University of Ljubljana
Faculty of Mathematics and Physics

8. naloga
Robni problem lastnih vrednosti

Ma-Fi praktikum 2022/23

Robni problem lastnih vrednosti

- Danes bomo naše znanje o reševanju diferencialnih enačb (1. in 2. reda) z **začetnimi pogoji** razširili na reševanje problemov z **robnimi pogoji.** Namen naloge je konceptualno iz dveh delov:
  - Naučiti vas **reševanja problemov DE z robnimi pogoji** (angleško boundary value problems, BVP).
  - Uporabiti to znanje tudi za reševanje diferencialnih enačb pri iskanju **lastnih funkcij in lastnih vrednosti diferencialnih enačb.**
    - … zato tako kriptičen naslov!

Podrobnosti…

- Danes torej rešujemo probleme oblike:

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

- Pri čemer iščemo našo funkcijo *y(x)* na intervalu [a,b]. Podane imamo tudi ustrezne robne pogoje: ali v **Dirichletovi obliki**:

$$y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$$

- … ali v **von Neumannovi obliki**:

$$y'(a) = \alpha, \quad y'(b) = \beta$$

- … ali pa v ustrezni **mešanici**:

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

- Poseben primer, dovolj pogost v fiziki, so tudi **periodični robni pogoji:**

$$y(a) = y(b) \quad y'(a) = y'(b)$$

Strelska metoda

- Dovolj uporabno orodje za reševanje BVP je **strelska metoda**:
  - celotna ideja je, da BVP prevedemo na IVP problem + iteracije.
  - Za začetek si vzemimo Dirichletove r.p. in **linearno DE:**

$$
\begin{aligned}
&y'' + P(x)y' + Q(x)y = R(x) \\
&y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta
\end{aligned}
$$

- **Predpostavimo**, da rešitev obstaja (pač fizikalni pristop…).
- V strelski metodi potem nadomestimo ta BVP z **dvema pomožnima IVP:**

$$
\begin{aligned}
&u'' + Pu' + Qu = R && v'' + Pv' + Qv = 0 \\
&u(a) = \alpha, \quad u'(a) = 0 && v(a) = 0, \quad v'(a) = 1
\end{aligned}
$$

- Ti dve enačbi znamo že rešiti (npr klasični R-K).
- Sedaj vpeljemo kot oceno za našo funkcijo nastavek : $Y = u + \vartheta\, v$, ki zaradi linearnosti enačbe tudi reši našo začetno DE, na robovih pa da:

$$
\begin{aligned}
Y(a) &= \alpha \\
Y'(a) &= \vartheta
\end{aligned}
$$

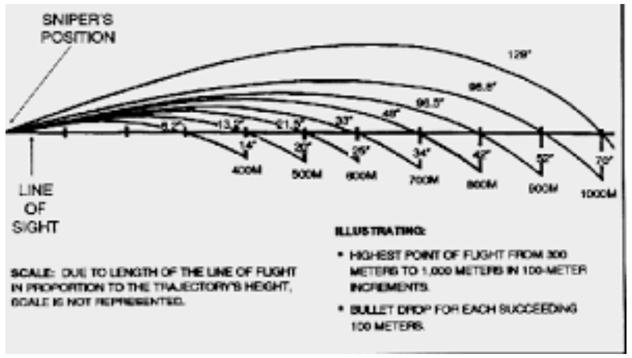
Kot ϑ ustreza kotu začetnega strela ….

Strelska metoda

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = R(x)$$
$$y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$$

- Ker je ta DE linearna, lahko tudi zadanemo v tarčo **z enim samim strelom**:

$$Y(b) = u(b) + \vartheta_0\, v(b) = \beta$$
$$\vartheta_0 = \frac{\beta - u(b)}{v(b)}$$



- Kadar imamo opravka z bolj kompliciranimi r.p. , kot je npr **Neumannov:**

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = R(x)$$
$$y(a) = \alpha, \quad y'(b) = \beta$$

- … obravnavamo našo linearno enačbo kot **sistem (*y₁*=*y*):**

$$y_1' = y_2$$
$$y_2' = -P\, y_2 - Q\, y_1 + R$$
$$y_1(a) = \alpha, \quad y_2(b) = \beta$$

Strelska metoda

$$
\begin{aligned}
y_1' &= y_2 \\
y_2' &= -P\,y_2 - Q\,y_1 + R \\
y_1(a) &= \alpha, \quad y_2(b) = \beta
\end{aligned}
$$

- Ta sistem lahko potem **obravnavamo vektorsko, kot sistem LDE:**

$$
\vec{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \qquad \vec{\mathbf{y}}\,' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -Q & -P \end{pmatrix} \vec{\mathbf{y}} + \begin{pmatrix} 0 \\ R \end{pmatrix}, \quad \begin{matrix} y_1(a) = \alpha \\ y_2(b) = \beta \end{matrix}
$$

- In vpeljemo vektorski pomožne funkciji in IVP (ki ju rešujemo **enako** kot prej):

$$
\vec{\mathbf{u}}\,' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -Q & -P \end{pmatrix} \vec{\mathbf{u}} + \begin{pmatrix} 0 \\ R \end{pmatrix}, \quad \vec{\mathbf{u}}(a) = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}
$$

$$
\vec{\mathbf{v}}\,' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -Q & -P \end{pmatrix} \vec{\mathbf{v}}, \quad \vec{\mathbf{v}}(a) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
$$

- Z nastavkom in rešitvijo:

$$
\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{u}} + \theta_0 \vec{\mathbf{v}}, \quad \theta_0 = \frac{\beta - u_2(b)}{v_2(b)}
$$

Strelska metoda

- V primeru, da naša DE **ni linearna ampak bolj splošna**:

$$y''(x) = f(x, y, y') \qquad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$$

- To zopet rešujemo kot **sistem s prevedbo na IVP (zopet $y_1 = y$):**

$$y_1' = y_2$$
$$y_2' = f(x, y_1, y_2)$$
$$y_1(a) = \alpha, \quad y_2(a) = \vartheta$$

Kot ϑ ustreza kotu začetnega strela ….

- Ta sistem lahko rešimo za določen strelski kot in poskušamo zadeti $y(b) = \beta$
- Seveda je to povsem enako iskanju ničle funkcije:

$$F(\vartheta) = y(b)|_{\vartheta} - \beta = 0$$

- … torej lahko uporabimo katero koli od naših znanih metod (npr bisekcija…).

