Robni problem lastnih vrednosti

13. 4. 2022

8. naloga: Robni problem lastnih vrednosti

Pri robnem problemu lastnih vrednosti poznamo diferencialno enačbo in nekaj robnih pogojev (običajno vsaj toliko, kolikor je red enačbe) Za rešitev problema moramo v splošnem v enem zamahu določiti tako (lastne) funkcije, ki ustrezajo danim robnim pogojem, kot (lastne) vrednosti, ki skupaj zadoščajo diferencialni enačbi. Reševanje robnih problemov je zato lahko bistveno bolj zapleteno kot integracija začetnih problemov.

Numerično bomo reševali stacionarno Schrödingerjevo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

za neskončno potencialno jamo ($V(0 < x < a) = 0$ na intervalu $[0, a]$ (ker je lažje) ter (dodatno) za končno potencialno jamo na intervalu $[-a/2, a/2]$ ($V(|x| \geq a/2) = V_0$), za kateri poznamo analitične rešitve; glej Strnad, *Fizika II*. Dva značilna pristopa, diferenčna metoda in strelska metoda, nas bosta pripravila na resnejše probleme, za katere analitičnih rešitev ne poznamo.

Pri *diferenčni metodi* razdelimo interval $[0, a]$ na N točk ($x_i = 0 + a/N \cdot i$) ali interval $[-a/2, a/2]$ na N točk ($x_i = -a/2 + a/N \cdot i$) in prepišemo drugi krajevni odvod v drugo diferenco, tako da ima brezdimenzijska enačba obliko

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} + E\psi_i = 0$$

oziroma

$$\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1} = \lambda\psi_i\ ,$$

kjer je $\lambda = -Eh^2 = k^2h^2$ (na faktor $\frac{\hbar^2}{2m}$ lahko tudi pozabimo). Diskretizirati je treba tudi robna pogoja pri $x = 0$ in $x = a$ (ali $x = -a/2$ in $x = a/2$), ki sta v splošnem (in tudi pri končni jami) mešanega tipa,

$$\begin{aligned} c_1\psi_0 + c_2\frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2h} &= 0\ , \\ d_1\psi_N + d_2\frac{\psi_{N+1} - \psi_{N-1}}{2h} &= 0\ , \end{aligned}$$

medtem ko sta pri neskončni jami preprostejša, $\psi_0 = \psi_N = 0$. V primerih potencialnih jam tako dobimo tridiagonalni sistem N oziroma $N - 1$ linearnih enačb

$$A\vec{\psi} = \lambda\vec{\psi}$$

za lastne vektorje $\vec{\psi}$ in lastne vrednosti λ, ki ga rešujemo z diagonalizacijo.

Pri *strelski metodi* začnemo s "kosinusnim" začetnim pogojem v izhodišču $\psi(0) = 1$, $\psi'(0) = 0$ ali "sinusnim" pogojem $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$, nato pa z nekim izbranim E (torej λ) diferencialno enačbo s poljubno integracijsko shemo (npr. RK4) integriramo do roba $x = a/2$ in tam preverimo, ali je izpolnjen drugi robni pogoj, $\psi(a/2) = 0$. Vrednost E (λ) spreminjamo tako dolgo, dokler robni pogoj ni izpolnjen do zahtevane natančnosti, in tako dobimo sode in lihe rešitve enačbe skupaj z ustreznimi lastnimi vrednostmi energije.

Naloga: Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti za neskončno potencialno jamo z diferenčno metodo in metodo streljanja.

Dodatna naloga: Problem končne jame je s strelsko metodo le trivialna posplošitev problema neskončne jame: spremeni se le robni pogoj pri $x = a/2$, ki ima zaradi zahteve po zveznosti in zvezni odvedljivosti valovne funkcije zdaj obliko $c_1\psi(a/2) + c_2\psi'(a/2) = 0$. Kaj ima pri diferenčni metodi večjo vlogo pri napaki: končna natančnost diference, s katero aproksimiramo drugi odvod, ali zrnatost intervala (končna razsežnost matrike, ki jo diagonaliziramo)?

Dodatna naloga 2: Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij ψ in lastnih vrednosti $E = k^4$ diferencialne enačbe

$$\frac{\mathrm{d}^4\psi}{\mathrm{d}x^4} - E\psi = 0$$

(pozor, minus) na intervalu $[-a/2, a/2]$ z robnimi pogoji

$$\psi(\pm a/2) = \psi''(\pm a/2) = 0$$

z diferenčno metodo oziroma diagonalizacijo. (Strelska metoda pri robnih problemih četrtega reda ni najbolj primerna.) Namesto četrtega odvoda uporabi izraz za četrto diferenco, tako da ima i-ta diferenčna enačba obliko

$$\psi_{i-2} - 4\psi_{i-1} + 6\psi_i - 4\psi_{i+1} + \psi_{i+2} = \underbrace{h^4k^4}_{\lambda}\psi_i\,.$$

Ko diskretiziraš še robne pogoje, podobno kot pri enačbi drugega reda rešuješ petdiagonalni sistem linearnih enačb.

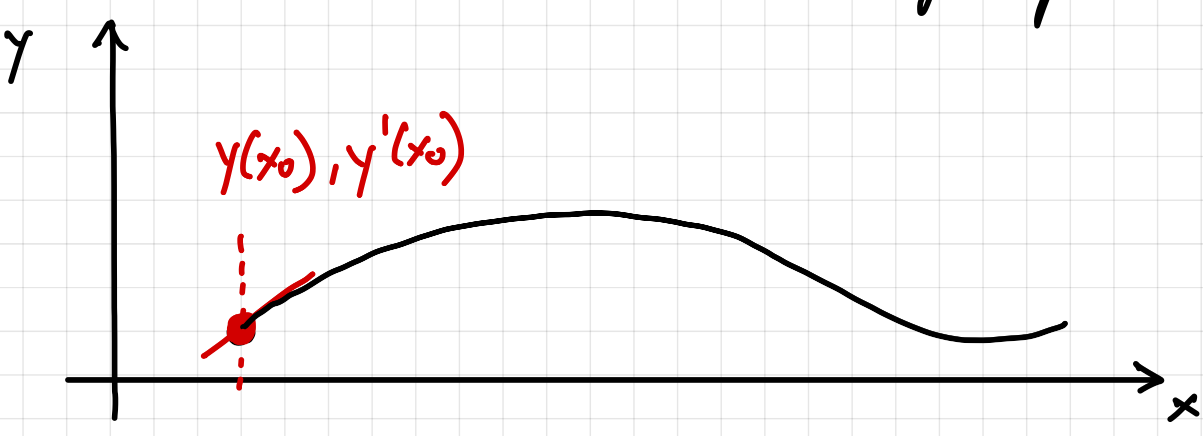
Robni problemi za NDE

(ang. Boundary value problem for ODE)

