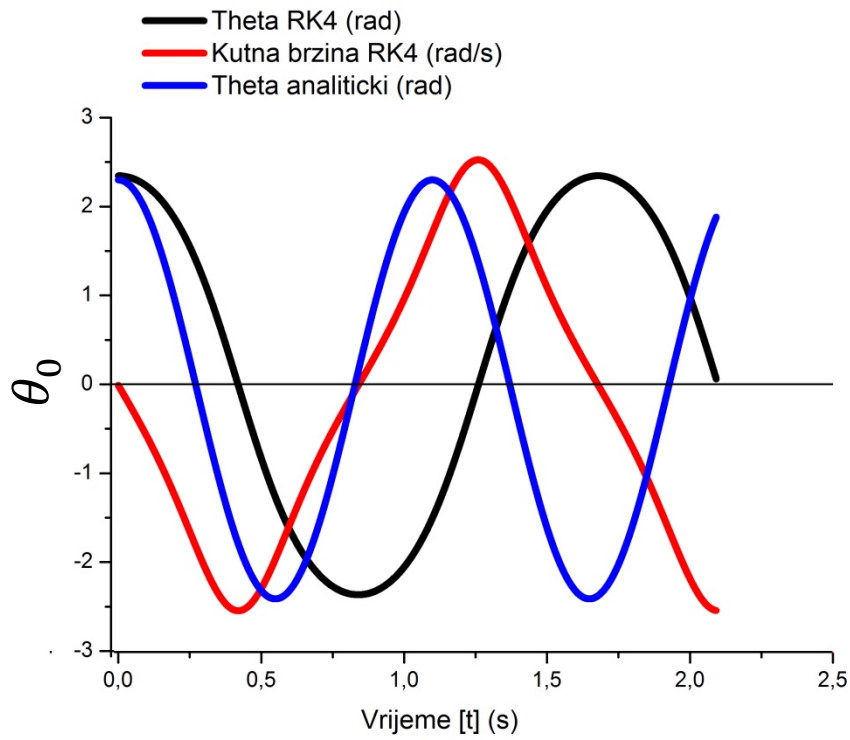


Graf 4.11 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 60^\circ$

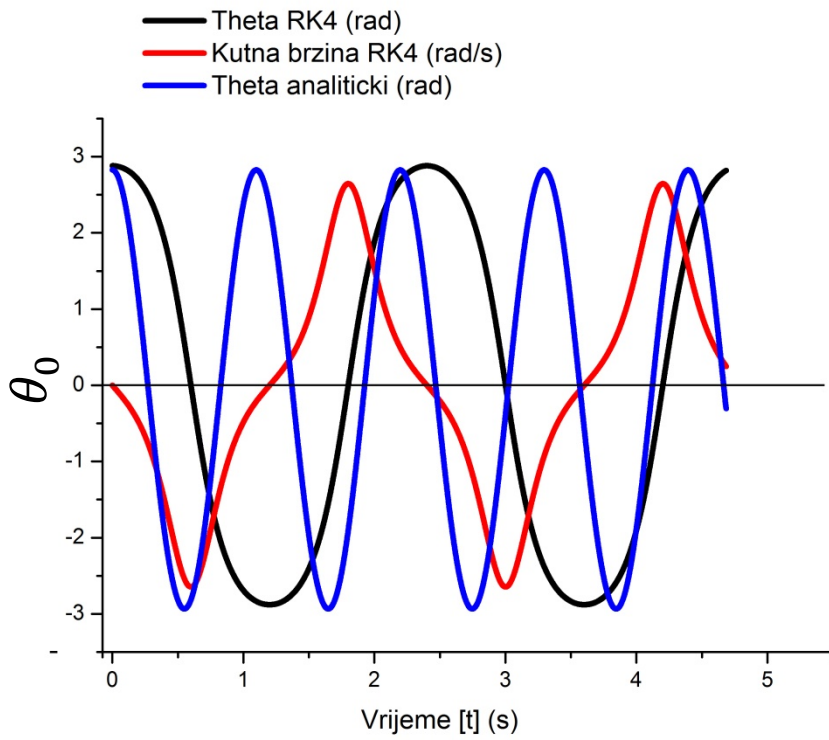


Graf 4.12 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 90^\circ$





Graf 4.13 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 135^\circ$



Graf 4.14 Početni uvjeti:  $\omega_0 = 0$ ,  $t_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 165^\circ$

Iz priloženih grafova se vidi da harmonijska aproksimacija vrijedi isključivo za male kutove, te je praktički ne bi trebali koristiti za kutove veće od  $\theta_0 = 20^\circ$  što se poklapa s teorijskim dijelom rada gdje smo naveli da harmonijska aproksimacija za male kutove vrijedi ako je vrijednost kuta theta  $\theta_0 \leq 20^\circ$ .

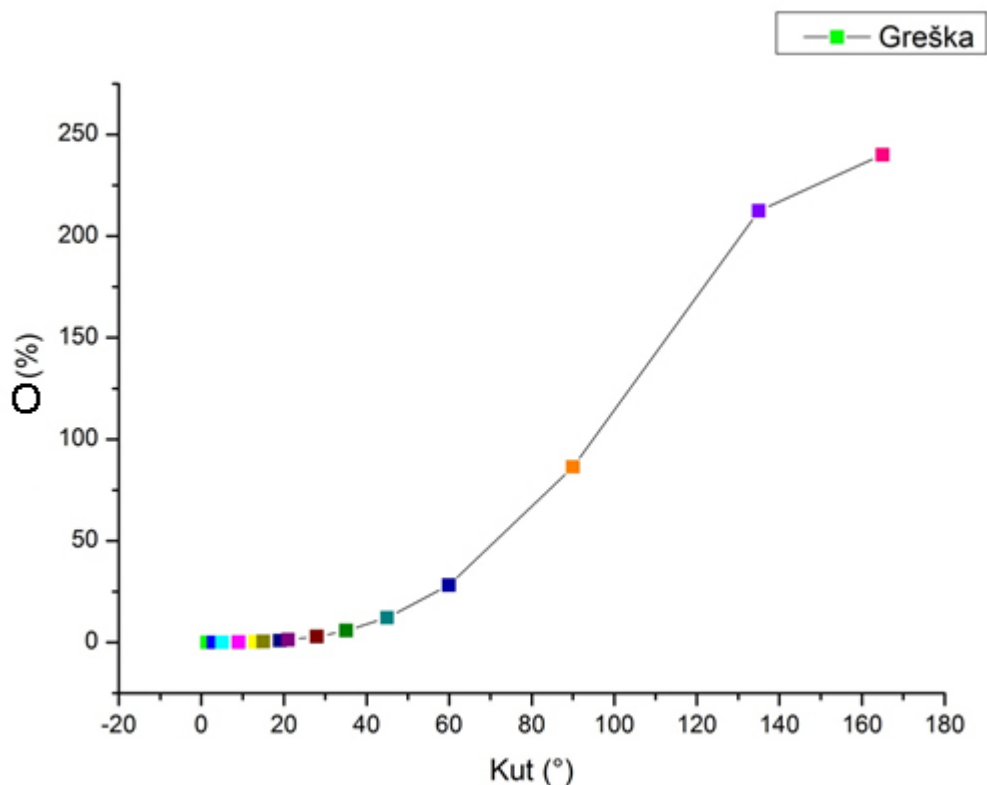
$\theta_0$ [°]	$\theta_0$ [rad]	$\sin\theta_0$	Greška
0	0	0	0
5	0.0872	0.0873	0.1%
10	0.1736	0.1745	0.5%
20	0.3420	0.3490	2.0%
30	0.5000	0.5236	4.7%
45	0.7071	0.7854	11.1%

*Tablica 4.2 Egzaktne vrijednosti greške za različite kutove harmonijske aproksimacije*

Kao što vidimo iz tablice (4.2) greška harmonijske aproksimacije nam ovisi o početnom kutu  $\theta_0$  i kao što smo pretpostavili vrijedi do vrijednosti kuta  $\theta_0 = 20^\circ$ . Za vrijednosti kuta  $\theta_0 > 20^\circ$ , greška koja nam je zapravo odstupanje  $\sin\theta_0$  od točne vrijednosti  $\theta_0$  u radijanima izražena u postocima je prevelika.