Strelska metoda

- Poseben zgled je iskanje **lastnih vrednosti in lastnih funkcij.**
  - Tu imamo v diferencialni enačbi **prost parameter**, tipično tudi **homogene robne pogoje.**

$$y''(x) = f(x, y, y', \lambda), \quad y(a) = y(b) = 0$$

- To spet rešujemo kot **sistem s prevedbo na IVP (… in *y_1=y*):**

$$y_1' = y_2$$
$$y_2' = f(x, y_1, y_2, \lambda)$$
$$y_1(a) = 0, \quad y_2(a) = 1$$

Kot ϑ je zdaj kar vrednost λ!

si izberemo (lastna f. določena do konstante…)

- In spet poskušamo zadeti $y_1(b) = y(b) = 0$
- … torej lahko uporabimo katero koli od naših znanih metod (npr bisekcija…).
- V primeru lastnih vrednosti in funkcij, **imamo seveda lahko več rešitev!**
  - **… kot na primer v domači nalogi…**
  - Izziv je seveda potem najti vse lastne vrednosti (kot pri iskanju ničel…)

Metoda končnih diferenc

$$y''(x) = f(x, y, y') \qquad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$$

- Pri diferenčni metodi je bistveni korak, da nadomestimo vse odvode s **končnimi diferencami na mreži točk. V drugem redu globalne natančnosti:**

centralna difrenca za prvi odvod…

$$\frac{Y_{j+1} - 2Y_j + Y_{j-1}}{h^2} = f\left(x_j, Y_j, \tfrac{1}{2h}(Y_{j+1} - Y_{j-1})\right), \quad 1 \leq j \leq N-1$$

- Dodamo še (Dirichletove) začetne pogoje v novem zapisu:

$$Y_0 = \alpha \quad Y_N = \beta$$

- Obstaja tudi metoda globalnega reda **h⁴**, metoda Numerova (ali Golden Road), katere zapis ne zgleda bistveno drugače:

$$Y_0 = \alpha$$

$$Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1} = \frac{h^2}{12}\left(f_{n+1} + 10 f_n + f_{n-1}\right) \quad 1 \leq n \leq N-1$$

$$Y_N = \beta$$

  - **… le da imamo tu opravka z implicitno shemo (ki pa nas ne bo motila..).**

Metoda končnih diferenc

- Zgodba je za odtenek bolj komplicirana za splošnejše robne pogoje, kot so:

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

- Tu moramo nekako dodati še opis odvoda na robu, kar je z diferencami težko, saj bi morali iti 'čez rob' (k=-1,k=N+1):

centralna difrenca za prvi odvod…

$$A_1\, Y_0 + A_2 \frac{Y_1 - Y_{-1}}{2h} = \alpha, \quad B_1\, Y_N + B_2 \frac{Y_{N+1} - Y_{N-1}}{2h} = \beta$$

- Če vrednosti onkraj roba poznamo, seveda ni problem, drugače pa si pomagamo s Taylorjevim razvojem. Do drugega reda je:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = y_n' + \frac{h}{2} y_n'' + O\left(h^2\right)$$

- Za drugi odvod lahko nazaj vstavimo našo DE in s približkom odvoda:

$$y_n' \simeq \frac{Y_{n+1} - Y_n}{h} - \frac{h}{2} f\left(x_n, Y_n, \frac{Y_{n+1} - Y_n}{h}\right) + O\left(h^2\right)$$

Metoda končnih diferenc

- Zgodba je za odtenek bolj komplicirana za splošnejše robne pogoje, kot so:

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

- Tu moramo nekako dodati še opis odvoda na robu, kar je z diferencami težko, saj bi morali iti ‘čez rob’ (k=-1,k=N+1):

$$A_1\, Y_0 + A_2 \frac{Y_1 - Y_{-1}}{2h} = \alpha, \quad B_1\, Y_N + B_2 \frac{Y_{N+1} - Y_{N-1}}{2h} = \beta$$

- Za drugi odvod lahko nazaj vstavimo našo DE in s približkom odvoda:

$$y_n' \simeq \frac{Y_{n+1} - Y_n}{h} - \frac{h}{2} f\left(x_n, Y_n, \frac{Y_{n+1} - Y_n}{h}\right) + O\left(h^2\right)$$

- Ki ga lahko vstavimo v originalni robni pogoj, pa dobimo na primer:

$$A_1 Y_0 + A_2 \left[\frac{Y_1 - Y_0}{h} - \frac{h}{2} f\left(a, Y_0, \frac{Y_1 - Y_0}{h}\right)\right] = \alpha$$

- **Podobne izraze se da izpeljati tudi za višje rede natančnosti (Numerov…).**

Metoda končnih diferenc

- Vrnimo se k naši DE. V tej metodi imamo torej zapis (in Dirichletove z.p.):

$$\frac{Y_{j+1}-2Y_j+Y_{j-1}}{h^2}=f\left(x_j,Y_j,\tfrac{1}{2h}(Y_{j+1}-Y_{j-1})\right), \quad 1\le j\le N-1$$

$$Y_0=\alpha \quad Y_N=\beta$$

- Bistveni korak je, da lahko sedaj zapišemo naših N-1 neznanih vrednosti v **vektor**!

$$\overrightarrow{\mathbf{Y}}=[Y_1,Y_2,\ldots,Y_{N-1}]$$

- S tem lahko skonstruiramo **matrično enačbo dimenzije N-1:**

$$A\overrightarrow{\mathbf{Y}}=\overrightarrow{\mathbf{V}}(\overrightarrow{\mathbf{Y}})$$

- Kjer je A tridiagonalna matrika, vektor **V** pa bolj komplicirana funkcija ***Y:***

$$A=\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0\\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0\\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0\\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot\\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & -2 & 1\\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \overrightarrow{\mathbf{V}}(\overrightarrow{\mathbf{Y}})=\begin{pmatrix} h^2 f\left(x_1,Y_1,\frac{1}{2h}(Y_2-\alpha)\right)-\alpha\\ h^2 f\left(x_2,Y_2,\frac{1}{2h}(Y_3-Y_1)\right)\\ \cdots\\ h^2 f\left(x_{N-2},Y_{N-2},\frac{1}{2h}(Y_{N-1}-Y_{N-3})\right)\\ h^2 f\left(x_{N-1},Y_{N-1},\frac{1}{2h}(\beta-Y_{N-2})\right)-\beta \end{pmatrix}$$

Reševanje s Picardovimi iteracijami

- V tej metodi je torej bistveno, da rešimo naš problem **za vse točke na mreži hkrati!**
  - Tako implicitne sheme tu niso problem (kot npr. Numerov)!

$$\vec{\mathbf{Y}} = [Y_1, Y_2, \ldots, Y_{N-1}] \qquad Y_0 = \alpha \quad Y_N = \beta$$

$$A\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{V}}(\vec{\mathbf{Y}})$$