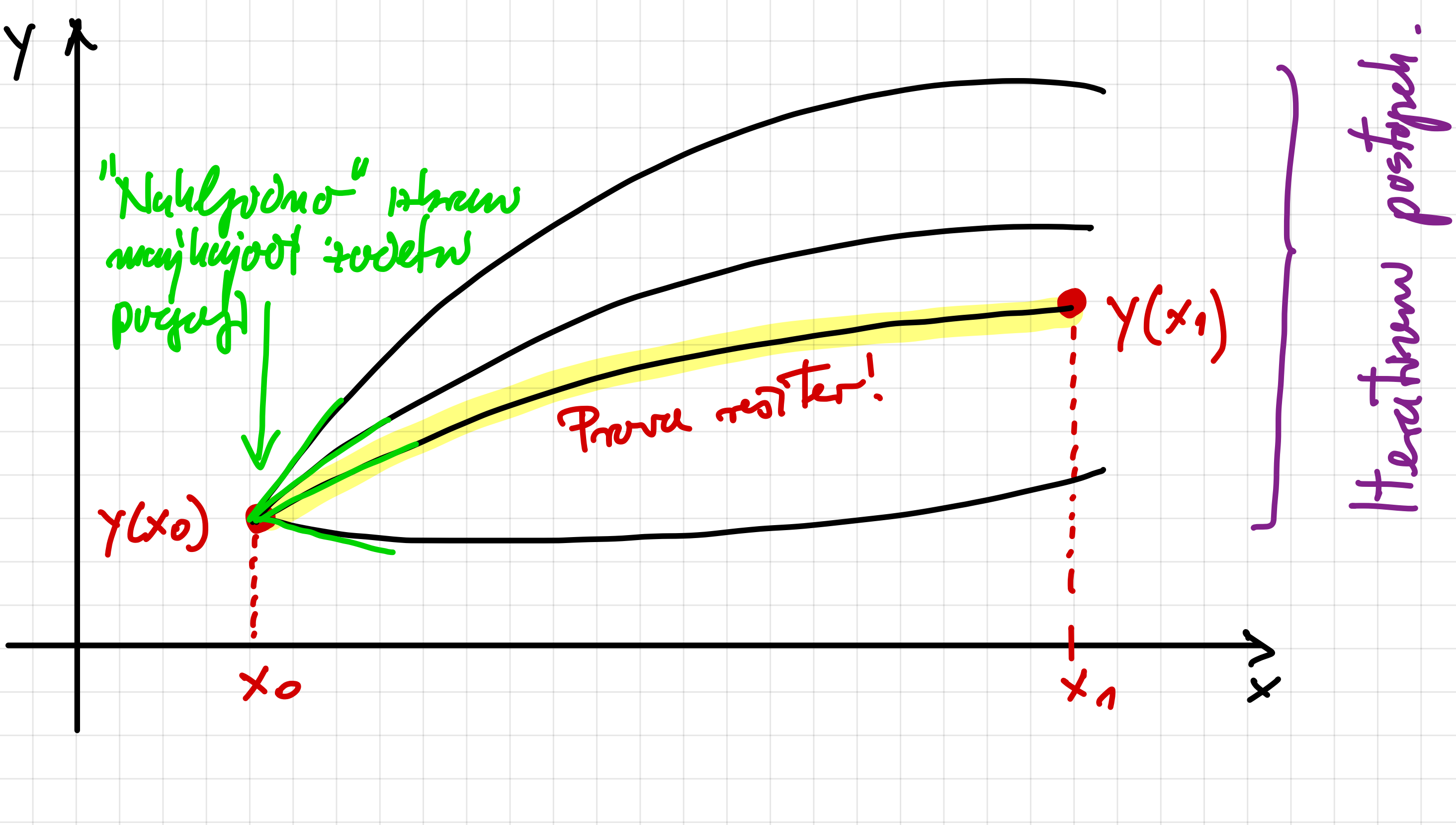
O robnih problemih za NDE višjih redov (≥ 2) govorimo tedaj, kadar dodatni pogoji, ki jih potrebujemo, da iz družine rešitev NDE izberemo točno določeno, niso vsi poznani v isti točki pri isti vrednosti neodvisne spremenljivke.

Običajno imamo opravka s problemi, pri katerih moramo zadostiti robnim pogojem v dveh točkah, v začetni in končni točki integracije.

Pri IVP smo vse dodatne pogoje - začetne pogoje poznali v začetni točki in z njimi smo natančno določili potek razvoja rešitve enačbe v odvisnosti od neodvisne spremenljivke, ki smo ga določili z numerično integracijo.



Pri BVP pa robni pogoj v prvi točki pa rešitve enačbe ne določa v celoti. Z nepopolnim začetnim pogojem (npr. manjka začetni odvod) lahko generiramo različne rešitve, ki izpolnjujejo 1. robni pogoj, a "naključno" izbrana rešitev iz te družine najverjetneje ne bo izpolnjevala tudi 2. robnega pogoja! ⇒ To nam da misliti, da bo v reševanje BVP vgrajen nekakšen iterativni postopek, s katerim bomo izmed vseh rešitev našli pravo, ki zadošča obema robnima pogojema. Zaradi tega so BVP bolj zahtevni za reševanje kot IVP.



Osredotočimo se na reševanje BVP II. reda

- Takšne probleme v fiziki najpogosteje srečamo

Rešujemo:

$$y''(x) = f(x, y, y')$$

Na intervalu $x \in [a, b]$.

Robne pogoje imamo lahko podane v:

- **Dirichletovi obliki:** $y(a) = \alpha$ in $y(b) = \beta$
- **Neumannovi obliki:** $y'(a) = \alpha$ in $y'(b) = \beta$
- **splošni kombinirani obliki:**

$$A_1 y(a) + A_2 y'(a) = \alpha, \quad B_1 y(b) + B_2 y'(b) = \beta$$

Vnaprej znani parametri

- **periodični robni pogoji (pogosto v fiziki)**

$$y(a) = y(b) \quad \text{in} \quad y'(a) = y'(b)$$

Obstajata dva razreda numeričnih metod za reševanje BVP:

- Strelske metode
- Relaksacijske metode (diferenčne metode)

Strelska metoda: (glej NRC, poglavje 17.1)

BVP prevedemo na IVP + iteracije: Manjkajoči začetni pogoj "poljubno" izberemo in rešujemo IVP do druge robne točke. Pogledamo, kje smo pristali. Nato spreminjamo neznani začetni pogoj tako dolgo, da zadenemo drugi robni pogoj.

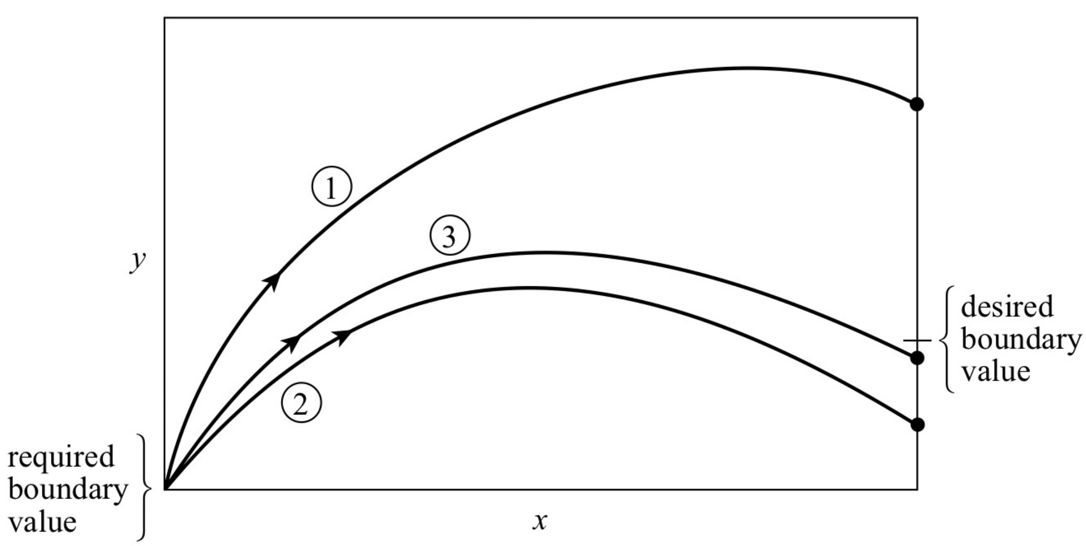
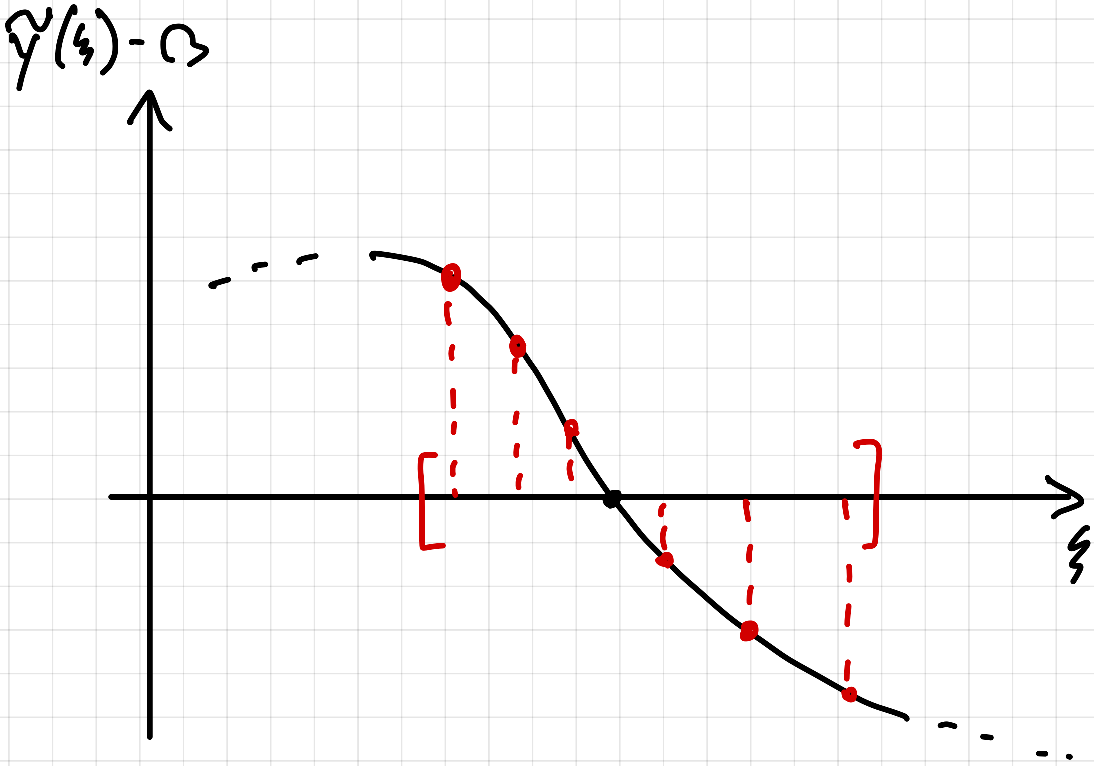


Figure 17.0.1. Shooting method (schematic). Trial integrations that satisfy the boundary condition at one endpoint are "launched." The discrepancies from the desired boundary condition at the other endpoint are used to adjust the starting conditions, until boundary conditions at both endpoints are ultimately satisfied.