Odstupanje  $O$  od analitičkog rješenja za naše grafove smo dobili pomoću formule:

$$O = \frac{1}{n} \sum_n \frac{\theta(tn)^{num} - \theta(tn)^{anal}}{\theta(tn)^{num}} * 100.$$



*Graf 4.15. Harmonijska aproksimacija – ovisnost greške numeričke metode o početnom kutu*

Na slici (4.15) vidimo da vrijednosti koje smo dobili u ovom istraživanju se poklapaju sa egzaktnim vrijednostima za harmonijsku aproksimaciju. Međutim, postoji malo odstupanje zbog određenih grešaka na koje na žalost jako teško možemo utjecati.

Imamo tri tipa pogrešaka:

- grešku harmonijske aproksimacije
- grešku numeričke metode
- grešku pri pretvaranju kuta iz stupnjeva u radijane ( $\approx 0,5\%$ )

Kao što smo već nekoliko puta u ovom radu naglasili, za velike kutove harmonijskom aproksimacijom nećemo dobiti točno rješenje. Greška harmonijske aproksimacije je proporcionalna s veličinom kuta, te ukoliko imamo jako veliki kut, nije ju poželjno koristiti. Numerička metoda Runge-Kutta četvrtog reda također nije savršeno točna, tj. ona je kao što smo već ranije napomenuli samo aproksimacija točnog rješenja. Runge-Kutta četvrta metoda daje odličnu stabilnost rješenja, no ta ista stabilnost najviše ovisi o koraku  $h$  same metode, te nepažnjom može doći do jako velikih odstupanja od rješenja. Greška metode Runge-Kutta četvrtog reda za jedan korak jednaka je vrijednosti  $O(h^5)$ , dok za više koraka je jednaka vrijednosti  $O(h^4)$ .

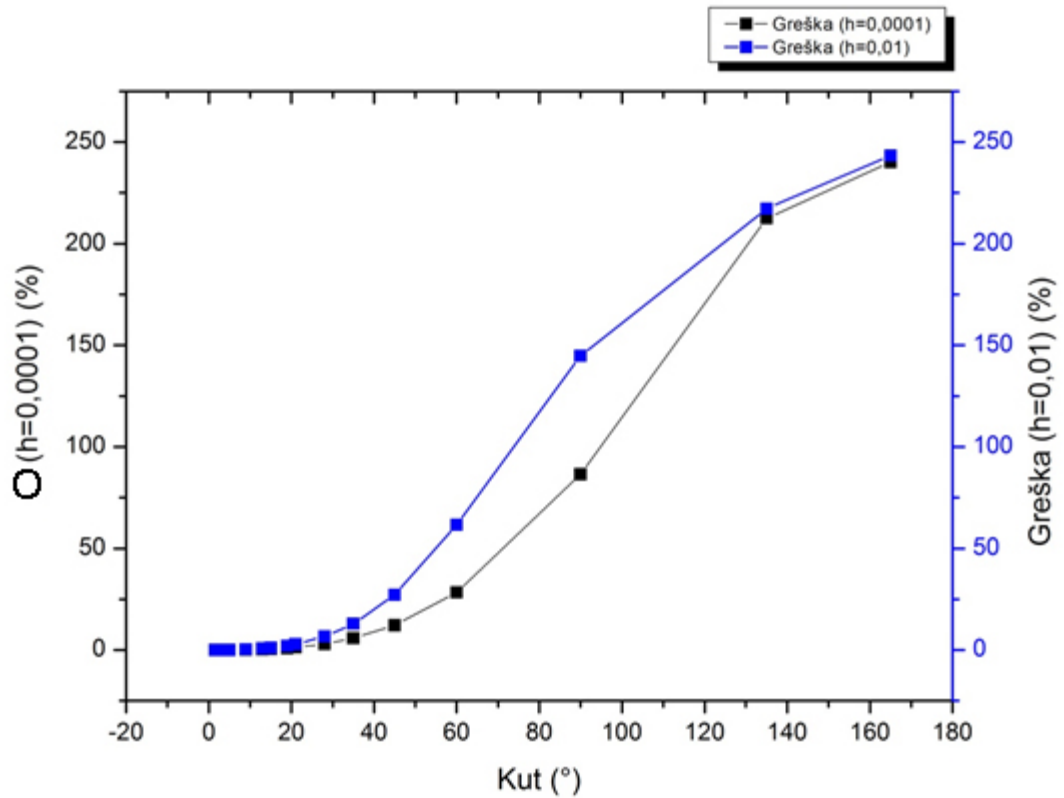
Što nam to točno znači?

Ukratko, iako svaki korak iteracije metode nosi u sebi određenu lokalnu grešku, pa što metoda ima više koraka, na kraju je ukupna globalna greška manja, jer smo za isti rezultat napravili više simulacija, što ćemo najbolje vidjeti iz slijedeće tablice.

Kut $\theta$ [°]	Greška ( $h=0,0001$ )	Greška ( $h=0,01$ )
1,5	0%	0%
3	0%	0,01%
5	0,02%	0,03%
9	0,09%	0,21%
13	0,29%	0,65%
15	0,45%	1,00%
19	0,91%	2,04%
21	1,23%	2,76%
28	2,93%	6,56%
35	5,72%	12,83%
45	12,11%	27,17%
60	28,25%	61,56%
90	86,42%	144,71%
135	212,5%	217,28%
165	240,09%	243,42%

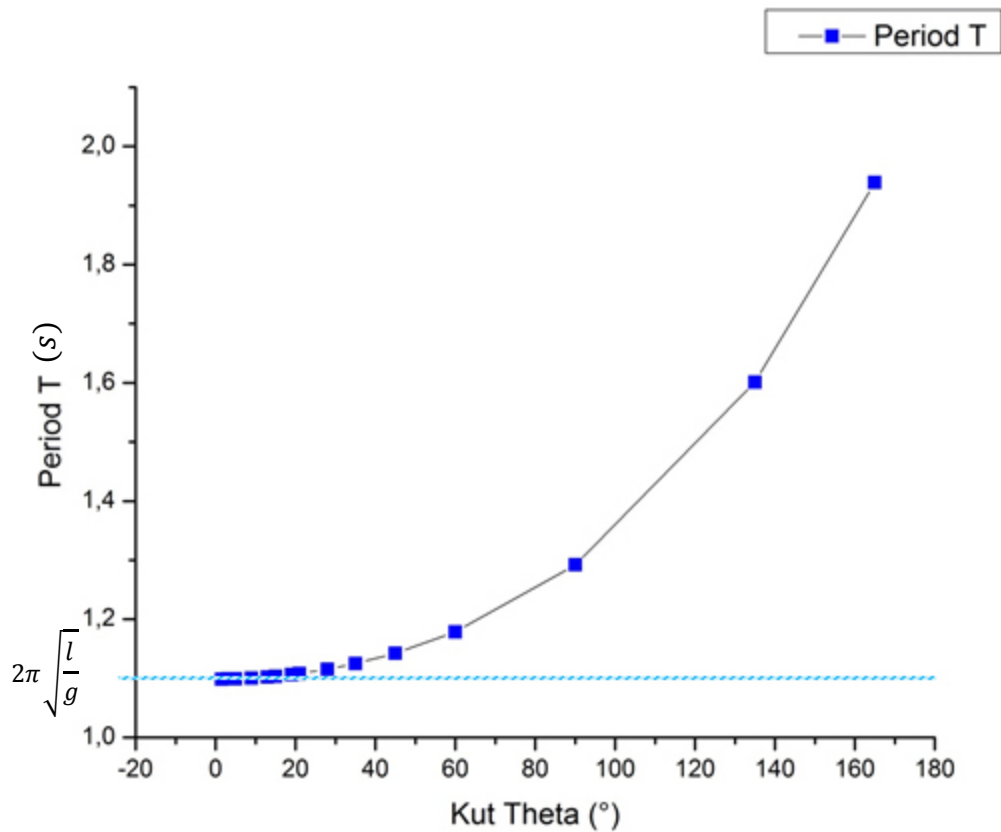
*Tablica 4.3 Greška RK4 za različite korake*

Grešku smo računali tako da smo mjerili odstupanje numeričke metode od analitičkog rješenja za dvije različite vrijednosti koraka  $h$ . Kao što se vidi iz tablice (4.3) greška numeričke metode Runge-Kutta četvrtog reda za korak  $h = 0,0001$  je puno manja nego greška za korak  $h = 0,01$ . Ono što je veoma bitno za naglasiti je da kod vrijednosti koraka  $h = 0,0001$  računalo je moralo napraviti 50000 iteracija za isti problem, što troši više energije, vremena i resursa.