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \vec{\mathbf{V}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \begin{pmatrix} h^2 f\left(x_1, Y_1, \frac{1}{2h}(Y_2 - \alpha)\right) - \alpha \\ h^2 f\left(x_2, Y_2, \frac{1}{2h}(Y_3 - Y_1)\right) \\ \cdots \\ h^2 f\left(x_{N-2}, Y_{N-2}, \frac{1}{2h}(Y_{N-1} - Y_{N-3})\right) \\ h^2 f\left(x_{N-1}, Y_{N-1}, \frac{1}{2h}(\beta - Y_{N-2})\right) - \beta \end{pmatrix}$$

- Za reševanje lahko uporabimo pristop Picardovih iteracij:

$$A\vec{\mathbf{Y}}^{(n+1)} = \vec{\mathbf{V}}(\vec{\mathbf{Y}}^{(n)})$$

nova napoved

stara vrednost

Reševanje s Picardovimi iteracijami

- Seveda moramo na smiseln način izbrati začetno vrednost (~uganemo s pomočjo simetrij problema etc… standardni fizikalni pristop).

$$A\overrightarrow{\mathbf{Y}}^{(n+1)} = \overrightarrow{\mathbf{V}}(\overrightarrow{\mathbf{Y}}^{(n)})$$

nova napoved

stara vrednost

- Metodo lahko dodatno **regulariziramo** tako, da odštejemo vrednost hitro spreminjajoče se funkcije $y(x)$ na obeh straneh DE za boljšo konvergenco:

$$y''(x) - c \cdot y(x) = f(x, y, y') - c \cdot y(x)$$

lahko izberemo

To se prevede na modificirane Picardove iteracije:

$$A\overrightarrow{\mathbf{Y}}^{(n+1)} - c\,h^2\,\overrightarrow{\mathbf{Y}}^{(n+1)} = \overrightarrow{\mathbf{V}}(\overrightarrow{\mathbf{Y}}^{(n)}) - c\,h^2\,\overrightarrow{\mathbf{Y}}^{(n)}$$

- Pokažemo lahko, da je optimalna izbira konstante *c* povezana z odvodi funkcije *f* v mreži točk:

$$c_{\mathrm{opt}} = \frac{1}{2}\left(L^- + L^+\right), \quad L^- \leq \frac{\partial f(x_n, Y_n)}{\partial Y_n} \leq L^+ \;(n = 1, \ldots, N-1), \quad L^\pm > 0$$

Reševanje s iskanjem ničel

- Za druge metode se vrnimo malo nazaj, na zapis sistema:

$$\vec{\mathbf{Y}} = [Y_1, Y_2, \ldots, Y_{N-1}] \qquad Y_0 = \alpha \quad Y_N = \beta$$

$$A\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{V}}(\vec{\mathbf{Y}})$$

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \vec{\mathbf{V}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \begin{pmatrix} h^2 f\left(x_1, Y_1, \frac{1}{2h}(Y_2 - \alpha)\right) - \alpha \\ h^2 f\left(x_2, Y_2, \frac{1}{2h}(Y_3 - Y_1)\right) \\ \cdots \\ h^2 f\left(x_{N-2}, Y_{N-2}, \frac{1}{2h}(Y_{N-1} - Y_{N-3})\right) \\ h^2 f\left(x_{N-1}, Y_{N-1}, \frac{1}{2h}(\beta - Y_{N-2})\right) - \beta \end{pmatrix}$$

- Za namen reševanja tega sistema lahko to enačbo zapišemo tudi kompaktneje, v obliki:

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \left(A\,\vec{\mathbf{Y}} - \vec{\mathbf{V}}\right) = \mathbf{0}$$

Reševanje s iskanjem ničel

- Problem reševanja navedene enačbe je v svoji naravi **iskanje ničel!**

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \left(A\,\vec{\mathbf{Y}} - \vec{\mathbf{V}}\right) = \mathbf{0}$$

- Za rešitev splošnega problema uporabimo več-dimenzionalno **Newton-Rhapsonovo metodo:**
  - Iterativna metoda, ponavljamo do 'negibne točke', torej dokler se približki rešitve $\vec{\mathbf{Y}}$~nehajo spreminjati znotraj dane natančnosti. Formalno:

$$\vec{\mathbf{Y}}^{(n+1)} = \vec{\mathbf{G}}(\vec{\mathbf{Y}}^{(n)})\,,$$

  - pri čemer je:

$$\vec{\mathbf{G}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \vec{\mathbf{Y}} - \left[\frac{\partial\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}})}{\partial\vec{\mathbf{Y}}}\right]^{-1}\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}})\,.$$

Jacobijeva matrika..

  - **Potrebujemo seveda tudi nek začeten približek….**

Reševanje s iskanjem ničel

- (Jakobijevo) matriko v tem izrazu:

$$\vec{\mathbf{G}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \vec{\mathbf{Y}} - \left[\frac{\partial \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}})}{\partial \vec{\mathbf{Y}}}\right]^{-1} \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}}) \, .$$

- …se da tudi kompaktno zapisati v **tridiagonalni obliki!**

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}})}{\partial \vec{\mathbf{Y}}} = \mathsf{J}(\vec{\mathbf{Y}}) = \begin{pmatrix} B_1(\vec{\mathbf{Y}}) & C_1(\vec{\mathbf{Y}}) & 0 & & & \\ A_2(\vec{\mathbf{Y}}) & B_2(\vec{\mathbf{Y}}) & C_2(\vec{\mathbf{Y}}) & 0 & & \\ & & \vdots & & & \\ & 0 & A_{N-2}(\vec{\mathbf{Y}}) & B_{N-2}(\vec{\mathbf{Y}}) & C_{N-2}(\vec{\mathbf{Y}}) \\ & & 0 & A_{N-1}(\vec{\mathbf{Y}}) & B_{N-1}(\vec{\mathbf{Y}}) \end{pmatrix}$$

- pri čemer so:

$$A_j(\vec{\mathbf{Y}}) = -\frac{1}{2}\left[1 + \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial y'}\left(x_j, Y_j, \tfrac{1}{2h}(Y_{j+1} - Y_{j-1})\right)\right] \, ,$$

$$B_j(\vec{\mathbf{Y}}) = 1 + \frac{h^2}{2}\frac{\partial f}{\partial y}\left(x_j, Y_j, \tfrac{1}{2h}(Y_{j+1} - Y_{j-1})\right) \, ,$$

$$C_j(\vec{\mathbf{Y}}) = -\frac{1}{2}\left[1 - \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial y'}\left(x_j, Y_j, \tfrac{1}{2h}(Y_{j+1} - Y_{j-1})\right)\right] \, .$$

