



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Informatyka Stosowana
Bartosz Rogowski, IV rok, 303793
18 października 2021

Inżynierskie Metody Numeryczne 2

Raport z ćwiczenia nr 1

Metoda shootingu w 1D, metoda różnic skończonych, metoda Numerowa.

1 Wstęp teoretyczny

Do rozwiązywania równań różniczkowych k -tego rzędu ($k \in \mathbb{N}$) niezbędne są warunki początkowe, czyli wartość $k - 1$ pochodnych funkcji (począwszy od $k = 0$) w punkcie początkowym x_0 , tzn.:

$$\begin{aligned}y^{(0)}(x_0) &= y(x_0) = y_0 \\y^{(1)}(x_0) &= y'(x_0) = y_1 \\&\vdots \\y^{(k-1)}(x_0) &= \frac{d^{k-1}y}{dx^{k-1}} = y_{k-1},\end{aligned}\tag{1}$$

jednak nie zawsze znane są wartości kolejnych pochodnych.

Niech $k = 2$, wówczas jednowymiarowy problem jest zadany jako*:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x, y, y'), \quad x \in [x_{\min}, x_{\max}].\tag{2}$$

Jeśli natomiast znane są tylko wartości na „końcach” przedziału:

$$y(x_{\min}) = A, \quad y(x_{\max}) = B,\tag{3}$$

to mówimy o warunkach brzegowych. Kłopot stanowi brak znajomości wartości pierwszej pochodnej w punkcie początkowym, potrzebnej do obliczenia kolejnych wyrazów, tzn.:

$$y'(x_{\min}) = \alpha = ?,\tag{4}$$

szczególnie gdy problem (2) jest dyskretyzowany i opisywany numerycznie za pomocą wzorów rekurencyjnych, co sprawia, że kolejne wyrazy nie mogą być wyliczone. Powstaje wówczas pytanie co podstawić za niewiadomą α .

*Zakładamy, że wszystkie warunki na istnienie takiej pochodnej są spełnione (np. ciągłość funkcji, odpowiedni przedział: $-\infty < x_{\min} < x_{\max} < \infty$, etc).

Jeśli dane jest analityczne rozwiązanie, to na jego podstawie można obliczyć wartość owego parametru; jednak w praktyce najczęściej nie jest ono znane, a nawet gdyby było, to nie gwarantuje ono poprawności wyników. Ma poza tym wadę – błędy kumulują się z każdą iteracją (*innymi słowy: błąd narasta liniowo*). Co prawda zagęszczenie siatki mogłoby rozwiązać ten problem, lecz istnieją sytuacje, które zabraniają takiego kroku. Wówczas posłużyć się można jedną z metod dedykowanych dla takich problemów.

Metoda shootingu polega na „strzeleniu” wartości nieznanego parametru α tak, aby spełnić „prawy” warunek brzegowy:

$$y(x_{max}, \alpha) = B, \quad (5)$$

co można zapisać jako:

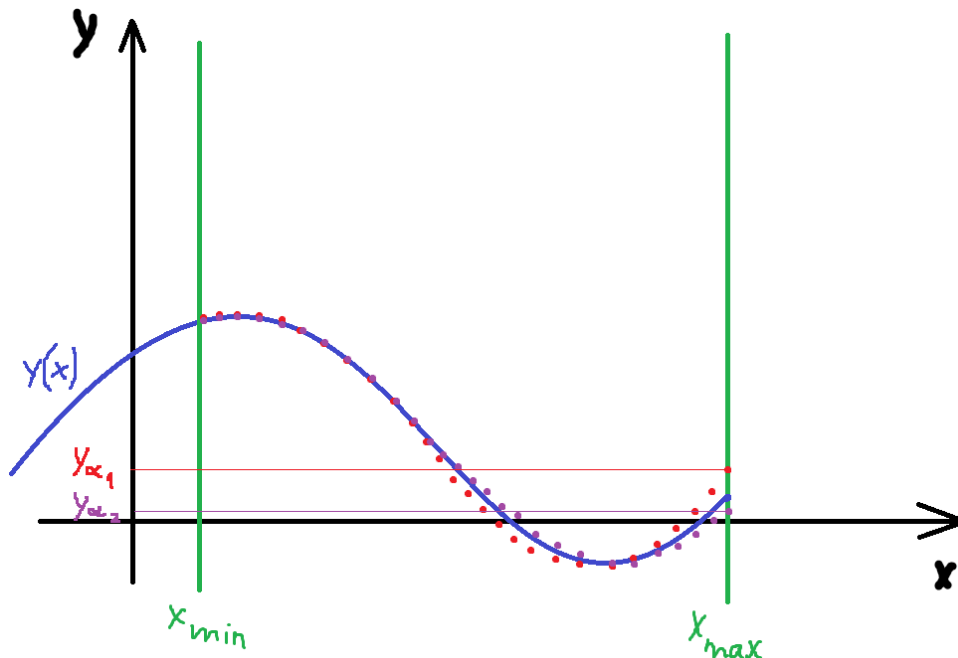
$$F(\alpha) = y(x_{max}, \alpha) - B = 0, \quad (6)$$