Graf 4.16. RK4 razlika u koraku  $h = 0,01$  i  $h = 0,0001$

Grešku  $O$  smo računali kao i za graf (4.15), i ovdje smo prikazali kako greška  $O$  ovisi o kutu  $\theta_0$  za dvije različite vrijednosti koraka numeričke metode Runge-Kutta.



Graf 4.17. Ovisnost perioda  $T$  o početnom kutu  $\theta_0$

Iz grafa (4.17) vidimo da je period titranja njihala za područje harmonijske aproksimacije otprilike jednak  $2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$  dok za područje na kojem nemamo harmonijsku aproksimaciju period titranja raste proporcionalno s kutom otklona njihala. Za vrijednost  $\theta_0 = \pi$  period divergira, tj. ide u beskonačnost.

## 4.2 Beskonačna potencijalna jama

Pošto nam se ovdje opet radi o diferencijalnoj jednadžbi drugog reda (3.45) kao i u primjeru za početne uvijete, i ovdje ćemo napraviti određene idealizacije da si olakšamo kako analitički pa tako i numerički račun. U svrhu toga umjesto standardnog sustava jedinica, koristit ćemo Hartreejev sustav atomskih jedinica. Hartreejeva energija ( $E_h$  ili  $Ha$ ) je atomska jedinica definirana kao  $2R_\infty hc$ , gdje je  $R_\infty$  Rydebergova konstanta,  $h$  Planckova konstanta i  $c$  brzina svjetlosti. Preporučena vrijednost je  $E_h = 4.359\,744\,34(19) \times 10^{-18} J$ , što bi u elektronvoltima bilo jednako  $E_h = 27.211\,385\,05(60) eV$ . Kao što vidimo, izraz za Hartreejevu energiju je veoma sličan izrazu za energiju kod Schrödingerove jednadžbe

$$E_h = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} = m_e \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 = m_e c^2 \alpha^2 = \frac{\hbar c \alpha}{a_0} = 2R_y \quad (4.2)$$

gdje je

- $\hbar$  reducirana Planckova konstanta
- $m_e$  masa elektrona
- $e$  naboj elektrona
- $a_0$  Bohrov radijus
- $\epsilon_0$  električna konstanta
- $c$  brzina svjetlosti u vakumu
- $\alpha$  strukturalna konstanta

Kako nam sve ovo zapravo čini račun jednostavnijim? Pa tako da smo u jednadžbi za energetske nivoe u Schrödingerovoj jednadžbi



$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

za vrijednosti  $\hbar$  i  $m$  umjesto njihovih standardnih vrijednosti mi uvrstili jedan.

$$\hbar = 1.054571726(47) \times 10^{-34} \text{ Js} \Rightarrow \hbar = 1 \text{ Js}$$

$$m = 9.10938291 \times 10^{-31} \Rightarrow m = 1 \text{ Kg}$$

Iz toga smo dobili

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2}{2a^2}$$

Ako je energija za prvi nivo, npr.  $E_1 = 1$  zapravo se radi o energiji  $E_1 = 27,21 \text{ eV}$ . Hartreejev sustav atomskih jedinica također ima utjecaj na širinu beskonačne potencijalne jame, tako da ukoliko nam je širina potencijalne jame, npr.  $a = 1$ , beskonačna potencijalna jama nam je zapravo široka  $a = 0,53 \text{ \AA}$ .

$$E_1 = 1 \Rightarrow E_1 = 27,21 \text{ eV}$$

$$a = 1 \Rightarrow a = 0,53 \text{ \AA}$$

#### 4.2.1 Rezultati numeričkog i analitičkog računa Schrödingerove jednadžbe za beskonačno duboku potencijalnu jamu

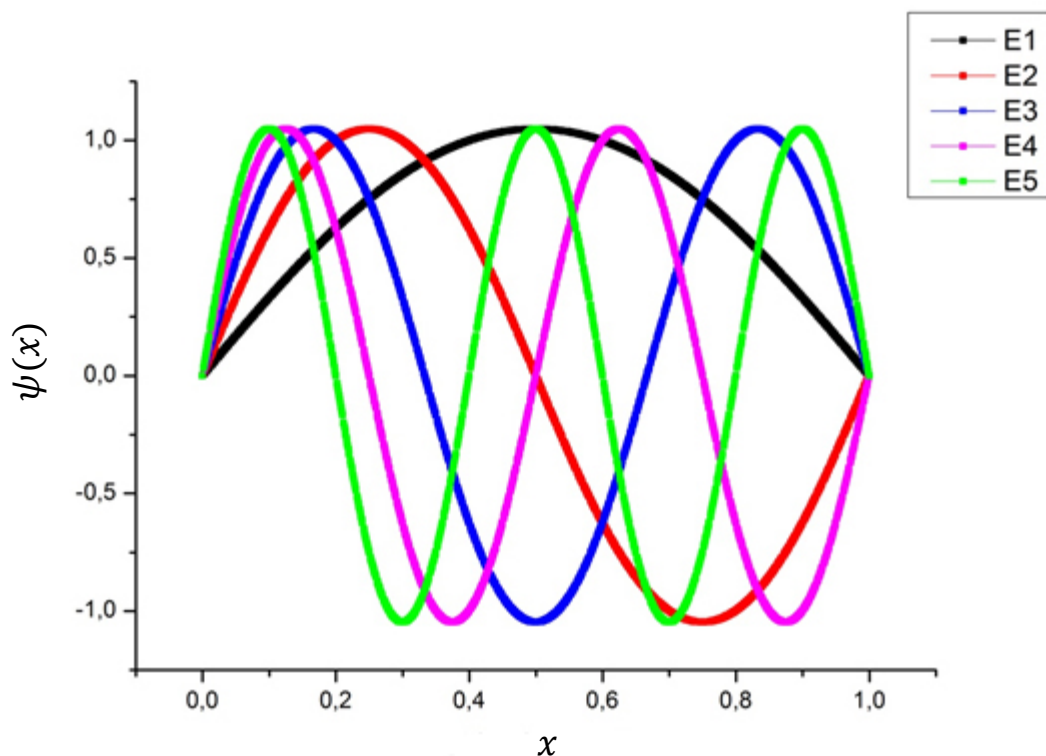
Za uspješno rješavanje ovog rubnog problema odabrali smo takozvanu *shooting metodu*. U numeričkoj analizi *shooting metoda* se koristi za rješavanje problema rubnih uvjeta na dva načina. Prvi način je da problem rubnih uvjeta reducira na problem početnih uvjeta (*single shooting method*), a drugi način je da metoda dijeli interval u kojem je rješenje pronađeno, i zatim se taj interval dijeli na puno manjih intervala. Tada se kao i u prvom načinu rješava problem početnog uvjeta za svaki od tih manjih intervala, to nam nameće dodatne uvjete koje koje jednadžba mora zadovoljiti i tada se formira rješenje na cijelom intervalu (*Direct multiple shooting method*). Ova metoda dalje bolje rezultate od *single shooting* metode kad je u pitanju distribucija nelinearnosti i numerička stabilnost rješenja.

Pošto u ovoj simulaciji praktički pogađamo rješenje koje zadovoljava rubne uvjete, ovo istraživanje ćemo napraviti na drukčiji način od onoga za početne uvjete. Zadat ćemo pet duljina beskonačne potencijalne jame  $a = 1, 3, 6, 9, 13$ , i tražit ćemo vrijednosti energije za pet prvih energetske nivoa  $E_n$  te usporediti rezultate dobivene numeričkom metodom i analitičkim računom.

S obzirom da se radi o veoma malim energijama, simulacije ćemo napraviti uz veću preciznost nego što smo ih radili do sada. Za svako mjerenje korak Runge-Kutta metode će nam biti  $h = 0,0001$  tako da ćemo moći veoma dobro aproksimirati rješenja za niske energetske nivoe u slučajevima veoma široke beskonačne potencijalne jame.