- **Izvrednotenje Jacobijeve matrike je lahko velik izziv!**

NUMJAC

- Algoritem, implementiran v MATLAB-u, dokumentacija pomanjkljiva…

```
%   NUMJAC is an implementation of an exceptionally robust scheme due to
%   Salane for the approximation of partial derivatives when integrating
%   a system of ODEs, Y' = F(T,Y).  It is called when the ODE code has
%   an approximation Y at time T and is about to step to T+H.  The ODE
%   code controls the error in Y to be less than the absolute error
%   tolerance ATOL = THRESH.  Experience computing partial derivatives
%   at previous steps is recorded in FAC.  A sparse Jacobian is computed
%   efficiently by using COLGROUP(S) to find groups of columns of DFDY
%   that can be approximated with a single call to function F.  COLGROUP
%   tries two schemes (first-fit and first-fit after reverse COLMMD
%   ordering) and returns the better grouping.
%
%   D.E. Salane, "Adaptive Routines for Forming Jacobians Numerically",
%   SAND86-1319, Sandia National Laboratories, 1986.
%
```

Reševanje s iskanjem ničel

- Namesto eksplicitnega obrata Jacobijeve matrike je ceneje, če v vsakem koraku rešujemo sistem:

$$\left[\frac{\partial \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}}^{(n)})}{\partial \vec{\mathbf{Y}}}\right] \boldsymbol{\Delta} \vec{\mathbf{Y}} = -\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}}^{(n)}) \,, \qquad \vec{\mathbf{Y}}^{(n+1)} = \vec{\mathbf{Y}}^{(n)} + \boldsymbol{\Delta} \vec{\mathbf{Y}}$$

- Ker je Jacobijeva matrika tridiagonalna, se da sistem 'poceni' obrniti (**Thomasov algoritem**).
  - Pythonova rutina **scipy.linalg.solve_banded** je priporočena.
  - Postopek torej ponavljamo, dokler se $\vec{\mathbf{Y}}$ ne spreminja več znotraj napake.

BVP za LDE

- Posebej enostavno je rešiti dani sistem: $\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{Y}}) = \left(A\,\vec{\mathbf{Y}} - \vec{\mathbf{V}}\right) = \mathbf{0}$
- ko je diferencialna enačba linearna (oz. funkcija f je linearna funkcija iskane funkcije in njenih odvodov). Torej, kar smo že imeli pri strelski metodi:

$$y''(x) = f(x, y, y') = -P(x)y'(x) - Q(x)y(x) - R(x)$$

- V tem primeru se vektor **V** poenostavi in celotna matrična enačba postane enostaven linearen sistem:

$$Y_0 = \alpha$$

$$\left(1 + \frac{h}{2}P_n\right)Y_{n+1} - \left(2 - h^2 Q_n\right)Y_n + \left(1 - \frac{h}{2}P_n\right)Y_{n-1} = h^2 R_n, \quad 1 \leq n \leq N-1$$

$$Y_N = \beta$$

- Če zopet uvedemo vektorje:

$$\vec{\mathbf{Y}} = [Y_1, Y_2, \ldots, Y_{N-1}] \quad Y_0 = \alpha \quad Y_N = \beta$$

$$\vec{\mathbf{R}} = \left[h^2 R_1 - \left(1 - \frac{h}{2}P_1\right)\alpha, h^2 R_2, \quad h^2 R_3, \quad \cdots, \quad h^2 R_{N-2}, \quad h^2 R_{N-1} - \left(1 + \frac{h}{2}P_{N-1}\right)\beta\right]$$

BVP za LDE

$$\overrightarrow{\mathbf{Y}} = [Y_1, Y_2, \ldots, Y_{N-1}] \quad Y_0 = \alpha \quad Y_N = \beta$$

$$\overrightarrow{\mathbf{R}} = \left[h^2 R_1 - \left(1 - \frac{h}{2} P_1\right)\alpha, h^2 R_2, \quad h^2 R_3, \quad \cdots, \quad h^2 R_{N-2}, \quad h^2 R_{N-1} - \left(1 + \frac{h}{2} P_{N-1}\right)\beta\right]$$

- Spet lahko zapišemo matrično enačbo v N-1 dimenzijah, kjer pa je **R neodvisen od Y.**

$$Z\,\overrightarrow{\mathbf{Y}} = \overrightarrow{\mathbf{R}}$$

- Matrika Z je (seveda) spet tridiagonalna:

$$Z = \begin{pmatrix} -\left(2 - h^2 Q_1\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_1\right) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \left(1 - \frac{h}{2} P_2\right) & -\left(2 - h^2 Q_2\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_2\right) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{h}{2} P_3\right) & -\left(2 - h^2 Q_3\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_3\right) & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & \left(1 - \frac{h}{2} P_{N-2}\right) & -\left(2 - h^2 Q_{N-2}\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_{N-2}\right) \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \left(1 - \frac{h}{2} P_{N-1}\right) & -\left(2 - h^2 Q_{N-1}\right) \end{pmatrix}$$

- … In je tako matrični sistem spet ‘poceni’ (reda N) numerično rešljiv s Thomasovo metodo (ali izboljšavami).

Periodični robni pogoji

- Reševanje LDE z BVP se nesluteno zakomplicira, če uvedemo periodične robne pogoje:

$$y''(x) = f(x, y, y'), \quad y(a) = y(b)$$

- Spet lahko zapišemo matrično enačbo, tokrat v **N dimenzijah (ne N-1)**, ker imamo dodatno neznanko v začetni točki (Y_0):

predpostavimo periodičnost

$$Y_0 = Y_N \quad (\text{in } Y_{n+N} = Y_n,\ Y_{-n} = Y_{N-n})$$

$$\left(1 + \frac{h}{2} P_n\right) Y_{n+1} - \left(2 - h^2 Q_n\right) Y_n + \left(1 - \frac{h}{2} P_n\right) Y_{n-1} = h^2 R_n, \quad 0 \le n \le N-1$$

- Naš sistem ni več tridiagonalen:

$$\vec{\mathbf{Y}} = [Y_0, Y_2, \ldots, Y_{N-1}]$$
$$\vec{\mathbf{R}} = \left[h^2 R_0, h^2 R_1, h^2 R_2, \quad \cdots, \quad h^2 R_{N-2}, \quad h^2 R_{N-1}\right]$$

$$Z\,\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{R}}$$

$$Z = \begin{pmatrix} -\left(2 - h^2 Q_0\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_0\right) & 0 & \cdots & 0 & \boxed{\left(1 + \frac{h}{2} P_0\right)} \\ \left(1 - \frac{h}{2} P_1\right) & -\left(2 - h^2 Q_1\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_1\right) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{h}{2} P_2\right) & -\left(2 - h^2 Q_2\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_2\right) & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & \left(1 - \frac{h}{2} P_{N-2}\right) & -\left(2 - h^2 Q_{N-2}\right) & \left(1 + \frac{h}{2} P_{N-2}\right) \\ \boxed{\left(1 + \frac{h}{2} P_{N-1}\right)} & \cdots & 0 & 0 & \left(1 - \frac{h}{2} P_{N-1}\right) & -\left(2 - h^2 Q_{N-1}\right) \end{pmatrix}$$