a więc problem sprowadza się do znalezienia miejsca zerowego funkcji F [1]. Znanych jest wiele podejść do szukania pierwiastków funkcji, które m. in. zostały omówione na przedmiocie *Metody Numeryczne*. Jedną z nich jest dobrze znana już metoda siecznych, której iteracyjny przepis na wartość pierwiastka wyrażony jest jako:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k) \cdot (x^k - x^{k-1})}{f(x^k) - f(x^{k-1})}, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (7)$$

Iteracje są wykonywane do czasu, aż różnice między kolejnymi znalezionymi wartościami są na tyle małe, że można je zaakceptować (zwykle $\varepsilon \simeq 10^{-6}$), tzn.:

$$|x^{k+1} - x^k| < \varepsilon. \quad (8)$$



Rysunek 1: Graficzna interpretacja **metody shootingu**. Niebieskim kolorem narysowana została szukana funkcja $y(x)$. Punkty odpowiadają dyskretnym wartościom szukanej funkcji dla zadanej wartości α . Czerwone punkty zostały wyznaczone dla parametru α_1 , natomiast fioletowe – dla α_2 .

Oznaczenia: $y_{\alpha_1} = f(x_{max}, \alpha_1)$, $y_{\alpha_2} = f(x_{max}, \alpha_2)$.

Metoda ta opiera się na znalezieniu – „ustzeleniu” (ang. *shoot*) odpowiedniej wartości α . Jej graficzna reprezentacja jej przedstawiona na rys. 1. Jak można z niego zauważyć:

$$y_{\alpha_2} < y(x_{max}) < y_{\alpha_1},$$

parametr α_1 przeszacował wartość funkcji na prawym brzegu, natomiast α_2 – niedoszacował.

Do rozwiązywania problemu można użyć **metody różnic skończonych**, która polega na zdyskretyzowaniu problemu i zastąpieniu pochodnych odpowiednim ilorazem różnicowym. W danych punktach (np. $x+\Delta x, x-\Delta x$) rozwija się funkcję w szereg Taylora, a następnie przekształca wzory tak, aby otrzymać zależności na szukane pochodne.

Podobnym podejściem jest zastosowanie **metody Numerova**, która sprawdza się dla liniowych równań różniczkowych 2. rzędu, w których nie występują pierwsze pochodne, o wzorze ogólnym:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + g(x)u(x) = S(x). \quad (9)$$

Polega ona na zwiększeniu dokładności – błąd wielkości $O((\Delta x)^6)$ – przybliżeń ilorazów różnicowych poprzez przybliżenie wyrażeniem zawierającym wyraz z czwartą pochodną, a następnie zastąpienie tej pochodnej ilorazem na drugą pochodną wyrażenia $S(x) - g(x)u(x)$. Jej podstawowa forma wygląda następująco:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} \cdot g(x + \Delta x)\right) \cdot u(x + \Delta x) - 2 \left(1 - \frac{5 \cdot (\Delta x)^2}{12} \cdot g(x)\right) \cdot u(x) + \\ & + \left(1 + \frac{(\Delta x)^2}{12} \cdot g(x - \Delta x)\right) \cdot u(x - \Delta x) = \\ & = \frac{(\Delta x)^2}{12} \cdot (S(x + \Delta x) + 10 \cdot S(x) + S(x - \Delta x)) + O((\Delta x)^6). \end{aligned} \quad (10)$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem było rozwiązanie problemu własnego określonego przez wzór (11) we współrzędnych cylindrycznych w 2D przy użyciu **metody różnic skończonych** oraz **metody Numerova**.