Izpolnitev drugega robnega pogoja preverjamo tako, da končno vrednost dobljeno z integriranjem začetnega problema primerjamo s pravim robnim pogojem.

Npr: Če imamo Dirichletove robne pogoje, potem primerjamo $\tilde{y}(b; y'(a)=\xi)$, ki ga dobimo z integriranjem IVP s pogoji $y(a)=\alpha$ in $y'(a)=\xi$ s pravim robnim pogojem $y(b)=\beta$. Iščemo ničlo funkcije:

$$g(\xi) = \tilde{y}(b; y'(a)=\xi) - \beta$$



Pri iskanju ničle funkcije $f(x)$ si pomagamo z numeričnimi metodami za iskanje ničel funkcij. npr. Bisekcija:

- Bisekcija je sicer počasna metoda, a zanesljivo deluje!
- Če uporabimo bisekcijo, potem moramo paziti, da na začetku enkrat ustrelimo nad $y(b)$, drugo pa pod, in ustrezno uokvirimo ničlo.

Strelska metoda za linearni robni problem II. reda z Dirichletovimi robnimi pogoji:

Imamo linearne enačbe II. reda oblike:

$$y'' = p(x)\,y' + q(x)\,y + r(x),$$

kjer so $p(x)$, $q(x)$ in $r(x)$ funkcije neodvisne spremenljivke. Rešiti želimo robni problem z robnima pogojema:

$$y(a) = \alpha \quad \text{in} \quad y(b) = \beta$$

Izberemo različni vrednosti ξ_1 in ξ_2 in rešimo dva začetna problema s pogojema:

$$y(a) = \alpha \quad \text{in} \quad y'(a) = \xi_1 \Rightarrow y_1(b)$$
$$y(a) = \alpha \quad \text{in} \quad y'(a) = \xi_2 \Rightarrow y_2(b)$$

Rešitvi na mestu b.

Najraje ξ_1 in ξ_2 izberemo tako, da enkrat ustrelimo nad $y(b)$ enkrat pa pod $y(b)$.

Ker je enačba linearna za poljuben λ velja, da je tudi $y = \lambda y_1 + (1-\lambda) y_2$ rešitev, če sta rešitvi y_1 in y_2. Parameter λ določimo tako, da zahtevamo $y(b) = \beta$:

$$y(b) = \lambda y_1(b) + (1-\lambda) y_2(b) = \beta$$

$$\lambda = \frac{\beta - y_2(b)}{y_1(b) - y_2(b)}$$

Rešitev, ki zadošča obema robnima pogojema je potem:

$$y(x) = \lambda y_1 + (1-\lambda) y_2$$

Bolj zapleteni robni pogoji:

Recimo, da imamo Dirichletov pogoj na eni in Neumannov pogoj na drugi strani.

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x)$$

$$y(a) = \alpha \quad \text{in} \quad y'(b) = \beta. \leftarrow \text{odvod.}$$

V tem primeru postopamo bolj splošno. Kot smo se lotili reševanja IVP prepišemo enačbo v sistem linearnih enačb I. reda z uporabo vmesne spremenljivke v:

$$y' = v$$

$$v' = p(x)v + q(x)y + r(x)$$

$$y(a) = \alpha \quad \text{in} \quad v(b) = \beta$$

Vpeljemo vektor $\vec{Y} = [y, v]^T$. Sistem dobi oblika:

$$\vec{Y}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ q(x) & p(x) \end{bmatrix} \vec{Y} + \begin{bmatrix} 0 \\ r(x) \end{bmatrix}$$

Pri reševanju postopamo ekvivalentno kot prej:
Izberemo dva začetna vektorja za usklajevanje:

$$\vec{y}_1(a) = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{IVP}} \vec{y}_1(b) = \begin{bmatrix} y_1(b) \\ v_1(b) \end{bmatrix}$$

$$\vec{y}_2(a) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{IVP}} \vec{y}_2(b) = \begin{bmatrix} y_2(b) \\ v_2(b) \end{bmatrix}$$

Tudi tu velja, da je za poljuben λ rešitev sistema tudi:

$$\vec{y}(x) = \lambda \vec{y}_1(x) + (1-\lambda)\vec{y}_2(x)$$

Parameter λ določimo tako, da zahtevamo, da mora pri $x=b$ veljati:

$$v(b) = \lambda v_1(b) + (1-\lambda) v_2(b) = \beta$$

$$\lambda\big(v_1(b) - v_2(b)\big) = \beta - v_2(b)$$

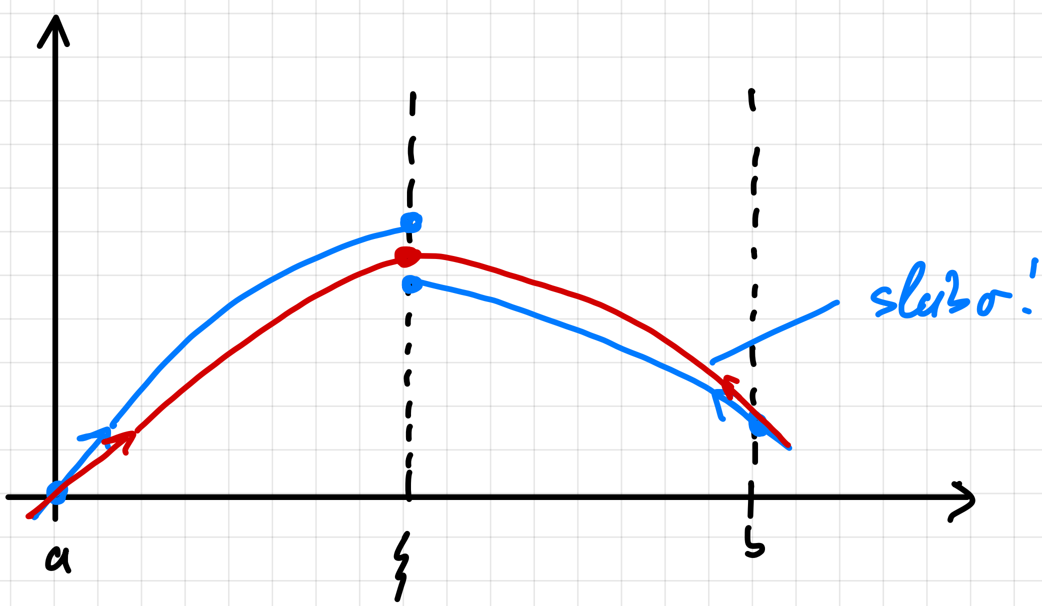
$$\lambda = \frac{\beta - v_2(b)}{v_1(b) - v_2(b)}$$

Končno rešitev dobimo tako, da λ vstavimo v linearno kombinacijo rešitev.

To je bolj splošen postopek, ki ga lahko na enak način uporabimo tudi za Dirichletove robne pogoje.

Komentar:

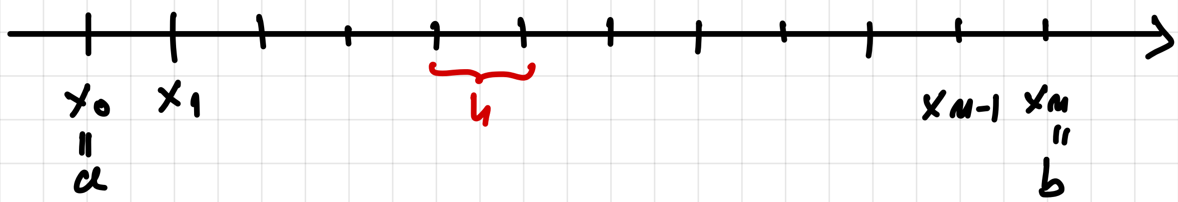
- Mi smo streljali iz začetne proti končni točki
- Lahko streljamo tudi iz končne proti začetni točki, če je glede na robne pogoje to bolj ugodno
- Lahko streljamo tudi k skupni vmesni točki ξ na intervalu $[a,b]$, kjer moramo zagotoviti, da je rešitev zvezna in zvezno odvedljiva.