Duljina beskonačne potencijalne jame ( $a=1$ )	Rješenje numeričke metode ( $\psi_{RK4}$ )	Analitičko rješenje ( $\psi_{ANAL.}$ )
Energijski nivo $E_1$ [Ha]	5,1219	4,9348
Energijski nivo $E_2$ [Ha]	20,4878	19,7392
Energijski nivo $E_3$ [Ha]	46,0978	44,4132
Energijski nivo $E_4$ [Ha]	81,9513	78,9568
Energijski nivo $E_5$ [Ha]	128,0497	123,37

Tablica 4.4 Vrijednosti RK4 i analitičkog rješenja za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a = 1$



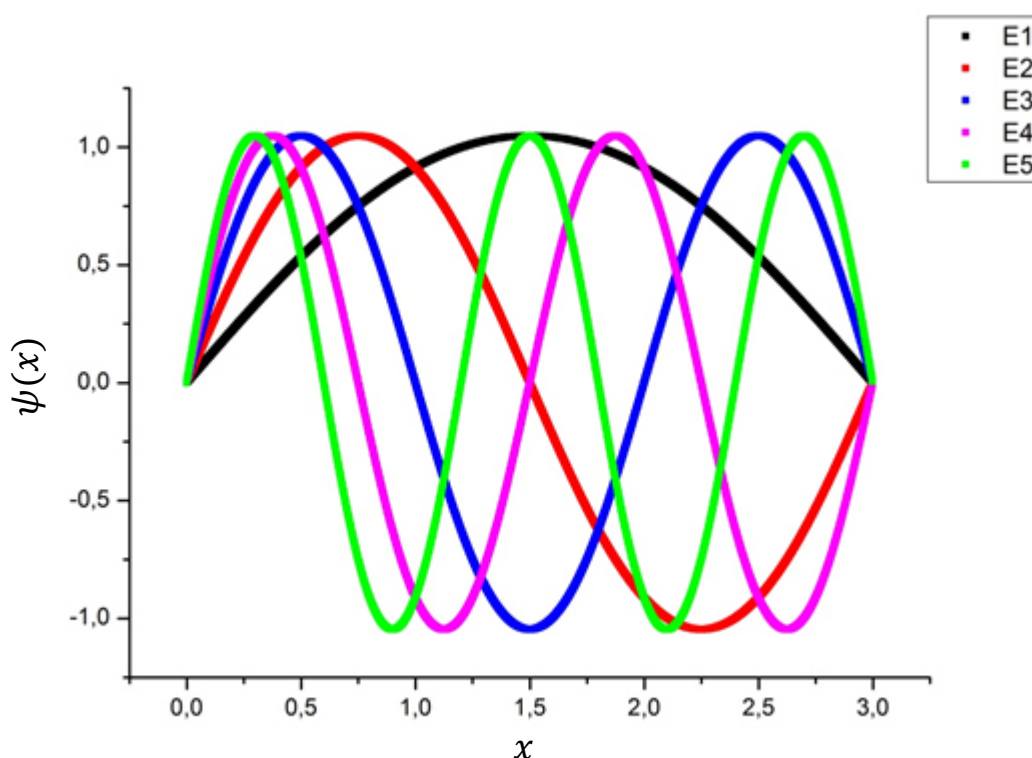
Graf 4.17 Analitičko rješenje za sve energetske nivoe  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  i širinu jame  $a = 1$

Iz grafa (4.17) vidimo kako izgleda funkcija  $\psi$  za sve energetske nivoe  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$ , iz tablice (4.4) vidimo da postoji razlika već za osnovni energetske nivo između rješenja koje nam daje numerička metoda RK4 i analitičkog rješenja.

Duljina beskonačne potencijalne jame ( $a=3$ )	Rješenje numeričke metode ( $\psi_{RK4}$ )	Analitičko rješenje ( $\psi_{ANAL.}$ )
Energijski nivo $E_1$ [Ha]	0,5691	0,5483
Energijski nivo $E_2$ [Ha]	2,2764	2,1932
Energijski nivo $E_3$ [Ha]	5,1219	4,9348
Energijski nivo $E_4$ [Ha]	9,1056	8,7729
Energijski nivo $E_5$ [Ha]	14,2276	13,7077

Tablica 4.5 Vrijednosti RK4 i analitičkog rješenja za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a = 3$

Možemo zaključiti da što je veći energetski nivo, to je i razlika između numeričke metode i analitičkog rješenja veća. Vjerojatno je da bi razlika bila zanemarivo manja da nam je numerička metoda računala više koraka.

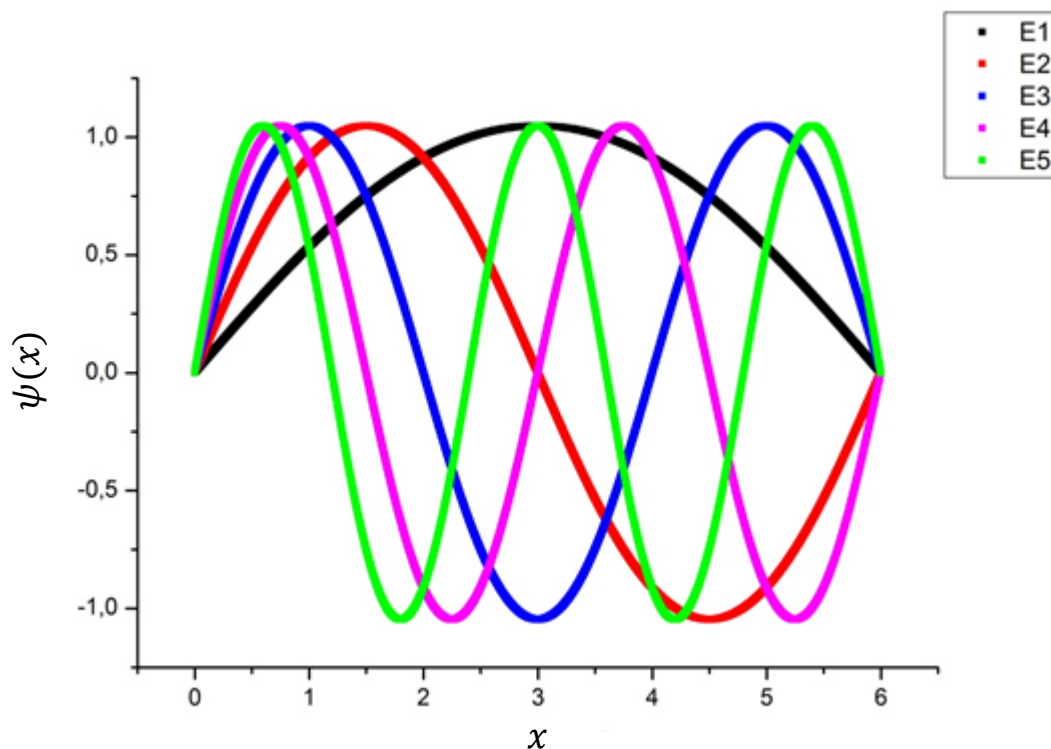


Graf 4.18 Analitičko rješenje za sve energetske nivoe  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  i širinu jame  $a = 3$

Iz tablice (4.5) vidimo da nam je za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a=3$  energija manja nego energija za užu potencijalnu jamu  $a=1$ . Razlika između numeričke metode i analitičkog rješenja je očigledna, analitičko rješenje nam kontinuirano daje manje vrijednosti energije od numeričke metode.

Duljina beskonačne potencijalne jame ( $a=6$ )	Rješenje numeričke metode ( $\psi_{RK4}$ )	Analitičko rješenje ( $\psi_{ANAL.}$ )
Energijski nivo $E_1$ [Ha]	0,1422	0,1370
Energijski nivo $E_2$ [Ha]	0,5691	0,5483
Energijski nivo $E_3$ [Ha]	1,2805	1,2337
Energijski nivo $E_4$ [Ha]	2,2765	2,1932
Energijski nivo $E_5$ [Ha]	3,5570	3,4269