Periodični robni pogoji

- Na srečo se da ta sistem elegantno rešiti s posebnim algoritmom, imenovanim Sherman-Morrison. Osnovna ideja je, da zapišemo našo matriko kot:

$$Z = Z_{\text{tridiag}} + \vec{\mathbf{w}} \otimes \vec{\mathbf{z}}$$

circulant matrix

- V našem primeru sta vektorja $\vec{w}$ in $\vec{z}$ podana kot:

$$\vec{\mathbf{w}} = \left[1, 0 \ldots, 0, \left(1 + \frac{h}{2} P_{N-1}\right)\right]$$

$$\vec{\mathbf{z}} = \left[1, 0, \ldots, 0, \left(1 + \frac{h}{2} P_0\right)\right]$$

- Sedaj rešimo dva tridiagonalna sistema:

$$Z\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{R}} \quad \Longrightarrow \begin{cases} Z_{\text{tridiag}}\,\vec{\mathbf{p}} = \vec{\mathbf{R}} \\ Z_{\text{tridiag}}\,\vec{\mathbf{q}} = \vec{\mathbf{w}} \end{cases}$$

ne pozabi odšteti $\vec{w} \otimes \vec{z}$ v Z_{tridiag}!

- Iz pomožnih vektorjev $\vec{p}$ in $\vec{q}$ nato zložimo končno rešitev:

$$\vec{\mathbf{Y}} = \vec{\mathbf{p}} - \left(\frac{\vec{\mathbf{z}} \cdot \vec{\mathbf{p}}}{1 + (\vec{\mathbf{z}} \cdot \vec{\mathbf{q}})}\right) \cdot \vec{\mathbf{q}}$$

- Metoda je numerično **poceni**, saj ostane reda N (tridiag. sistemi):

Iskanje lastnih vrednosti II

- Spet si poglejmo, **kaj se zgodi z diferenčno metodo pri iskanju lastnih funkcij in vrednosti v diferencialnih enačbah.**
  - Omejimo se na primer linearnih DE, ker je posebej poučen. Zelo pogoste DE za iskanje lastnih vrednosti in lastnih funkcij so DE enačbe vrste *Sturm-Liouville* (na primer vodikov atom…):

$$y''(x) = f(x, y, y', \lambda) = -Q(x)y(x) - \lambda V(x)y(x)$$

- Spet s homogenimi Dirichletovimi robnimi pogoji: $y(a) = y(b) = 0$
- Z zelo hitro primerjavo s prejšnjo izpeljavo takoj vidimo, da dobimo sistem:

$$Z\,\overrightarrow{\mathbf{Y}} = \left(\lambda h^2\right)\overrightarrow{\mathbf{Y}} = \Lambda\overrightarrow{\mathbf{Y}}$$

- Kjer je matrika Z spet tridiagonalna (paziti pa moramo, da V(x) nima ničel, ker z njo delimo obe strani enačbe!).
  - **Naš problem smo prevedli na iskanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev (ki so vrednosti funkcije na mreži Y)! Torej uporabimo kar orodja za iskanje lastnih vektorjev in vrednosti matrike in to je to ….**
- **Zakaj pa ne dobimo neskončno lastnih vrednosti?**

We just scratched the surface…

- Na temo BVP so (seveda) napisane knjige, razvite so posebne metode za specifične tipe problemov.
  - Ti zgledi tu uporabni kot osnovno orodje …

Domača naloga

- **Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti za neskončno in končno potencialno jamo z diferenčno metodo in metodo streljanja, lahko pa poskusiš še iterativno in s kakšno drugo metodo.**
  - Analitične rešitve poznate iz moderne fizike…
  - Tu je dovolj, če pozabite na konstante ($\frac{\hbar^2}{2m}$) in rešujete na primer za neskončno potencialno jamo kar:

$$y''(x) = f(x, y, y', \lambda = k^2) = -k^2 y(x), \quad y(0) = y(+a) = 0$$

$$y(x) = A\sin(kx) = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right); \quad \lambda = k^2 = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

- Dodatno lahko rešite še bolj komplicirano funkcijo s četrtim odvodom, uporabi diferenčne metode (npr. diagonalizacijo):

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

Domača naloga

- **Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti za neskončno in končno potencialno jamo z diferenčno metodo in metodo streljanja, lahko pa poskusiš še iterativno in s kakšno drugo metodo.**
  - Analitične rešitve poznate iz moderne fizike…
  - Tu je dovolj, če pozabite na konstante ($\frac{\hbar^2}{2m}$) in rešujete na primer za neskončno potencialno jamo kar:

$$y''(x) = f(x, y, y', \lambda = k^2) = -k^2 y(x), \quad y(0) = y(+a) = 0$$

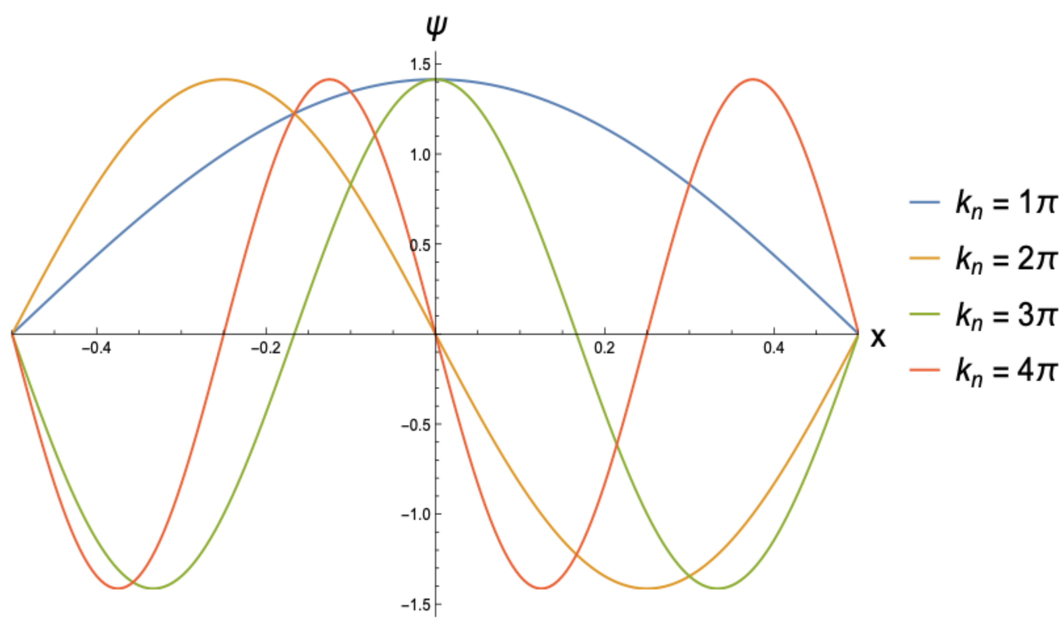
$$y(x) = A\sin(kx) = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right); \quad \lambda = k^2 = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