Relaksacijske metode:

Pri relaksacijskih metodah postopamo tako, da diferencialne enačbe nadomestimo z sistemom diferenčnih enačb, ki ga rešujemo na mreži točk, ki pokriva celoten integracijski interval $x \in [a, b]$:

- Interval $[a, b]$ razdelimo na $n+1$ ekvidistantnih točk: $x_0 = a, x_1, x_2, \dots, x_n = b$



Pri tem velja: $x_i = x_0 + ih$; $h = \frac{b-a}{n}$

- Odvode aproksimiramo s simetričnimi končnimi diferencami:

Uporabimo simetrične diference, ker višjega reda!

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$y''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Diferencialna enačba II. reda z Dirichletovimi robnimi pogoji:

$$y'' = f(x, y, y'), \quad y(a) = \alpha \text{ in } y(b) = \beta$$

- Diferencialno enačbo II. reda zapišemo kot:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) \Big/ \cdot h^2$$

$$y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} = h^2 f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right); \; i = 1, 2, \dots, n-1$$

- Manjkajoči točki y_0 in y_n določata robna pogoja:

$$y_0 = \alpha \quad \text{in} \quad y_n = \beta.$$

- Sistem enačb prepišemo v matrično obliko:

$$(*) \quad \underbrace{\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & & \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & & & 1 & -2 & 1 \\ \vdots & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{bmatrix}}_{\vec{y}} = \underbrace{\begin{bmatrix} h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2 - \overset{y_0}{\alpha}}{2h}\right) - \alpha \\ h^2 f\left(x_2, y_2, \frac{y_3 - y_1}{2h}\right) \\ \vdots \\ h^2 f\left(x_{n-1}, y_{n-1}, \frac{\overset{y_n}{\beta} - y_{n-2}}{2h}\right) - \beta \end{bmatrix}}_{\vec{F}(\vec{y})}$$

Dobili smo sistem:

$$\boxed{A\vec{y} = \underbrace{\vec{F}(\vec{y})}}$$

To je vektor rešitev, ki vsebuje vse glavne točke.

To je vektor, ki je odvisen od vektorja $\vec{y}$

Sistem rešujemo iterativno:

$$A\vec{y}^{(k+1)} = \vec{F}(\vec{y}^{(k)}) \; ; \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

- V vsakem koraku rešujemo linearni sistem enačb z izbranim numeričnim postopkom, npr. LU, QR, SVD razcep, glej predavanje 5.

- Iteracije ponavljamo tolikokrat, dokler
$$\| \vec{y}^{(k+1)} - y^{(k)} \| < \varepsilon .$$

- Poskusna rešitev $\vec{y}^{(0)}$ je vektor vrednosti odvisne spremenljivke, za katere mi mislimo, da izpolni robne pogoje, sploh pa ne, da izpolni diferencialno enačbo. To je neki smiseln začetni približek!

Algoritem: (z uporabo SVD)

1. Generiramo začetni približek $\vec{Y} = \vec{Y}^{(0)}$
2. Naredimo razcep: $A = UWV^T$
3. Izračunamo $\vec{F}(\vec{Y})$
4. Izračunamo naslednjo iteracijo:

$$\underbrace{\vec{Y}' = VW^{-1}U^T\vec{F}(\vec{Y})}$$

Tukaj lahko uporabimo kakšno vgrajeno metodo za reševanje.

5. Preverimo: $\|\vec{Y}' - \vec{Y}\| < \varepsilon$:
   - Če ni, potem $\vec{Y} = \vec{Y}'$ in nazaj na 3.
   - Konec.

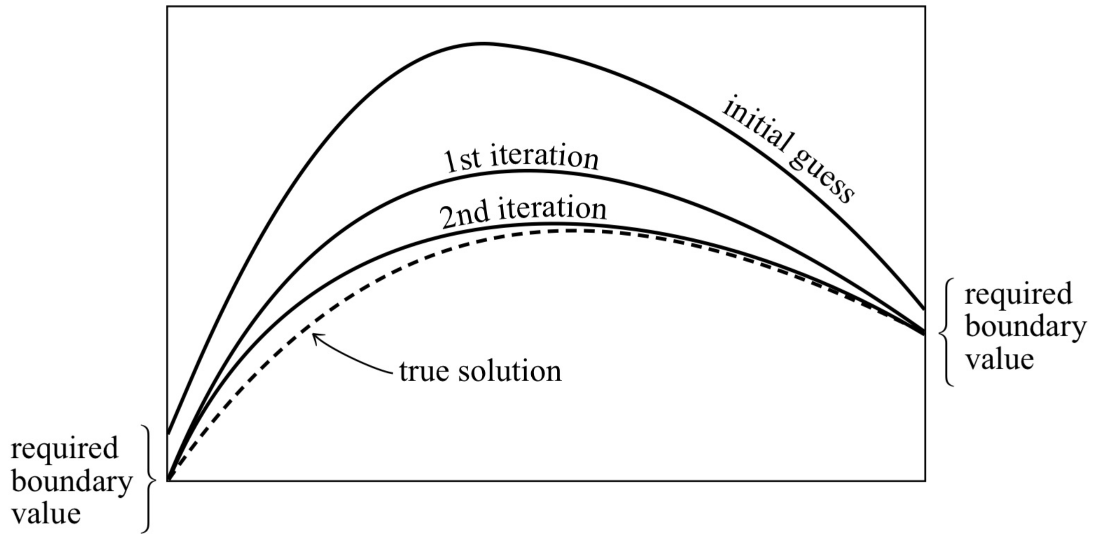


Figure 17.0.2. Relaxation method (schematic). An initial solution is guessed that approximately satisfies the differential equation and boundary conditions. An iterative process adjusts the function to bring it into close agreement with the true solution.

V vsakem koraku iteracije smo bližje rešitvi, zato ta postopek imenujemo relaksacijska metoda.

Kaj pa če imamo na eni strani mešan robni pogoj?

$$A_1 \underbrace{y(a)}_{y_0} + A_2 \underbrace{y'(a)}_{y'_0 \overset{!}{=} \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}} = \alpha$$

Če bi $y'(a)$ aproksimirali s simetrično diferenco, bi prišlo v težave saj imamo y_{-1}, ta je zunaj našega intervala. Rešimo se tako, da uporabimo nesimetrično diferenco istega reda:

$$y'_i = \frac{-y_{i+2} + 4y_{i+1} - 3y_i}{2h} + O(h^2)$$

$i = 0$

$$y'_0 = \frac{-y_2 + 4y_1 - 3y_0}{2h}$$

Upoštevamo v začetnem pogoju.

Dobimo:

$$A_1 y_0 + A_2 \frac{-y_2 + 4y_1 - 3y_0}{2h} = \alpha \quad / \cdot 2h$$

$$2hA_1 y_0 + A_2(-y_2 + 4y_1 - 3y_0) = 2h\alpha$$

Izrazimo neznanko y_0:

$$y_0 = \frac{2h\alpha}{(2hA_1+3A_2)} + \frac{A_2}{2hA_1+3A_2}\,y_2 - \frac{4A_2}{2hA_1+3A_2}\,y_1$$

Ta izraz spremeni 1. enačbo sistema (*):

$$\underbrace{\underset{1}{y_2} - \underset{-2}{2y_1}}_{A_1} + y_0 = \underbrace{h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2-y_0}{2h}\right) - \alpha}_{V_1}$$

Prva vrstica matrike A se spremeni kot:

Diagonalni člen: $\quad -2 \longrightarrow -2 - \dfrac{4A}{2hA_1+3A_2}$

Izvendiagonalni člen: $\quad 1 \longrightarrow 1 + \dfrac{A_2}{2hA_1+3A_2}$

Prvi element vektorja V:

$$h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2-\alpha}{2h}\right) - \alpha \longrightarrow h^2 f\left(x_1, y_1, \frac{y_2-y_0}{2h}\right) - \frac{2h\alpha}{2hA_1+3A_2}$$

V vsakem koraku iteracije smo bližje rešitvi, zato ta postopek imenujemo relaksacijska metoda.