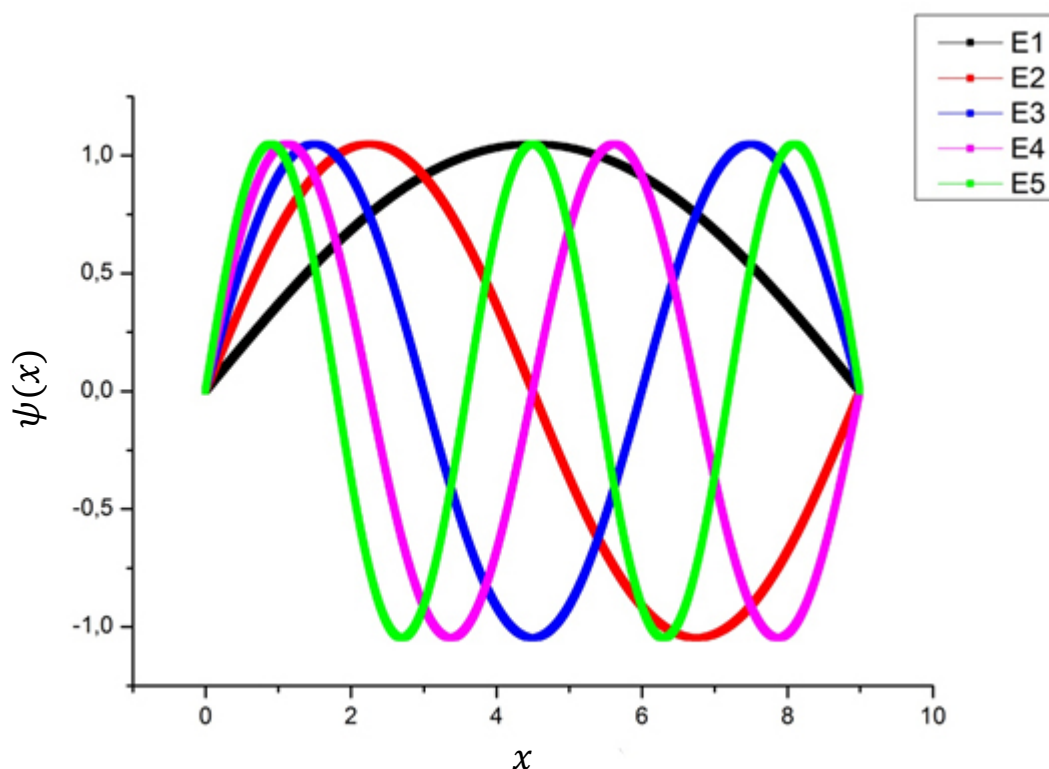
Tablica 4.6 Vrijednosti RK4 i analitičkog rješenja za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a=6$



Graf 4.19 Analitičko rješenje za sve energetske nivoe  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  i širinu jame  $a=6$

Duljina beskonačne potencijalne jame ( $a=9$ )	Rješenje numeričke metode ( $\psi_{RK4}$ )	Analitičko rješenje ( $\psi_{ANAL.}$ )
Energijski nivo $E_1$ [Ha]	0,0632	0,0609
Energijski nivo $E_2$ [Ha]	0,2528	0,2436
Energijski nivo $E_3$ [Ha]	0,5691	0,5483
Energijski nivo $E_4$ [Ha]	1,0117	0,9747
Energijski nivo $E_5$ [Ha]	1,5808	1,523

Tablica 4.7 Vrijednosti RK4 i analitičkog rješenja za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a = 9$



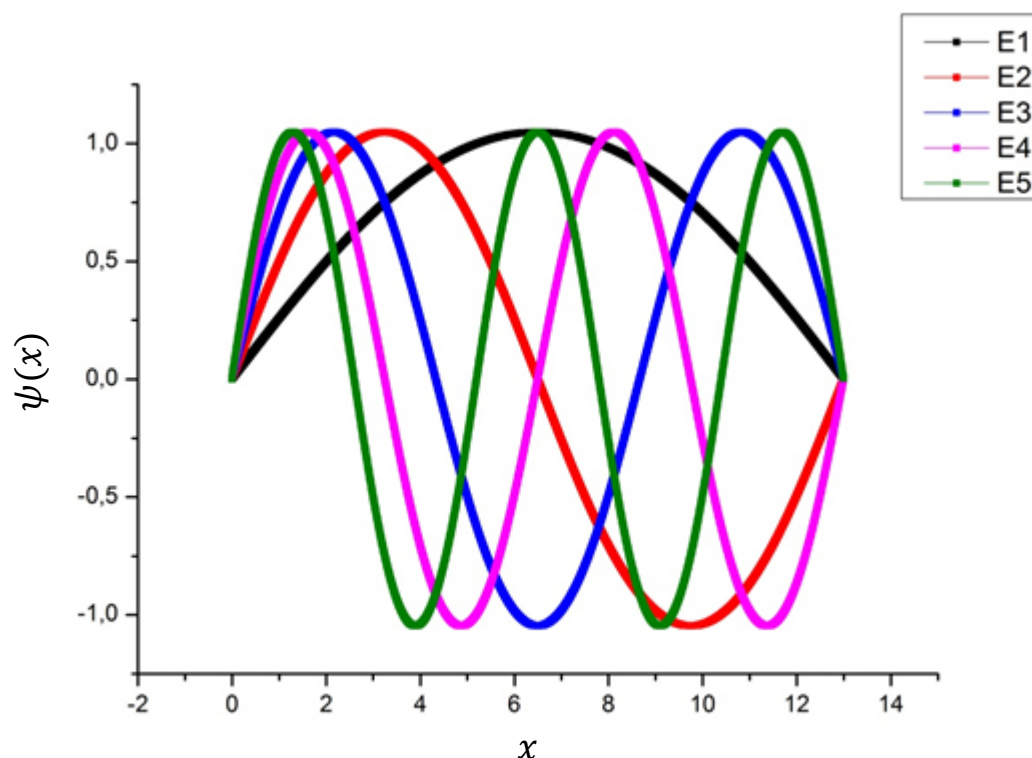
Graf 4.20 Analitičko rješenje za sve energetske nivoe  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  i širinu jame  $a = 9$

Za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a = 9$  smo morali koristiti veću preciznost nego li do sada, te smo simulaciju radili za 40000

iteracija. Kada usporedimo rezultate, iz simulacija se vidi da nam energija za svaki energetski nivo  $E_n$  pada što je širina jame veća.

Duljina beskonačne potencijalne jame ( $a=13$ )	Rješenje numeričke metode ( $\psi_{RK4}$ )	Analitičko rješenje ( $\psi_{ANAL.}$ )
Energijski nivo $E_1$ [Ha]	0,0303	0,0292
Energijski nivo $E_2$ [Ha]	0,1212	0,1168
Energijski nivo $E_3$ [Ha]	0,2727	0,2628
Energijski nivo $E_4$ [Ha]	0,4849	0,4672
Energijski nivo $E_5$ [Ha]	0,7576	0,7300

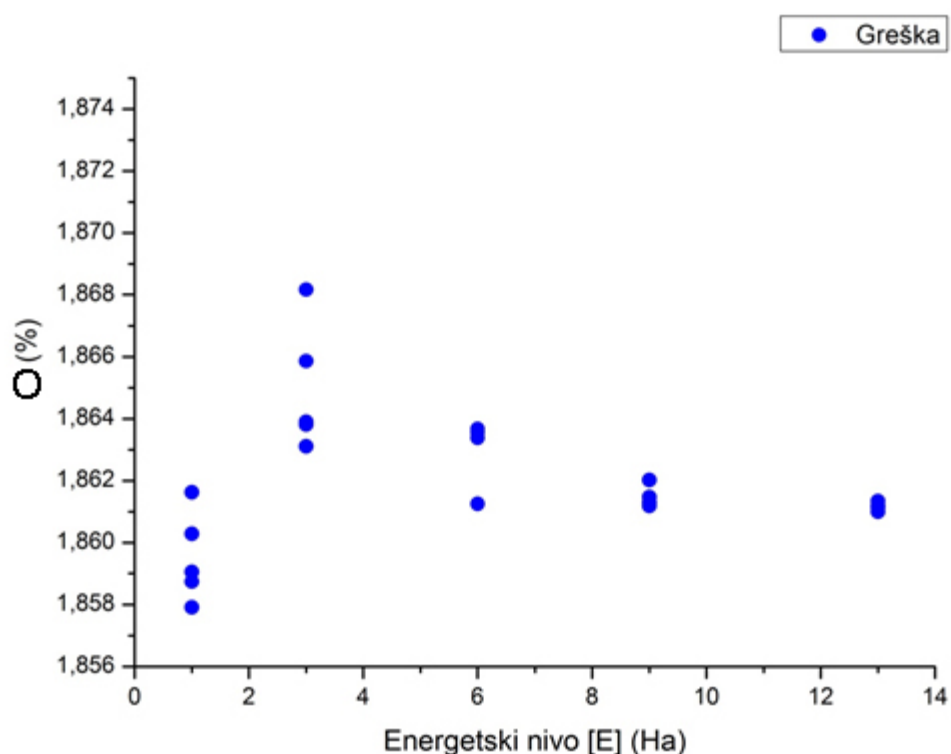
Tablica 4.8 Vrijednosti RK4 i analitičkog rješenja za širinu beskonačno duboke potencijalne jame  $a = 13$



Graf 4.21 Analitičko rješenje za sve energetske nivoe  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  i širinu jame  $a = 13$

Za širinu jame  $a = 13$  već postaje jako teško pogađati energiju koja daje rješenje  $\psi(a) = 0$ . Za ovu širinu beskonačne potencijalne jame, energije su već toliko male da smo morali povećati preciznost simulacije na 70000 iteracija, a rezultati osciliraju toliko da već promjena na četvrtoj decimali energije već ima velik utjecaj.