- Dodatno lahko rešite še bolj komplicirano funkcijo s četrtim odvodom, uporabi diferenčne metode (npr. diagonalizacijo):

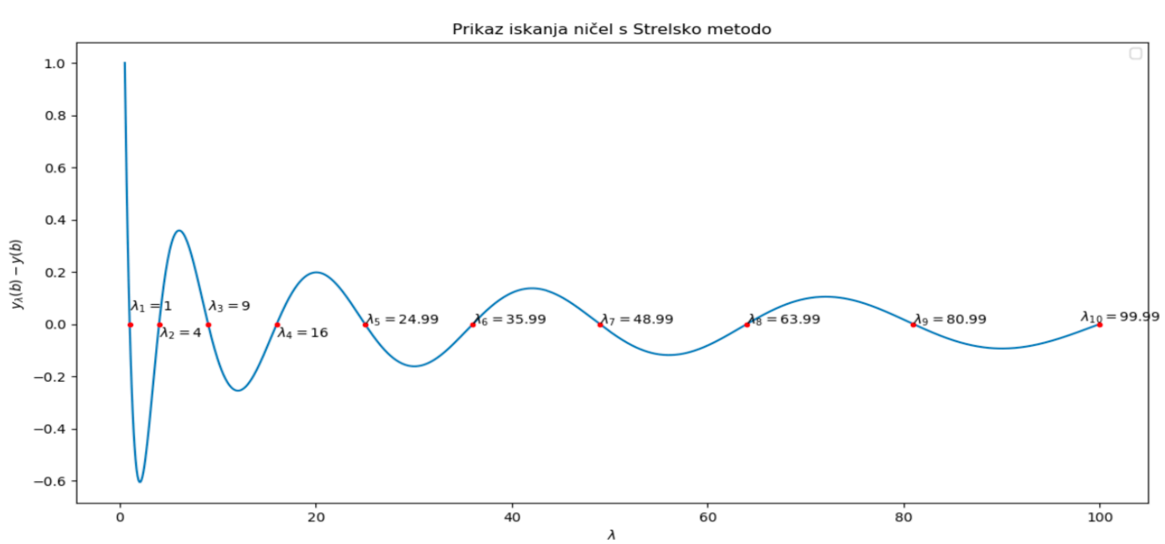
$$\frac{\mathrm{d}^4\psi}{\mathrm{d}x^4} - E\psi = 0$$

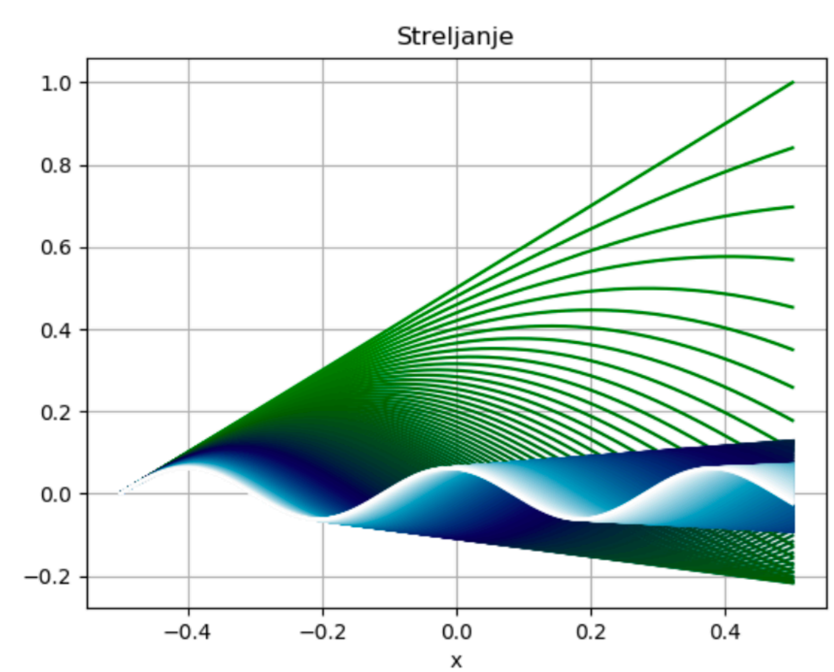
Neskončna jama

- **Strelska metoda:**
  - Problem se prevede na **iskanje ničel** v odvisnosti od začetnih pogojev (λ).
  - Tu napaka (odstopanja) seveda niso nujno simetrična (če streljamo z ene strani…).
  - Lahko streljate tudi iz sredine intervala (upoštevamo sodo/liho opcijo za začetno vrednost funkcije $\psi(0) = 0\,|\,1,\ \psi'(0) = 1\,|\,0$).
- **Diferenčna metoda:**
  - enostavno reševanje, matrični sistem… $(A - I\lambda)\,\vec{\psi} = 0$



$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & . & . & . & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & . & . & -1 & -2 & -1 \\ 0 & . & . & . & . & 1 \end{bmatrix}$$





Končna jama

- V principu lahko vse prevedete tudi na transcendentno enačbo, kot jo dobite analitično in rešite le-to …
  - Rešitev seveda še normirate…

Prevedete na iskanje ničel…

$$\psi'' = -k^2\psi, \quad k^2 = E \qquad \text{(znotraj=in)}$$

$$\psi'' = \kappa^2\psi, \quad \kappa^2 = V_0 - E = V_0 - k^2 \qquad \text{(zunaj=out)}$$

$$\psi_{\rm out}(x=-\frac{a}{2}) = \psi_{\rm in}(x=-\frac{a}{2})$$

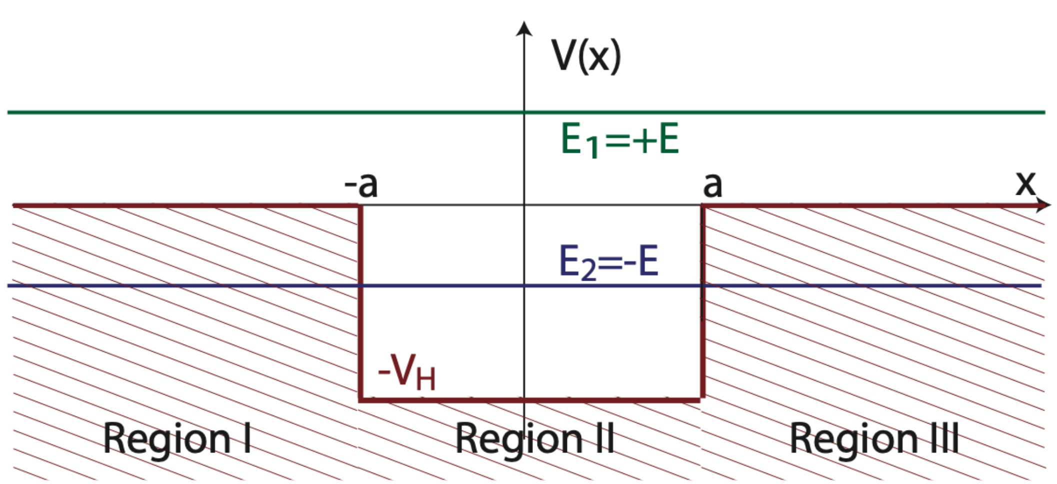
$$\psi'_{\rm out}(x=-\frac{a}{2}) = \psi'_{\rm in}(x=-\frac{a}{2})$$