Relaksacijska metoda za linearni problem II. reda z Dirichletovimi robnimi pogoji:

Rešiti želimo: $y'' = p(x)\,y' + q(x)\,y + r(x)$

$$\text{z} \quad y(a) = \alpha \quad \text{in} \quad y(b) = \beta$$

Zapišemo diferenčne enačbe:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = \underbrace{p(x_i)}_{p_i}\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \underbrace{q(x_i)}_{q_i} y_i + \underbrace{r(x_i)}_{r_i} \Big/ \cdot h^2$$

$$y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} = p_i \frac{h}{2}(y_{i+1} - y_i) + q_i h^2 y_i + r_i h^2$$

$$y_{i+1}\left(1 - p_i \frac{h}{2}\right) + y_i\left(-2 - h^2 q_i\right) + y_{i-1}\left(1 + \frac{h}{2} p_i\right) = h^2 r_i \Big/ \cdot \frac{1}{2}$$

$$\underbrace{\frac{1}{2}\left(1 - p_i \frac{h}{2}\right)}_{c_i} y_{i+1} + \underbrace{\left(-1 - \frac{h^2}{2} q_i\right)}_{b_i} y_i + \underbrace{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{h}{2} p_i\right)}_{a_i} y_{i-1} = \underbrace{\frac{h^2}{2} r_i}_{d_i}$$

xx

Upoštevamo še robne pogoje: $y_0=\alpha$, $y_n=\beta$

Sistem lahko zapišemo v matrični obliki:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \cdots & & \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & \cdots & \\ \vdots & & & \ddots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & & & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\overset{y_0=\alpha}{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{bmatrix}}}_{\substack{y_n=\beta \\ \vec{y}}} \underbrace{\begin{bmatrix} d_1 - a_1\alpha \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} - c_{n-1}\beta \end{bmatrix}}_{\vec{b}}$$

Takole v sistem enačb pridejo robna pogoja.

Dobili smo linearni sistem enačb:

$$\boxed{A\vec{y}=\vec{b}}$$

Sistem rešimo z metodami za reševanje sistemov linearnih enačb, npr. LU razcep.
Ta sistem rešimo v eni iteraciji! Postopka ni treba ponavljati!

Mešani robni pogoj za linearni problem:

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x)$$

$$A_1 y(a) + A_2 y'(a) = \alpha \quad \text{ali}$$

$$y(b) = \beta$$

Postopamo na enak način kot pri splošnem primeru in y_0 zapišemo kot:

$$y_0 = \frac{24\alpha}{(24A_1 + 3A_2)} + \frac{A_2}{24A_1 + 3A_2} y_2 - \frac{4A_2}{24A_1 + 3A_2} y_1$$

To bo vplivalo na 1. vrstico sistema (**):

$$b_1 \longrightarrow b_1 - \frac{4A_2 a_1}{24A_1 + 3A_2}$$

$$c_1 \longrightarrow c_1 + \frac{A_2 a_1}{24A_1 + 3A_2}$$

$$d_1 - a_1\alpha \longrightarrow d_1 - \frac{24\alpha a_1}{24A_1 + 3A_2}$$

Komentar:

- Relaksacijska metoda je boljša, kadar imamo zapletene robne pogoje.

- Ne obnese se pri funkcijah, ki hitro oscilirajo, saj za opis takšnih funkcij potrebujemo zelo fino diskretizacijo. → Tedaj raje streljamo in uporabimo adaptivne metode za integracijo.

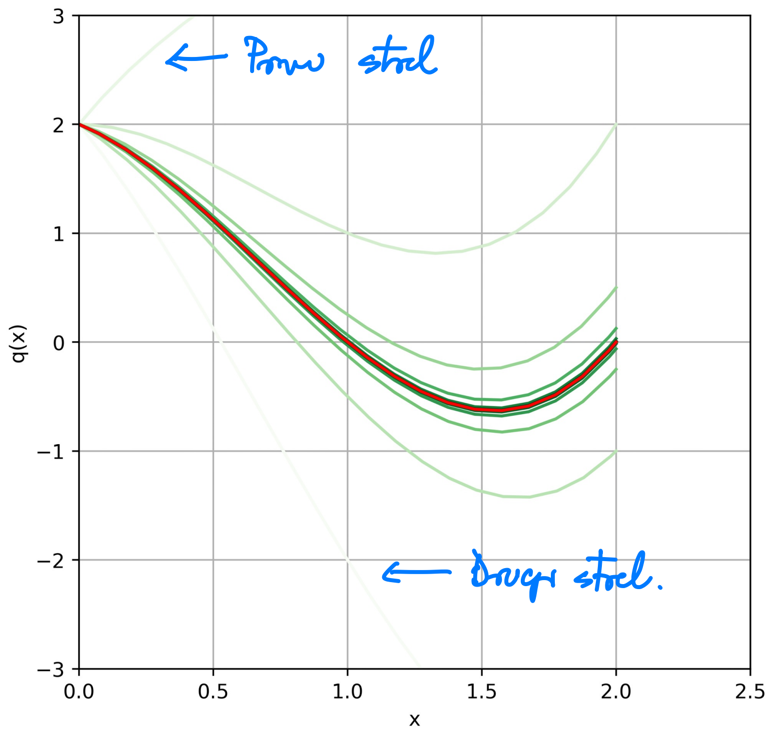
- Splošno pravilo (MRC):
  "Shoot first, then relax!"

Zgled #1: Reši diferencialno enačbo $y''(x) = 6x - 4$, ki zadošča robnima pogojema $y(0) = 2$ in $y(1) = 0$.

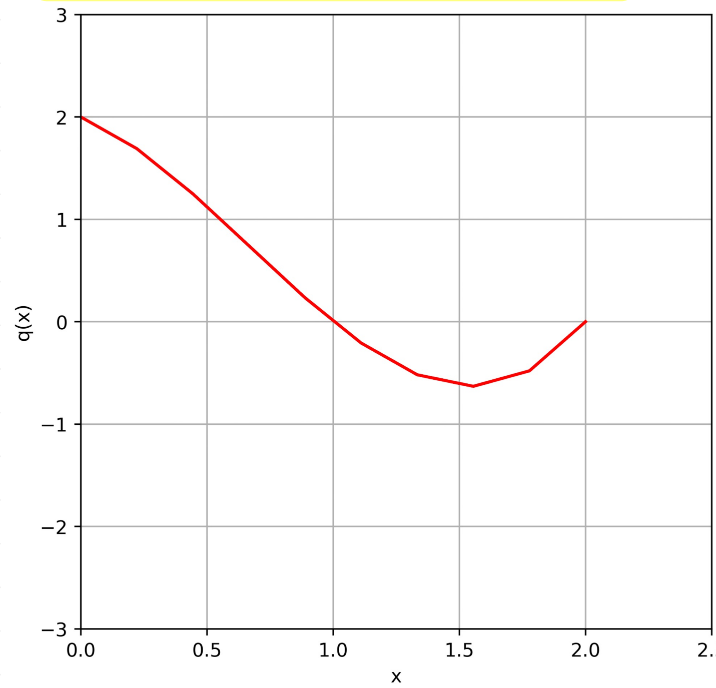
To je lin. problem $y'' = r(x)$.

Analitična rešitev: $y(x) = x^3 - 2x^2 - x + 2$

Strelska metoda



Diferenčna metoda



Zgled #2: Reši diferencialno enačbo:

$$(1+x^2)\,y'' + 2x\,y' - x^2 y = 1$$

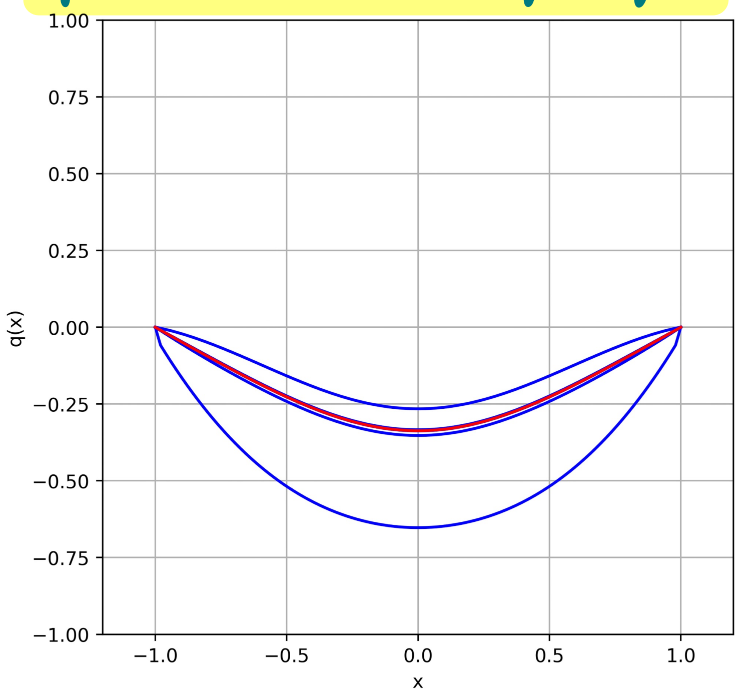
z robnimi pogoji $y(-1) = y(1) = 0$.