Vidimo da nam analitička metoda kontinuirano daje manje vrijednosti energije, međutim sve je to u nekim normalnim granicama točnosti te nemamo niti jedno veće odstupanje. Greška  $O$  nam je odstupanje analitičkog rezultata od rezultata numeričke metode za svaku točku. Od vrijednosti odstupanja za svaku točku smo izračunali srednju vrijednost, izrazili je u postocima te dobili da greška varira ovisno o širini jame i energetske nivou međutim odstupanja su zanemariva. Greška nam se kreće u rasponu od 1,85%-1,87% kao što vidimo u grafu ispod.



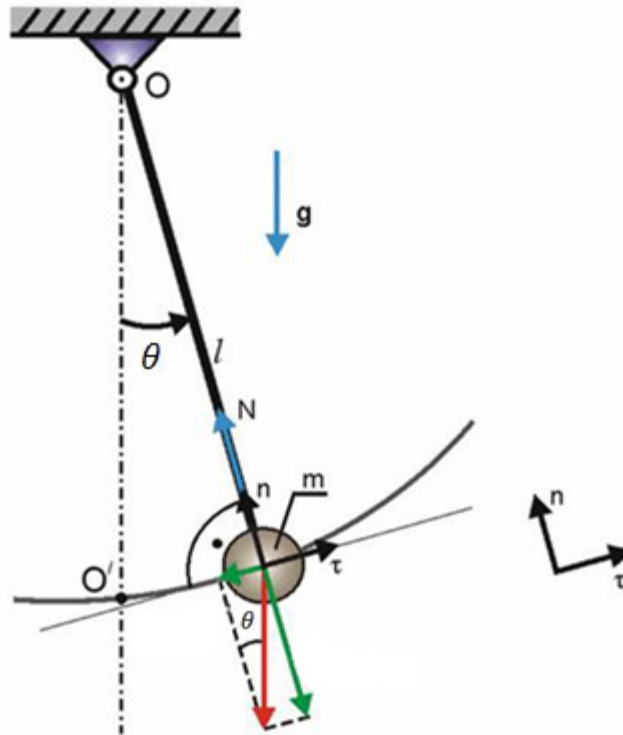
Graf 4.22 Relativna greška u ovisnosti o širini beskonačne potencijalne jame  $a$



## 5. Metodički dio - Njihalo

Njihalo u najširem smislu označava predmet koji se njiše oko osi koja prolazi izvan njegovog težišta ili kako bi to definirali točnije, njihalo je svako čvrsto tijelo koje se njiše oko fiksne točke. Najčešće tijelo ili uteg obješen o niti ili štap koje se može slobodno njihat. Kada se tijelo, obješeno o točku izvan njegova težišta, pomakne izvan ravnotežnog položaja, ono se pod utjecajem sile teže njiše i to stalnom frekvencijom neovisno o masi tijela. Vrijeme njihaja ovisi samo o duljini njihala. To je svojstvo opazio G. Galilei (XVII. st.) pa je njihalo bilo pogodno za mjerenje vremena. Iako postoji više vrsta njihala, imamo dvije glavne vrste njihala, to su *matematičko ili jednostavno i fizičko ili složeno njihalo*.

*Matematičko ili jednostavno njihalo* ne postoji u prirodi, i to je zapravo kuglica ili uteg zanemarivih dimenzija koji se njiše oko ravnotežnog položaja s malim otklonom. Uz male amplitude titranje matematičkog njihala je harmonijsko. Sastoji se od nerastezljive niti duljine  $l$ , koja je pričvršćena na jednom kraju  $O$ , a na drugom je obješena materijalna točka mase  $m$ .



Slika 5.1 Matematičko ili jednostavno njihalo

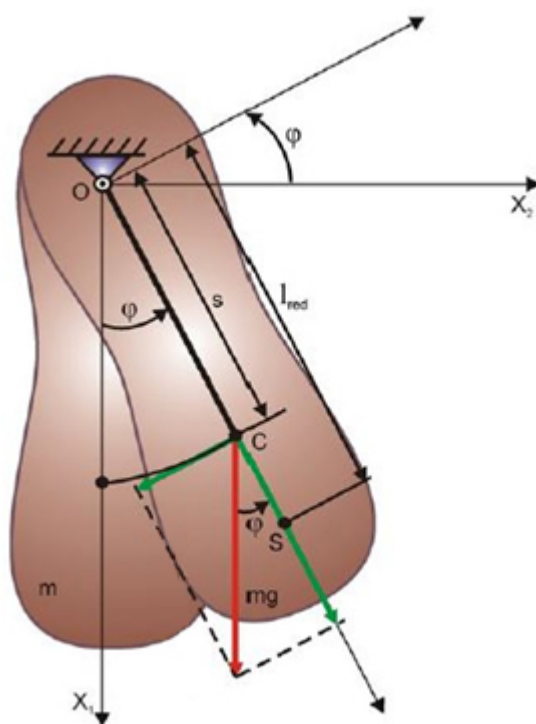
Na slici je prikazano matematičko njihalo i način kako se giba. Pomaknemo ga za kut  $\varphi$ , i pustimo da se njiše u polju sile teže. Prvi ga je upotrijebio Ch. Huygens (1673) kao dio satnog mehanizma.

Period titranja je:

$$T = 2\pi\sqrt{l/g}$$

gdje je  $l$  duljina njihala, a  $g$  akceleracija sile teže. Njihalo s periodom od 1 s zove se sekundno njihalo. Ono služi za određivanje akceleracije sile teže na različitim mjestima Zemlje.

*Fizičko ili složeno njihalo* sastoji se od tijela konačnih dimenzija koje se njiše, a masa mu nije zanemariva. Postoje razne vrste nj. s različitim primjenama. Balističko njihalo rabi se za određivanje brzine metka, otklanja se iz ravnotežnog položaja kada u nj udari metak. Iz otklona njihala može se izračunati brzina metka. Foucault-ovo njihalo njiše se u svim smjerovima, tj. zakreće ravninu njihanja pa služi kao dokaz da se Zemlja vrti oko svoje osi.



*Slika 5.2 Fizičko ili složeno njihalo*

Period titranja fizičkog njihala je:

$$T = 2\pi \sqrt{I/mdg}$$

gdje je  $I$  moment inercije s obzirom na os rotacije,  $m$  masa njihala,  $d$  udaljenost objesišta i težišta.

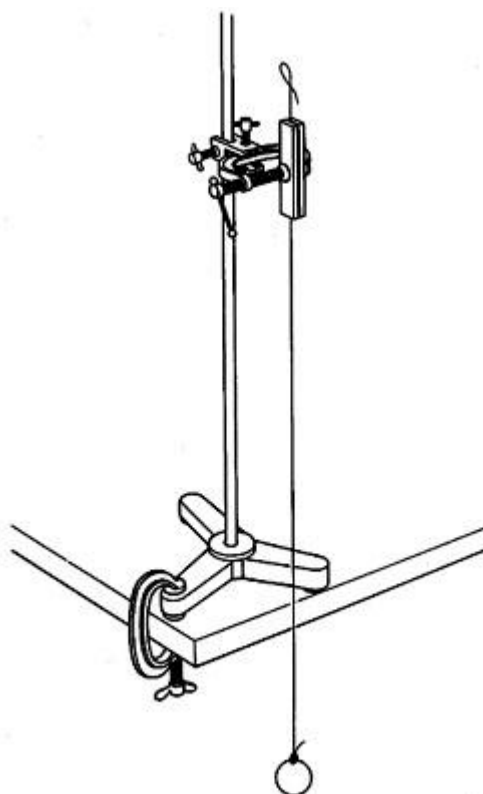
Zanimljivosti:

- Da li znate da je gravitacijsko ubrzanje na polu veće za oko  $0.052 \text{ m/s}^2$  nego na ekvatoru. Razloge nalazimo u djelovanju centrifugalne sile koja se javlja kao posljedica rotacije zemlje, te u spljoštenosti zemlje na polovima.
- Foucault-ovo njihalo je zapravo obično njihalo, slobodno za njihanje u bilo kojem smjeru, ali dovoljno dugačko i masivno da se može njihat satima usprkos trenju. Na polu bi ravan njihanja napravila puni krug za 24 sati, na  $45^\circ$  za oko 34 sati, a na ekvatoru bi mirovala.