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r}) \quad (11)$$

Po odseparowaniu zmiennych stosując przejście na współrzędne cylindryczne oraz podstawiając $\Psi(r, \phi) = R(r) \cdot \exp(i \cdot l \cdot \phi)$, otrzymaliśmy równanie 1D:

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} \right) R(r) = E \cdot R(r) \quad (12)$$

z następującymi warunkami brzegowymi:

- $R(r = L) = 0$
- $\frac{\partial R}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \iff l = 0$
- $R(r = 0) = 0 \iff l \neq 0,$

gdzie $l \in \mathbb{Z}$ – moment pędu, które stanowiło punkt wyjścia do dalszych działań.

Rozwiązania równania (12) są znane – są to funkcje Bessela J (pierwszego rodzaju):

$$R_{dokl}(r) = J_{|l|} \left(\alpha_{l,p} \cdot \frac{r}{L} \right), \quad (13)$$

gdzie $\alpha_{l,p}$ to p -te zero funkcji Bessela dla momentu pędu l , które z kolei związane jest z energią:

$$E_{l,p} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\alpha_{l,p}}{L} \right)^2. \quad (14)$$

Zera te zostały podane w treści zadania.

W **metodzie różnic skończonych** pochodne zastąpiono ilorazami:

$$\frac{\partial R}{\partial r} = \frac{R_{i+1} - R_{i-1}}{2 \cdot \Delta r}, \quad \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} = \frac{R_{i+1} - 2 \cdot R_i + R_{i-1}}{(\Delta r)^2}. \quad (15)$$

Wprowadzając siatkę węzłów równoodległych $r_i = \Delta r \cdot i$, $i = 0, 1, \dots, n$, dyskretyzując problem przez zastąpienie pochodnych odpowiednimi ilorazami, otrzymano następujące zależności na kolejne wyrazy: dla **metody różnic skończonych** – równanie (16), natomiast dla **metody Numerova** – (17) (dla obu wzorów: $i = 1, \dots, n-1$).

$$\left(\frac{1}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i \cdot 2 \cdot \Delta r} \right) \cdot R_{i+1} = \left(\frac{2}{(\Delta r)^2} + \frac{l^2}{r_i^2} - 2 \cdot E \right) \cdot R_i + \left(-\frac{1}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i \cdot 2 \cdot \Delta r} \right) \cdot R_{i-1} \quad (16)$$

$$\left(1 + \frac{(\Delta r)^2}{12} \cdot g_{i+1} \right) \cdot U_{i+1} = 2 \left(1 - \frac{5 \cdot (\Delta r)^2}{12} \cdot g_i \right) \cdot U_i - \left(1 + \frac{(\Delta r)^2}{12} \cdot g_{i-1} \right) \cdot U_{i-1}, \quad (17)$$

gdzie

$$g_i = 2 \cdot E + \frac{1 - 4 \cdot l^2}{4 \cdot r_i^2}. \quad (18)$$

Uwaga! W równaniu (17) zastosowano podstawienie $U_i = R_i \cdot \sqrt{r_i}$, ponadto dla $i = 1$ zachodzi konieczność ręcznego wyzerowania wyrazu wyróżnionego **niebieskim** kolorem (wynika to z osobliwości, którą generuje wyraz g_0 – mnożenie przez $i = 0$ w mianowniku).

parametr	różn. skończ.	Numerov
moment pędu	$l = 0$	$l = 1$
warunki brzegowe	$R_0 = R_1 = 1$	$U_0 = 0, U_1 = 1$
numer ostatniego węzła	$n = 100$	
dokładność (metoda siecznych)	$\varepsilon = 10^{-6}$	
krok energii	$\Delta E = 0.2$	
odległość między węzłami	$\Delta r = 0.01$	
przedział energii	$E \in [\Delta E, 150]$	
długość siatki	$L = 1$	

Tabela 1: Parametry dane w treści zadania.