Enačbo prepišemo v obliko:

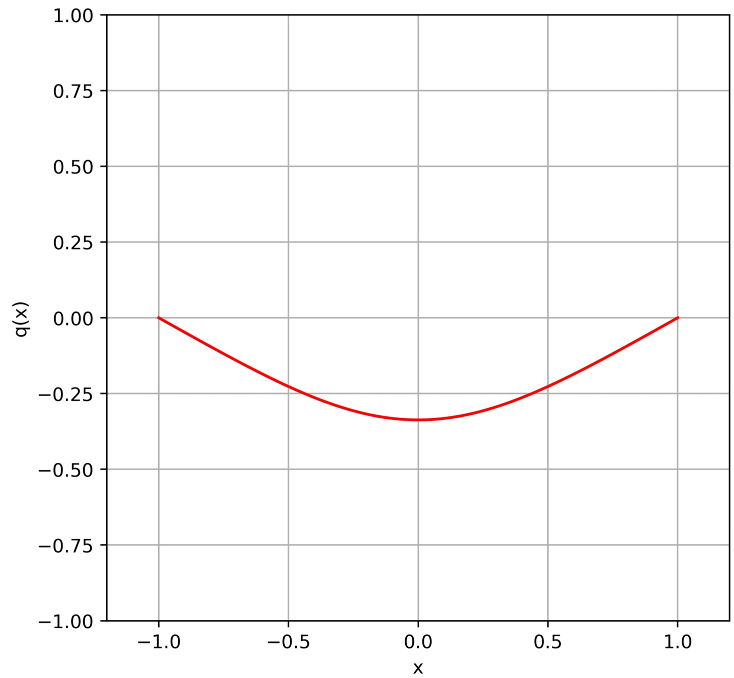
$$y'' = \underbrace{-\frac{2x}{1+x^2}}_{p(x)}\, y' + \underbrace{\frac{x^2}{1+x^2}}_{q(x)}\, y + \underbrace{\frac{1}{1+x^2}}_{r(x)}$$

To je linearen problem!

Splošni iterativni postopek



Rešitev lin. sistema enačb



Robni problem lastnih vrednosti (Širca, RMF, 8.7)

- Pri robnem problemu lastnih vrednosti poleg neznane funkcije, ki zadošča diferencialni enačbi in robnim pogojem, iščemo še neznane skalarje λ ki slučajno nastopajo v formulaciji problema.

$$y'' = f(x, y, y', \lambda) \quad \text{za} \quad x \in [a, b]$$

$$A_1 y(a) + A_2 y'(a) = \alpha$$

$$B_1 y(b) + B_2 y'(b) = \beta$$

- Najbolj nas bodo zanimali Sturm-Liouvilleovi problemi, ki jih predstavimo z enačbo:

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{dy}{dx}\right) + q(x)y = \lambda w(x) y \; ; \quad a < x < b$$

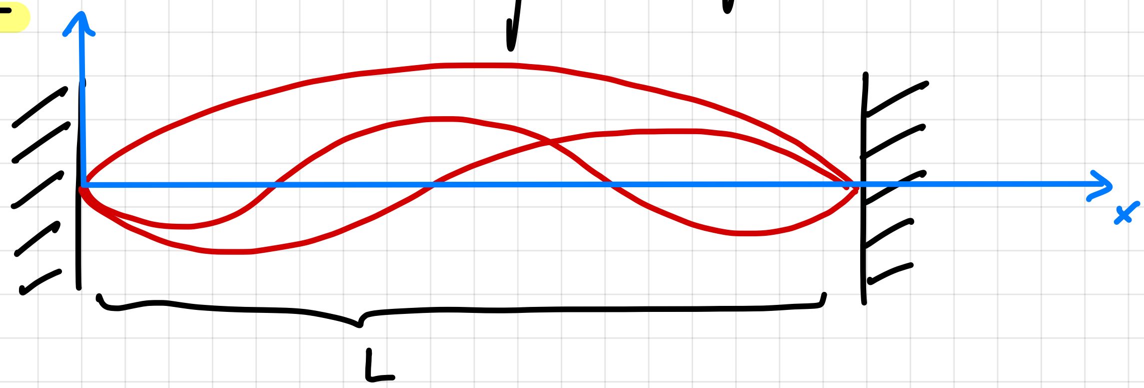
znane realne funkcije

Robne pogoje zapišemo v obliki:

$$a_1 y(a) - a_2 p(a) y'(a) = 0$$

$$b_1 y(b) - b_2 p(b) y'(b) = 0$$

Zgled: Lastna nihanja napete strune:



in druge zunanje sile tudi ne.

Če zanemarimo težo strune, nihanje strune opisuje homogena valovna enačba:

$$\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial t^2}$$

Enačbo rešimo z nastavkom $U(x,t)=u(x)\cdot e^{i\omega t}$ od koder dobimo navadno diferencialno enačbo drugega reda – t.j. amplitudno enačbo:

$$\boxed{\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \overbrace{\left(-\frac{\omega^2}{c^2}\right)}^{=\lambda} u(x)}$$

To je S.-L. problem lastnih vrednosti!

!

Pripadajoča robna pogoja sta

$$u(0) = 0 \quad \text{in} \quad u(L) = 0$$

Enačba reši $u(x) = u_{01} \sin(kx) + u_{02} \cos(kx)$

Robni pogoj $u(0) = 0$ zahteva, da je $u_{02} = 0$.

k dobimo iz drugega pogoja:

$$u(L) = u_0 \sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\boxed{k = \frac{n\pi}{L}}$$

Upoštevajmo sedaj to v amplitudni enačbi:

$$-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 u_0 \cancel{\sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)} = -\frac{\omega^2}{c^2} u_0 \cancel{\sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}$$

$$\boxed{\omega_n = \frac{c}{L} n\pi}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

To so lastne frekvence strune.

Če še vzamemo, da je $\frac{c}{L} = 1$, potem dobimo

$$\boxed{\omega_n = n\pi}$$

Naloga:

Ta problem lastnih vrednosti želimo rešiti numerično!

Numerično reševanje lastnega problema:

$$y'' = f(x, y, y', \lambda)$$

Enačbo znamo prepisati v sistem dveh sklopljenih enačb 1. reda z dvema robnima pogojema.
Če vpeljemo $\vec{Y} = [y(x), v(x)]^T$ potem lahko v splošnem zapišemo:

V našem primeru Newtonovega zakona

$$\underbrace{\vec{Y}' = \begin{bmatrix} y' \\ v' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{y'}(x, y, v, \lambda) \\ g_{v'}(x, y, v, \underline{\lambda}) \end{bmatrix}}_{\text{Sistem sklopljenih nelinearnih enačb 1. reda.}} = \begin{bmatrix} v \\ f(x, y, v, \underline{\lambda}) \end{bmatrix}$$

Ker v enačbah nastopa tudi parameter λ, je sistem predoločen, saj moramo zadostiti 3 namesto 2 robnim pogojem: (2 robna pogoja + lastna vrednost). V splošnem ni rešitve za poljubne vrednosti λ. Za nekatere vrednosti λ pa rešitev obstaja. Tole λ in pripadajoče rešitve iščemo.

Parameter λ bi lahko v sistemu enačb tolmačili kot dodatno spremenljivko, ki ji ustreza diferencialna enačba

$$\frac{d\lambda}{dx} = 0 \iff \text{konstanten parameter}$$

Naš sistem lahko tako zapišemo v razširjeni obliki kot: $\vec{y} = [y, v, \lambda]^T$

$$\vec{y}' = \begin{bmatrix} y' \\ v' \\ \lambda' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{y'}(x, y, v, \lambda) \\ g_{v'}(x, y, v, \lambda) \\ 0 \end{bmatrix}$$

Takšen zapis nam pride prav, saj lahko za tako zapisan problem uporabimo standardne rutine za reševanje BVP: strelske metode, relaksacijske metode.

Strelska metoda (Recept):

- Predpostavimo Dirichletove robne pogoje.
- Strelsko integracijo začnemo s smiselno izbranim odvodom $y'(a)$ in parametrom λ in pogledamo, kam nas to pripelje pri $x=b$.
- Parameter λ in/ali $y'(a)$ spreminjamo tako dolgo, da z rešitvijo zadanemo $y(b)=\beta$.
- Pazimo, da lahko več kot en λ reši enačbo!