### **Pokus 1.**

Dakle, vaš eksperiment će se sastojati u mjerenju ovisnosti perioda gibanja  $T$  o duljini njihala  $l$ . Za izvođenje takvog eksperimenta, potrebna su vam sasvim skromna sredstva: konac, kuglica i štoperica. Većina digitalnih ručnih satova ima zadovoljavajuću štopericu, koja može mjeriti vrijeme s preciznošću od stotinke sekunde.

Lakši dio mjerenja je određivanje duljine njihala. Valja imati na umu da je to udaljenost između točke ovjesa i težišta (centra) kuglice. Znatno više pažnje treba posvetiti mjerenju perioda gibanja. Očito, najveća pogreška nastaje prilikom startanja i zaustavljanja štoperice. Pošto se radi o slučajnoj pogrešci, vjerojatnost pojave pozitivne i negativne pogreške je ista. Da bi se ona kvalitetno ocijenila, potrebno je iz niza ponovljenih mjerenja na neki način definirati srednju kvadratnu pogrešku.



*Slika 5.3 Njihalo*

Pokus se izvodi tako da morate mjeriti vrijeme  $t$  potrebno da njihalo napravi 10 titraja. Za svaku duljinu, mjerenje je potrebno ponoviti  $n = 10$  puta.

Na primjer, za duljinu njihala  $l = 70 \text{ cm}$ , dobiven je slijedeći niz vrijednosti

$$t[s] = \{16.78, 16.71, 16.79, 16.68, 16.71, 16.72, 16.73, 16.87, 16.80, 16.80\}$$

Prava vrijednost veličine  $t$  ostaje nepoznata. Opravdano je pretpostaviti da je ona bliska aritmetičkoj sredini.

Sa brojem mjerenja  $n$  ne treba pretjerivati, za desetostruko povećanje potrošimo proporcionalno više vremena, a nepouzdanost se smanji samo oko 3 puta. Sasvim je dovoljno ponavljati mjerenje 10 puta.

Vjerojatnost da se prava vrijednost veličine  $t$  nalazi unutar intervala  $[16.73, 16.79]$ s iznosi približno 68%. Sada konačno možemo izračunati period njihala

Naravno da se moglo direktno mjeriti period  $T$ . Ako se to učini na isti način kao gore, srednja kvadratna pogreška pojedinačnog mjerenja  $m$  ostaje približno ista, pa bi nepouzdanost perioda  $T$  bila već na stotinkama sekunde. Važno je uočiti da se  $m$  može smanjiti jedino poboljšanjem tehnike mjerenja. Na primjer, mjeriti period njihala pomoću digitalne štoperice koja bilježi tisućiti dio sekunde, a za njeno startanje i zaustavljanje upotrebljavaju posebno dizajniranu fotoćeliju. Tada je  $m$  otprilike za red veličine manji. Takvu preciznost je moguće postići i upotrebom računala i jeftinih senzora.

Već prilikom samog mjerenja ste se uvjerali da s povećanjem duljine njihala raste i period njihanja. No, vjerojatno biste željeli ustanoviti sasvim konkretnu matematičku formulu za funkcionalnu ovisnost  $T(l)$ , za matematičko njihalo se ta formula može i teorijski izvesti.

## 6. Zaključak

Primjenjujući numeričku metodu Runge-Kutta kako za početne, pa tako i za rubne uvijete, uvidjeli smo da numerička metoda veoma uspješno može aproksimirati točno rješenje. U simulacijama koje smo izveli u ovom diplomskom radu, numeričko rješenje nije bitno odstupalo od analitičkog rješenja, a sama greška je bila u intervalu od 0–3%. Konkretno, za Newtonovu jednadžbu kojom smo opisali gibanje matematičkog njihala numerička metoda je davala rješenja koja su zbog harmonijske aproksimacije bila za manje kutove identična analitičkom rješenju, dok za veće kutove kada nam harmonijska aproksimacija više i ne vrijedi, te možemo zaključiti da numerička metoda Runge-Kutta četvrtog reda odlično aproksimira rješenja za slučaj matematičkog njihala. U slučaju Schrödingerove jednadžbe koju smo koristili da bi opisali beskonačno duboku potencijalnu jamu, numerička metoda nam je kontinuirano davala rješenja koja su otprilike jednako odstupala od analitičkog rješenja, u cijelom rasponu rezultata, od najmanje energije do najveće, greška se kretala oko 1,8%. Iz ovoga možemo zaključiti da numerička metoda Runge-Kutta četvrtog reda u slučaju beskonačno duboke potencijalne jame daje bolju stabilnost rješenja nego u slučaju matematičkog njihala. Testirali smo numeričku metodu na jednostavnim problemima i pokazalo se da metoda dobro radi. To znači da je numerička metoda potencijalno dobra i za rješavanje složenijih problema.

## 7. Dodaci

### 7.1 Izvorni kod programa RungeKutta 4 4.0.c

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

#define PI 3.14159

// initial conditions
#define t0 0
#define x0 (5.*PI/180) // initial angle theta_0 * PI/180, where theta_0 is in
degree
#define vx0 0 // initial angular speed

// parameters
#define tn 15.3 // time limit . multiple of dt
#define dt 0.01 // runge-kutta step
#define num_points 200 // number of points to plot. (tn-t0)/dt >= num_points !!!
#define l 0.9867 // pendulum length in meters
#define g 9.81 // free fall acceleration
#define w_sqr (g/l) // omega squared
#define w sqrt(g/l)

void integrate_rk4(double* X_0 , double* Vx_0)
{
    double k1x,k1vx,k2x,k2vx,k3x,k3vx,k4x,k4vx;
    double x_0,vx_0;

    x_0=*X_0;
    vx_0=*Vx_0;

    k1x=dt*vx_0;
    k1vx=dt*(-w_sqr*sin(x_0));
```



```

k2x=dt*(vx_0+k1vx/2.);
k2vx=dt*(-w_sqr*sin(x_0+k1x/2.));

k3x=dt*(vx_0+k2vx/2.);
k3vx=dt*(-w_sqr*sin(x_0+k2x/2.));

k4x=dt*(vx_0+k3vx);
k4vx=dt*(-w_sqr*sin(x_0+k3x));

x_0=x_0+(k1x+2.*k2x+2.*k3x+k4x)/6.0;
vx_0=vx_0+(k1vx+2.*k2vx+2.*k3vx+k4vx)/6.0;

*X_0=x_0;
*Vx_0=vx_0;
}

```

```

int need_to_print(double t, int i)

```

```

{
    int var;
    var=(int)((t-t0)/(tn-t0)*num_points +1e-10 );
    if ( var == i) return 1; else return 0;
}

```

```

// ***** solve for analytic solution  $x'' + g/l * x = 0$ 

```

```

double A(double pos, double v)
{
    return -v/w*(w*t0)+pos*cos(w*t0);
}

```

```

double B(double pos, double v)
{
    return (w*t0)*pos+v/w*cos(w*t0);
}

```

```

double x_exact(double t)
{

```

```

        return A(x0,vx0)*cos(w*t)+B(x0,vx0)*(w*t);
    }
    double vx_exact(double t)
    {
        return -w*A(x0,vx0)*sin(w*t)+B(x0,vx0)*w*cos(w*t);
    }

// end solve

int main()
{

FILE *f;
f = fopen("data.txt","wt");
// FILE FORMAT
// time | theta | angular speed | theta_error | theta linear | angular speed error |
angular speed linear

double x_0,vx_0,t_0;
int i;

x_0=x0;
vx_0=vx0;

t_0=t0;

fprintf(f,"%lf\t%lf\t%lf\t%e\t%lf\t%e\t%lf\n",t_0,x_0,vx_0,x_exact(t_0)-
x_0,x_exact(t_0),vx_exact(t_0)-vx_0,vx_exact(t_0));
t_0=t_0+dt;
i=1;
while(t_0<(tn+dt/20))    // stopping condition
{

    integrate_rk4(&x_0,&vx_0);