$$\psi'_{\rm out}(x=-\frac{a}{2}) = \pm\kappa\,\psi_{\rm out}(x=-\frac{a}{2}) \qquad \text{(eksponenti)}$$

$$\pm\kappa\,\psi_{\rm out}(x=-\frac{a}{2}) = \psi'_{\rm in}(x=-\frac{a}{2})$$

$$\mp\kappa\psi_{\rm out}(x=-\frac{a}{2}) = \mp\kappa\psi_{\rm in}(x=-\frac{a}{2})$$

$$0 = \psi'_{\rm in}(x=-\frac{a}{2}) \mp \kappa\psi_{\rm in}(x=-\frac{a}{2})$$



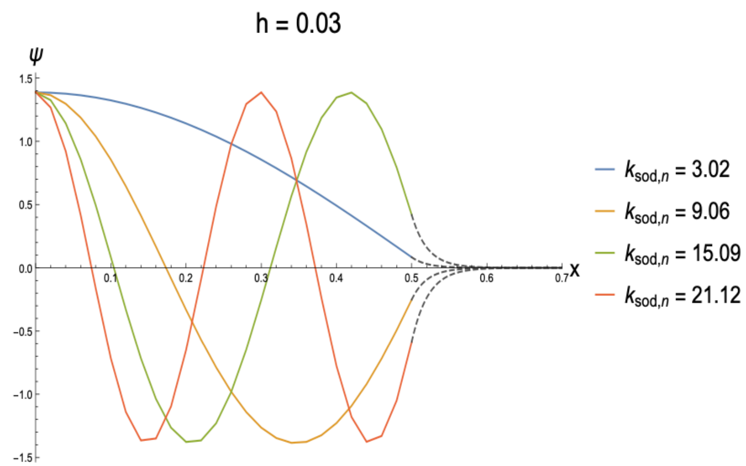
$$\tan\frac{k_{sod}}{2} = \sqrt{\frac{u_0^2}{k_{sod}^2} - 1}$$

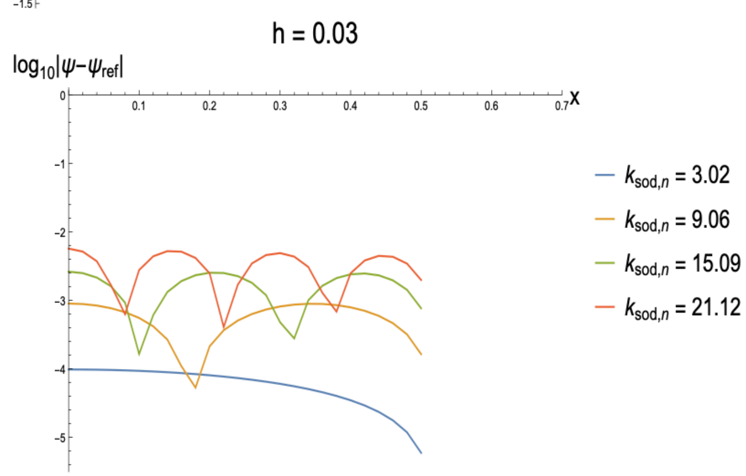
$$\cot\frac{k_{lih}}{2} = -\sqrt{\frac{u_0^2}{k_{lih}^2} - 1}$$

Končna jama

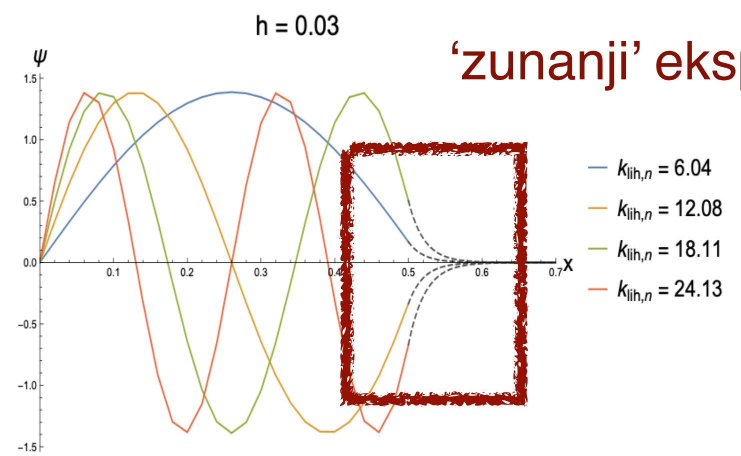
- Strelska metoda: Enostavno rešljivo, samo po **uspešnem strelu morate tudi preveriti, če so r.p. pogoji izpolnjeni…**
  - Z drugimi besedami, tudi r.p. je odvisen od lastne vrednosti…
  - Posebej poglejte sode in lihe rešitve… (lahko tudi **čez pol intervala**…)

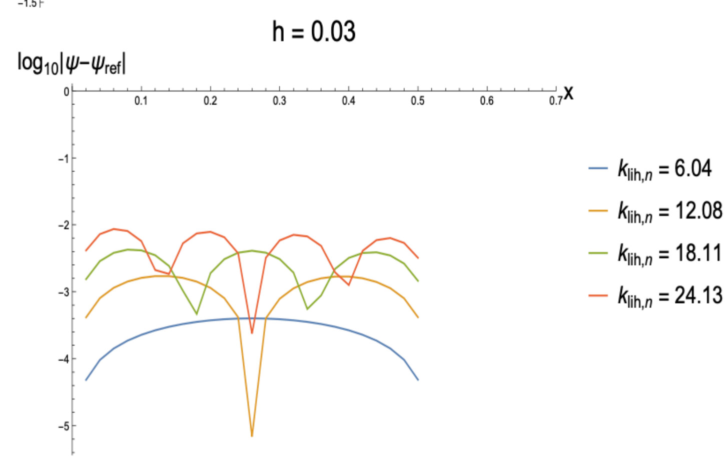
Sode rešitve (pol intevala)