Dysponując metodami `bessj0` oraz `bessj1` z biblioteki *Numerical Recipes* (potrzebnymi do obliczenia wartości funkcji Bessela – wzór (13) – w celu porównania z wynikami otrzymanymi numerycznie), a także przedstawionymi w tabeli 1 parametrami, poszukiwaliśmy rozwiązania problemu własnego (11).

Ponieważ R związane jest z energią E (patrz: wzór (12)), zer można szukać pomiędzy węzłami spełniającymi zależność:

$$R_n(E) \cdot R_n(E + \Delta E) < 0. \quad (19)$$

Wzór (7) po adaptacji do owego problemu sprowadza się do:

$$E^{k+1} = E^k - \frac{R_n^k \cdot (E^k - E^{k-1})}{R_n^k - R_n^{k-1}}, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (20)$$

2.2 Wyniki

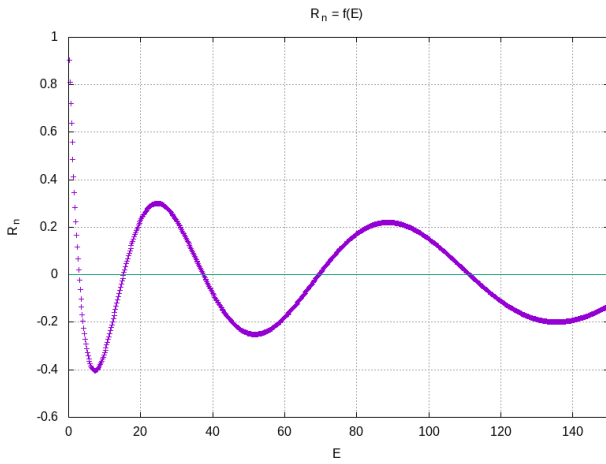
Wartość R dla ostatniego węzła została zapisana do pliku wraz z odpowiadającą jej energią dla obu użytych metod. Specjalnie przygotowany skrypt z pomocą programu Gnuplot umożliwił prezentację graficzną otrzymanych danych.

Uwaga! W przypadku **metody Numerova** konieczne było także unormowanie wartości tak, aby spełniony był warunek:

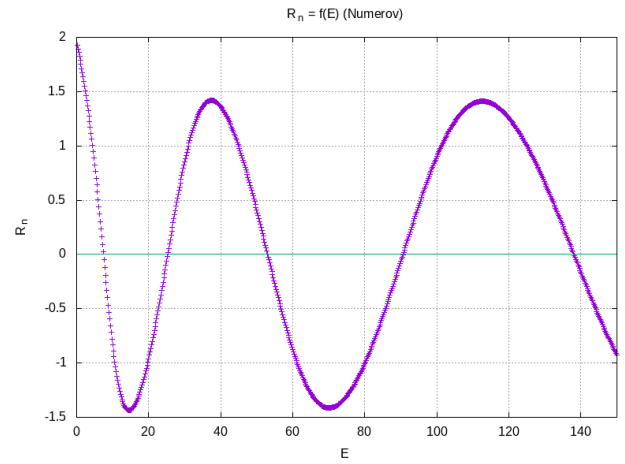
$$\int_0^L |R_{num}(r)|^2 \cdot r \cdot dr = \int_0^L |J_{1,p}(r)|^2 \cdot r \cdot dr = 1, \quad (21)$$

co sprowadziło się do korekty wartości elementów w tablicy poprzez podzielenie każdego o wartość \sqrt{norm} :

$$norm = \sum_{i=0}^n (R_i)^2 \cdot r_i \cdot \Delta r = \sum_{i=0}^n (R_i \cdot \Delta r)^2 \cdot i. \quad (22)$$



(a) metoda różnic skończonych



(b) metoda Numerova (po unormowaniu)

Rysunek 2: Wykresy zależności ostatniego węzła R_n oraz energii E dla obu metod.

Pierwsze cztery energie znalezione numerycznie oraz obliczone analitycznie dla obu metod zebrano w tabeli 2.