Komentar: S strelsko metodo lahko poiščemo poljubno število lastnih vrednosti λ_n. Kako dobro jih določimo je odvisno od natančnosti numeričnih postopkov za reševanje ODE in iskanje ničel (i.e. od koraka h)

Opomba: Če je problem Sturm-Liouvillov in je $y(x)$ rešitev problema, potem je $\tilde{y}=a\,y(x)$ tudi rešitev problema:

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d\tilde{y}}{dx}\right) + q(x)\tilde{y} = \lambda w(x)\tilde{y}$$

$$-\cancel{a}\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{dy}{dx}\right) + \cancel{a}\, q(x)y = \cancel{a}\lambda w(x) y$$

Kjer smo upoštevali, da je: $\frac{d}{dx}(ay) = a\cdot\frac{dy}{dx}$

Rešitev se skalira z a, kar pomeni da je vseeno, kaj vzamemo za začetni odvod $y'(a)$. Lahko izberemo $y'(a)=1$. Na koncu moramo potem le poskrbeti za ustrezno normalizacijo rešitev – če je to sploh potrebno.

Torej: Edini parameter, ki ga moramo pri streljanju nastavljati je parameter λ.

Zgled (naprej):

Rešujemo: $$y''(x) = \overset{=\lambda}{\left(-\frac{\omega^2}{c^2}\right)} y(x) \quad ; \quad y(0)=y(1)=0$$

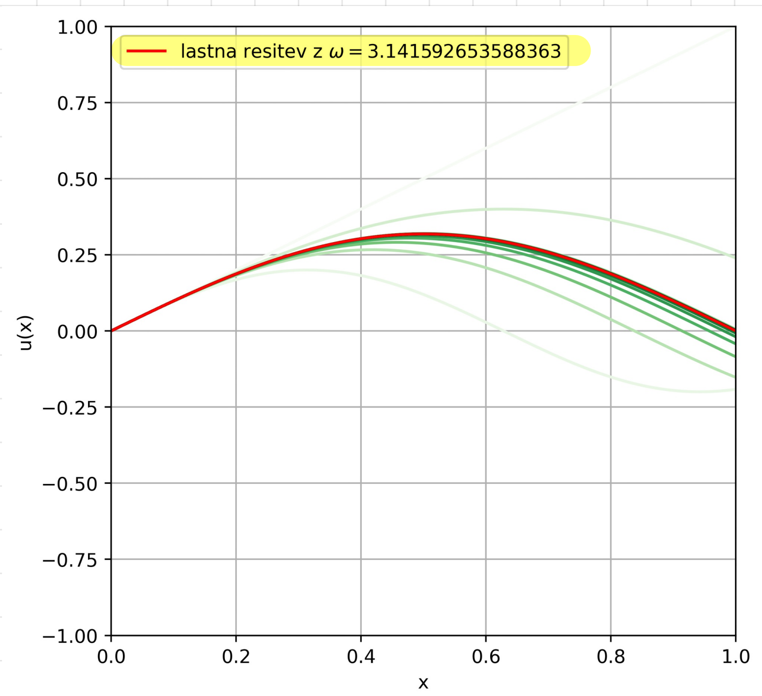
Problem prepišemo v sistem enačb 1. reda:

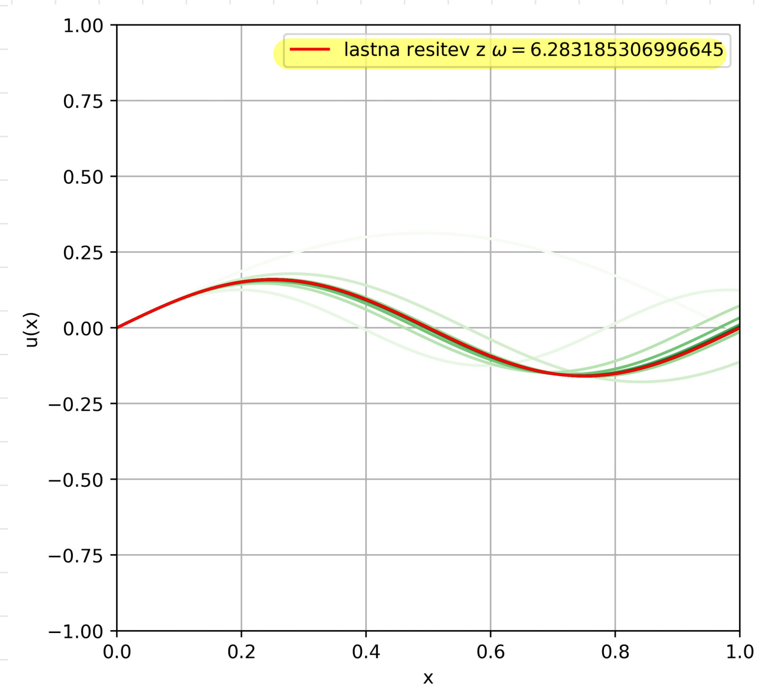
$$\begin{bmatrix} y' \\ v' \\ \lambda' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v \\ -\lambda y \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Izberemo približek za lastno vrednost $\tilde{\lambda}$, začetni odvod in ustrelimo:

$$\vec{y}(a) = \begin{bmatrix} y(a) \\ 1 \\ \tilde{\lambda} \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{IVP}} \vec{y}(b) = \begin{bmatrix} y(b) \\ v(b) \\ \tilde{\lambda} \end{bmatrix}$$

Primerjamo $y(b)$ z β in postopek ponavljamo tako dolgo, da $|y(b) - \beta| < \varepsilon$.





Diferenčna metoda za S.-L. problem:

- Z ustrezno substitucijo neodvisne in odvisne spremenljivke (ali pa v primeru, ko je $p(x) = w(x) = 1$) lahko S.-L. enačbo prepišemo v obliko:

$$-y'' + Q(x)y = \lambda y, \quad a < x < b$$

- Zaradi enostavnosti privzemimo še homogene Dirichletove robne pogoje:

$$y(a) = y(b) = 0.$$

Diferencialno enačbo prepišimo v diferenčno obliko:

$$y_0 = 0, \quad y_n = 0$$

$$-\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + Q(x_i)y_i = \lambda y_i \; ; \; i = 1, \dots, n-1$$

Če vpeljemo vektor rešitve:

$$\vec{y} = [y_1, y_2, \dots\dots, y_{n-1}]^T$$

Lahko sistem diferenčnih enačb zapišemo v matrični obliki:

$$\underbrace{\left(\frac{1}{h^2}D + Q\right)}_{A}\vec{y} = A\vec{y} = \lambda\vec{y}$$

$$D = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & & \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad Q = \begin{bmatrix} Q(x_1) & & & \\ & Q(x_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & Q(x_{n-1}) \end{bmatrix}$$

Ugotovitev: Problem smo prevedli na iskanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev tridiagonalne matrike A. To znamo!

Ugotovitev #2: Lastne rešitve enačbe ustrezajo lastnim vektorjem matrike A.

Opomba: Z diferenčno metodo lahko dobimo toliko lastnih vrednosti, kolikor je dimenzija matrike A, torej $n-1$!

Opomba #2: Za implementacijo bolj zapletenih robnih pogojev glej Širca, RMF, 8.7.4
Ni bistveno težje:

Zgled (napej):

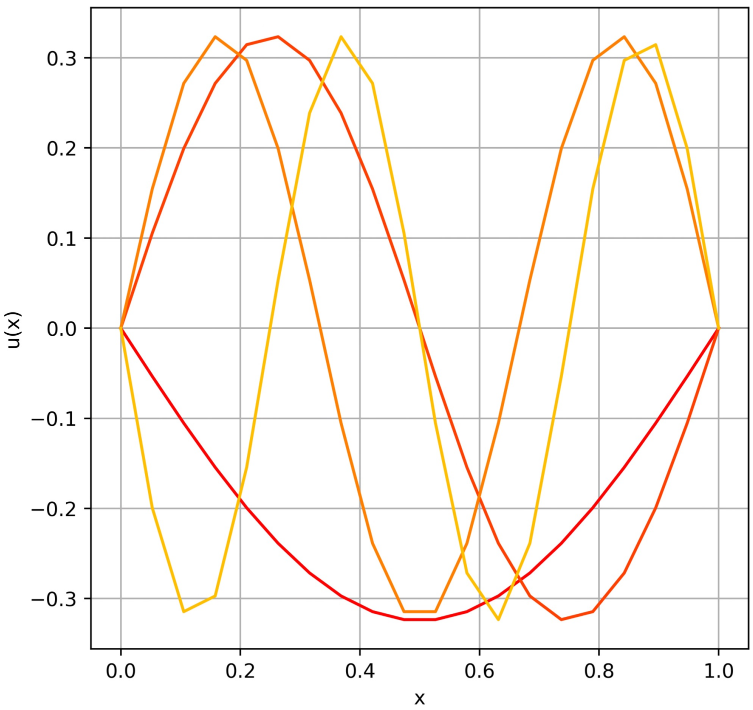
Rešujemo:
$$y''(x) = \underbrace{-\frac{\omega^2}{c^2}}_{=\lambda} y(x) \quad ; \quad y(0)=y(1)=0$$