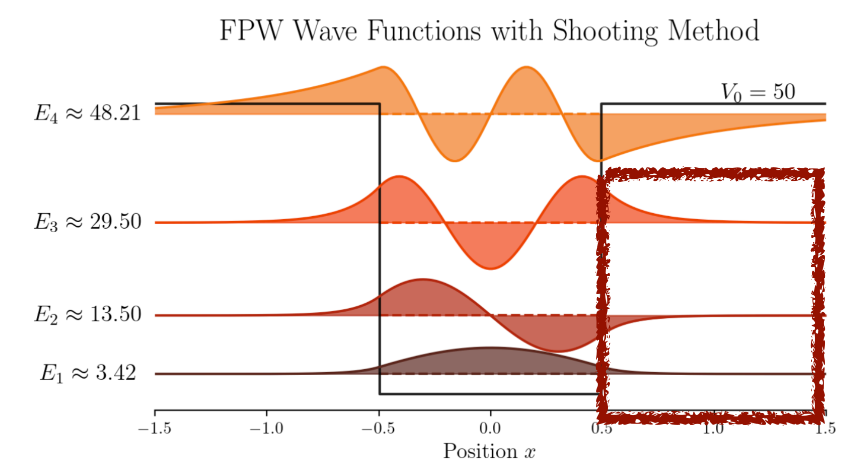


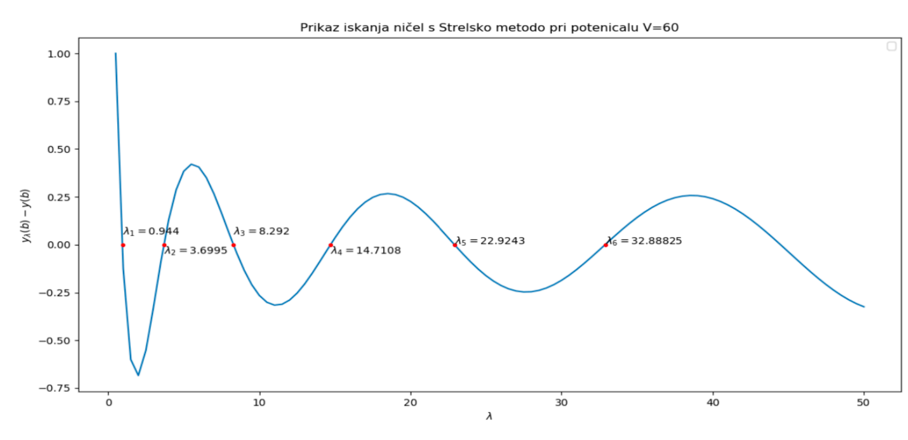
Lihe rešitve (pol intevala)





'zunanji' eksponent (zlepek)





Končna jama

- Strelska metoda: Enostavno rešljivo, samo po **uspešnem strelu morate tudi preveriti, če so r.p. pogoji izpolnjeni…**
  - **Najbolj enostavno,** če streljate iz $b = -\infty$ (dovolj daleč, z $\psi(b) = 0$) v $d = +\infty$ in zahtevate tudi $\psi(d) = 0$!
    - Ni treba **vedeti nič o r.p. na prehodu**, samo DE se spremeni….
    - **… in še bolj enostavno,** če streljate iz $b = 0$ (sredina intervala, soda/liha f.) v $d = +\infty$ in zahtevate $\psi(d) = 0$!

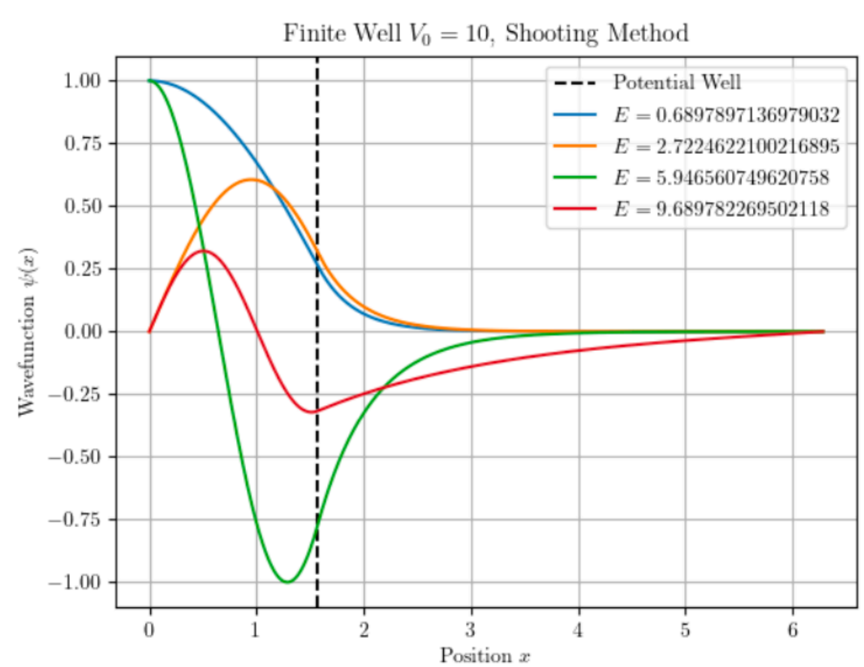


Figure 5: The eigenfunctions of the finite square well with $V_0 = 10$ on the interval $x \in [0, 2\pi]$ with $N_x = 1000$ lattice points and tolerance $\epsilon = 10^{-8}$ at 2π.

Končna jama

- **Diferenčna metoda:** za končno jamo je to težko, ker imate matrični sistem, ki je odvisen od lastne vrednosti … $\left(A(\lambda) - I\lambda\right)\vec{\psi} = 0$

Odvisna od λ!

$$c_1\psi(0) + c_2\psi'(0) = 0 \to c_1\psi_0 + c_2\frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2h} = 0$$

$c_1/c_2 = \pm\,\kappa$, nista poljubna!

$$\begin{bmatrix} \boxed{2\left(1 - \frac{c_1}{c_2}h\right)} & -2 & \cdots & & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 2 & \boxed{-2\left(\frac{d_1}{d_2}h + 1\right)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix}$$

- Torej se morate reševanja lotiti na bolj kompleksne načine:
  - kar z determinanto, pa rešujemo z iskanjem ničel …
  - … lahko pa se spet **lotite razširjenega intervala, kjer postavite:**

$$V(-a/2 < x < a/2) = -V_0 \text{ in } V(|x| > a/2) = 0$$

pa imamo spet homogen robni pogoj in tridiagonalno matriko!

- **pazi, lastnim vrednostim (neg. energije) potem prištej V_0 (premakni ‘ničlo’) ….**
- **Primerjajte tudi s kakšno ‘vgrajeno’ metodo (solve_bvp) ….**