    // print in file
    if (need_to_print(t_0,i))

```

```

    {
        fprintf(f, "%lf\t%lf\t%lf\t%e\t%lf\t%e\t%lf\n", t_0, x_0, vx_0, x_exact(t_0)-
x_0, x_exact(t_0), vx_exact(t_0)-vx_0, vx_exact(t_0));

        printf("%lf\t%lf\t%lf\n", t_0, x_0, vx_0);
        i=i+1;
    }
    t_0=t_0+dt;
}

fclose(f);
return 0;
}

```

Dobivene rezultate iz datoteke *data.txt* smo obradili i analizirali sa programom OriginLab OriginPro 8.5 te pomoću njega nacratali grafove ovisnosti.

### 7.1.1 Izvorni kod programa RungeKutta 4 4.1.c

Izvorni kod za Schrödingerovu jednadžbu i rubne uvijete nam je zapravo veoma sličan izvornom kodu za početne uvijete i matematičko njihalo. Pošto se u oba slučaja radi o diferencijalnoj jednadžbi drugog reda, dio programa koji računa numeričku metodu Runge-Kutta četvrtog reda je isti uz možda koju razliku što se tiče imena varijabli. Sve važnije razlike između programa se nalaze u početnom dijelu izvornog koda u kojem se nalaze parametri, početni uvjeti, te metode za izračun glavnih varijabli o kojima ovisi rješenje numeričke metode. Bez obzira na minorne razlike među programima, navest ćemo i izvorni kod za drugi program, možda nekome tko ovo bude čitao dobro dođe.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

// initial conditions
#define t0 0 // time
#define x0 0 // initial condition x
#define y0 sqrt(2*E) // initial condition y

// parameters
#define tn 2 // length of potential well . multiple of dt
#define dt 0.0001 // runge-kutta step
#define num_points 1000 // number of points to plot. (tn-t0)/dt >=
num_points !!!
#define E 0.1 // energy
#define k_sqr (2*E) // k squared
#define k sqrt (2*E)

void integrate_rk4(double* X_0 , double* Y_0)
{
    double k1x,k1y,k2x,k2y,k3x,k3y,k4x,k4y;
    double x_0,y_0;

    x_0=*X_0;
```

```

y_0=*Y_0;

k1x=dt*y_0;
k1y=dt*(-k_sqr*sin(x_0));

k2x=dt*(y_0+k1y/2.);
k2y=dt*(-k_sqr*sin(x_0+k1x/2.));

k3x=dt*(y_0+k2y/2.);
k3y=dt*(-k_sqr*sin(x_0+k2x/2.));

k4x=dt*(y_0+k3y);
k4y=dt*(-k_sqr*sin(x_0+k3x));

x_0=x_0+(k1x+2.*k2x+2.*k3x+k4x)/6.0;
y_0=y_0+(k1y+2.*k2y+2.*k3y+k4y)/6.0;

*X_0=x_0;
*Y_0=y_0;

}

int need_to_print(double t, int i)

{
    int var;
    var=(int)((t-t0)/(tn-t0)*num_points +1e-10 );
    if ( var == i) return 1; else return 0;
}

// ***** solve for analytic solution  $x'' + g/l * x = 0$ 

double A(double pos, double v)
{
    return -v/k*(k*t0)+pos*cos(k*t0);
}

double B(double pos, double v)

```

```

{
    return (k*t0)*pos+v/k*cos(k*t0);
}
double x_exact(double t)
{
    return A(x0,y0)*cos(k*t)+B(x0,y0)*(k*t);
}
double y_exact(double t)
{
    return -k*A(x0,y0)*sin(k*t)+B(x0,y0)*k*cos(k*t);
}

// end solve

int main()
{

FILE *f;
f = fopen("data.txt","kt");
// FILE FORMAT
// time | theta | angular speed | theta_error | theta linear | angular speed error |
angular speed linear

double x_0,y_0,t_0;
int i;

x_0=x0;
y_0=y0;

t_0=t0;

fprintf(f,"%lf\t%lf\t%lf\t%e\t%lf\t%e\t%lf\n",t_0,x_0,y_0,x_exact(t_0)-
x_0,x_exact(t_0),y_exact(t_0)-y_0,y_exact(t_0));
t_0=t_0+dt;
i=1;
while(t_0<(tn+dt/20))    // stopping condition
{

```

```

integrate_rk4(&x_0,&y_0);

// print in file
if (need_to_print(t_0,i))
{
    fprintf(f,"%lf\t%lf\t%lf\t%e\t%lf\t%e\t%lf\n",t_0,x_0,y_0,x_exact(t_0)-
x_0,x_exact(t_0),y_exact(t_0)-y_0,y_exact(t_0));

    printf("%lf\t%lf\t%lf\n",t_0,x_0,y_0);
    i=i+1;
}
t_0=t_0+dt;
}

fclose(f);
return 0;
}

```

## Literatura

- [1] Gerald Teschl (2012) : *Ordinary differential equations and dynamical systems*
- [2] J. Awrejcewicz (2012) : *Classical Mechanics: Statics and Kinematics*
- [3] Herbert Goldstein (1981) : *Classical mechanics (second edition)*
- [4] Mladen Paić (1969) : *Predavanja iz mehanike II*
- [5] G. Kudra (2002) : *Analysis of Bifurcation and Chaos in Three Coupled Physical Pendulums with Impacts*
- [6] J. Awrejcewicz (2012) : *Classical Mechanics: Dynamics, Advances in Mechanics and Mathematics 29*
- [7] D. Halliday, R. Resnick, J. Walker (2005) : *Fundamentals of Physics, 7th Edition, John Wiley & Sons*
- [8] Sean Murray (2011) : *Motion of a Simple Pendulum*
- [9] William F. Trench, Andrew G. Cowles (2013) : *Elementary Differential Equations with Boundary Value Problems*
- [10] Dennis G. Zill, Michael R. Cullen (2009) : *Differential Equations with Boundary-Value Problems, Seventh Edition*
- [11] C. Henry Edwards, David E. Penney (2007) : *Differential Equations and Boundary Value Problems: Computing and Modeling*
- [12] Gauvin Laetitia (2004) : *Application of Computational Methods to Pendulums*



- [13] David L. Powers (2009) : *Boundary Value Problems: and Partial Differential Equations*
- [14] James R. Brannan (2010) : *Differential Equations with Boundary Value Problems: An Introduction to Modern Methods & Applications*
- [15] Jean Mawhin (2010): *Critical Point Theory and Hamiltonian Systems (Applied Mathematical Sciences)*
- [16] A. D. Polyanin, V. F. Zaitsev (2003) : *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations (2nd edition)*
- [17] A. D. Polyanin (2002) : *Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists*
- [18] Myron R. Rosenthal, R. D. Irwin (1966) : *Numerical Methods in Computer Programming*
- [19] C. Xavier (2007) : *C Language And Numerical Methods*
- [20] Rm. Somasundram, Rm. Chandrasekran (2005) : *Numerical Methods With C++ Programming*
- [21] Pallab Ghosh (2006) : *Numerical Methods With Computer Programs In C++*
- [22] Victor Galitski (Jr.), Boris Karnakov, Vladimir Il'ich Kogan, Vladimir Kogan (2013) : *Exploring Quantum Mechanics: A Collection of 700+ Solved Problems*
- [23] Sir Brian Hilton Flowers (2000) : *An Introduction to Numerical Methods in C++*
- [24] Veerarajan & Ramachandran (2005) : *Numerical Methods: With Programs In C*
- [25] Nita H. Shah (2008) : *Numerical Methods with C++ Programming*
- [26] V. Rajaraman (1993): *Computer Oriented Numerical Methods*

- [27] Pradip Narain, Tajender Singh Saluja (2008) : *Numerical Analysis and Computer Programming*
- [28] C. Woodford, Chris Phillips (1997) : *Numerical Methods with Worked Examples*
- [29] Nouredine Zettili (2009) : *Quantum Mechanics: Concepts and Applications, 2nd Edition*
- [30] P. Thangaraj (2008) : *Computer-Oriented Numerical Methods*
- [31] John C. Butcher (2003) : *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*
- [32] Süli, Endre; Mayers, David (2003) : *An Introduction to Numerical Analysis*
- [33] Wikipedia: [en.wikipedia.org](http://en.wikipedia.org)