V tem primeru je $A = D\frac{1}{h^2}$. Rešujemo lastni sistem:
$$A\vec{y} = \lambda \vec{y}$$

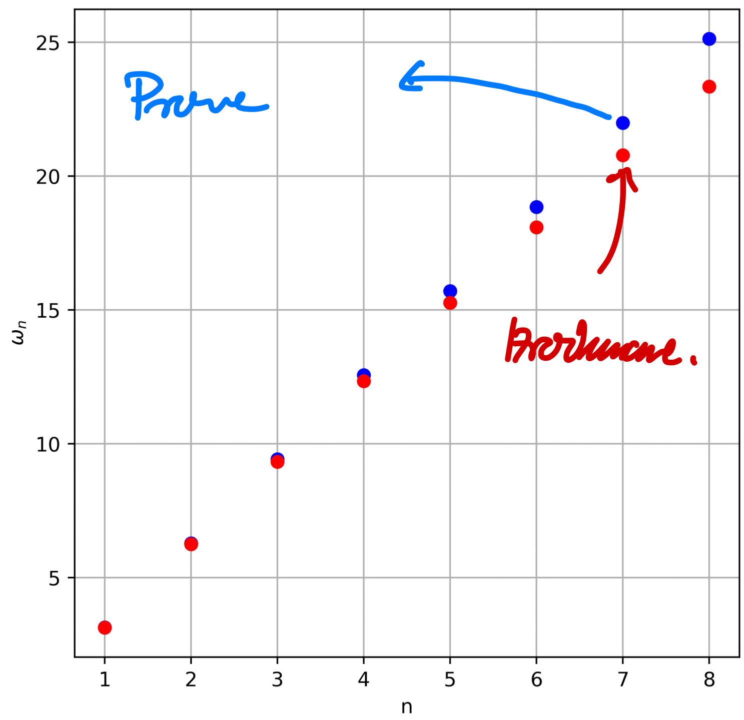
Lastne frekvence so:
$$\omega_n = \sqrt{-\lambda_n} \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, N-1$$

Lastni nihajni načini ustrezajo lastnim vektorjem $\vec{y}_n$, $n = 1, 2, \dots, N-1$.

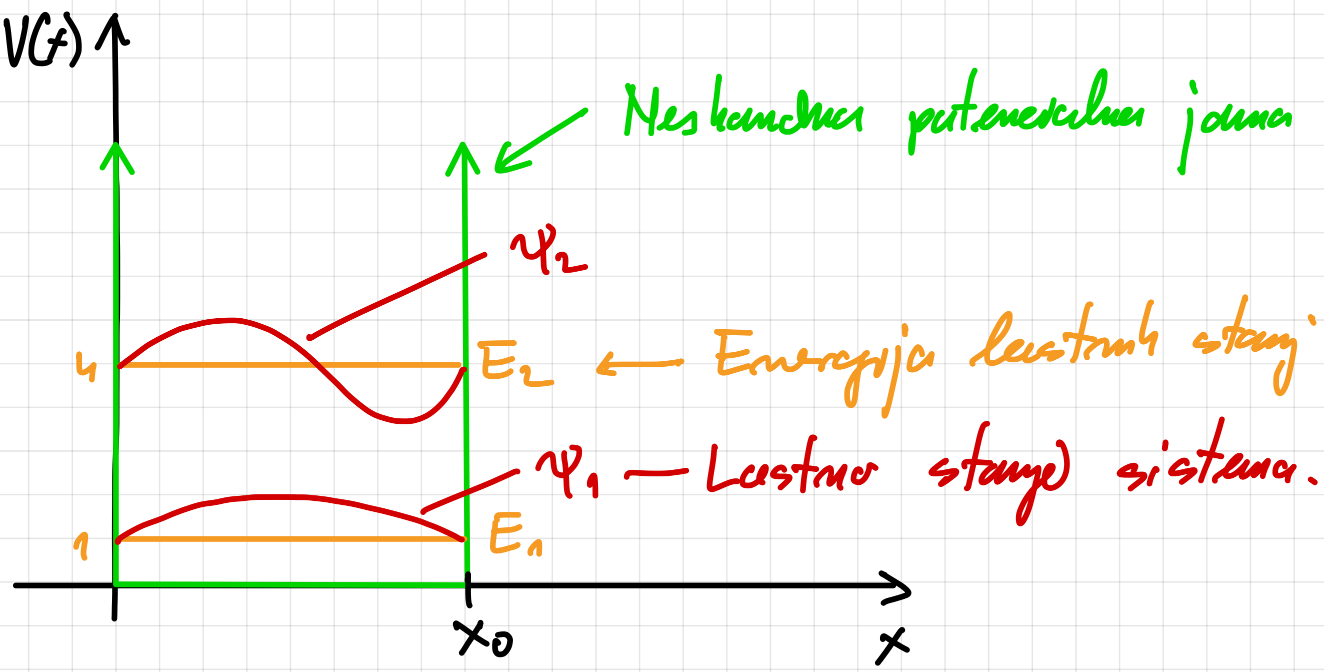
Lastne rešitve



Lastne frekvence



Naloga: Delec v neskončni potencialni jami



Zapišemo s stacionarno Schrödingerjevo enačbo v 1D:

Delec predstavimo z valovno funkcijo ψ

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}}_{\text{Kinetični člen}} + \underbrace{V(x)\,\psi(x)}_{\text{Potencialni člen}} = \underbrace{E}_{\text{Energija delca.}}\,\psi(x)$$

Za podrobnosti glej:

- Strnad, Fizika III. del, str. 125
- Kodre, Matematika v fiziki, str. 145.

V primeru neskončne potencialne jame:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < L \\ \infty & ; \quad \text{sicer} \end{cases}$$

Schrödingerjeva enačba v tem primeru dobi obliko:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + 0\psi = E\psi \quad ; \quad 0 < x < L$$

Vpeljemo novo spremenljivko: $\xi = \frac{x}{L}$; $\xi \in (0,1)$

Dobimo:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2mL^2}\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = E\psi}$$

To enačbo moramo sedaj rešiti pri robnih pogojih: $\psi(0) = \psi(1) = 0$. $\Leftrightarrow$ Delec se lahko nahaja le znotraj potencialne jame.

V enačbi prepoznamo enačbo nihanja, zato bo rešitev kombinacija sinusov in cosinusov.

Glede na prvi robni pogoj rešitev nastavimo z:

$$\psi(\xi) = A_0 \cdot \sin(k\xi)$$

Drugi robni pogoj določi: $k \cdot 1 = \pi n$; $n = 1, 2, 3, \dots$

Dobimo:

$$\psi_n(\xi) = A_0 \sin(\pi n \xi) \; ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Oziroma:

$$\psi_n(x) = A_0 \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \; ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Konstanto A_0 določimo iz normalizacije:

$$1 = \int_0^L \psi^* \psi \, dx = L \cdot \int_0^1 \psi^* \psi \, d\xi = L A_0^2 \int_0^1 \sin^2(k\xi) \, d\xi$$

$$= L A_0^2 \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{k} \cos \underset{\pi n}{k} \, \underbrace{\sin \underset{\pi n}{k}}_{=0} \right) = \frac{L A_0^2}{2} = 1$$

$$A_0 = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Dobimo:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Dobili smo lastna stanja delca v neskončni potencialni jami. Izračunajmo sedaj še lastne energije! Vstavimo rešitev v Schrödingerjevo enačbo in dobimo:

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\cancel{\sqrt{\frac{2}{L}}}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\cancel{\sin(kx)} = E\cancel{\sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx}$$

Dobimo:
$$E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(n\pi)^2 \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Izberemo: $L = 1$ in $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$. V tem primeru ima enačba obliko:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -E\psi$$

Z robnima pogoji: $\psi(0) = \psi(1) = 0$. To sedaj bomo rešili numerično, pri čemer poznamo analitične rešitve:

$$\psi_n(x) = \sqrt{2}\sin(\pi n x) \text{ in } E_n = (n\pi)^2; \quad n = 1, 2, \ldots$$

Pazi:
$$\int_0^1 \psi_n^* \psi_n \, dx \overset{?}{=} 1 \, !$$

Preveri, da je ta pogoj izpolnjen oziroma po potrebi renormaliziraj!