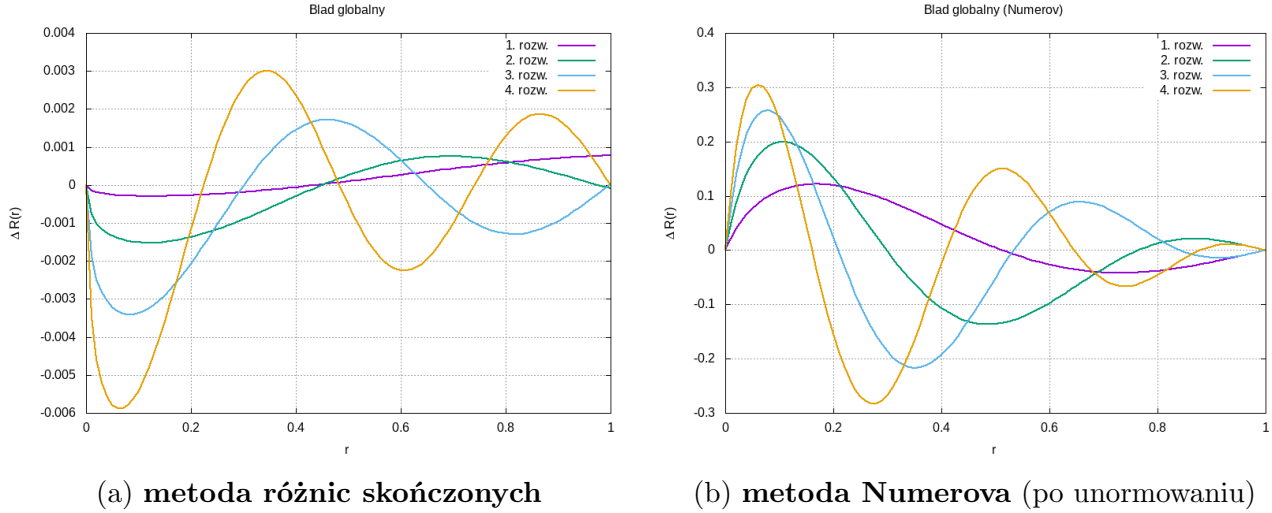
Dla znalezionych rozwiązań został obliczony błąd globalny:

$$\Delta R(r) = R_{dokl}(r) - R_{num}(r), \quad (23)$$

który został przedstawiony na rys. 3.

metoda różnic skończonych		metoda Numerova	
numeryczne	analityczne	numeryczne	analityczne
2.8953	2.8915	7.4601	7.3410
15.2360	15.2352	25.3107	24.6086
37.4329	37.4433	53.0316	51.7490
69.4711	69.5197	90.6203	88.7592

Tabela 2: Energie, dla których $R_n = 0$.



Rysunek 3: Błąd globalny $\Delta R(r)$ dla pierwszych czterech rozwiązań przedstawionych w tabeli 2.

3 Wnioski

- W zagadnieniach dotyczących rozwiązywania równań różniczkowych należy pamiętać i rozróżniać warunki początkowe od brzegowych.
- Metody **różnic skończonych** oraz **Numerova** to metody bazujące na przeniesieniu problemu na dyskretną dziedzinę oraz przybliżeniu pochodnych odpowiednimi ilorazami z różnymi dokładnościami. Są stosowane raczej tam, gdzie krok jest stały (jak w tym przypadku).
- Energie wyliczone numerycznie są bardzo bliskie wartościom analitycznym (patrz: tabela 2), co świadczy o efektywności użytych metod. Jednak w przypadku **metody Numerova** zwłaszcza dla kolejnych rozwiązań widać narastające różnice.
- Porównując wyniki uzyskane w tabeli 2 oraz wykresy z rys. 2 można dojść do wniosku, że zależności pomiędzy ostatnim węzłem R_n a energią E zostały poprawnie odtworzone – przynajmniej z dokładnością co do miejsc zerowych.
- Na rys. 3 widać, że błędy są rzędu 10^{-3} dla **metody różnic skończonych** oraz 10^{-1} dla **metody Numerova**. Zerowanie się różnic na prawym brzegu świadczy o poprawności obliczenia zer numerycznie dla obu metod, bowiem do tego warunku brzegowego dążono. Jednak oczekiwany był lepszy wynik w przypadku drugiej metody ze względu na jej wyższy rząd dokładności. Najprawdopodobniej wynika to z popełnienia jakiegoś błędu przy implementowaniu algorytmu.

4 Bibliografia

- [1] Jeffrey Chasnov. *Shooting Method for Boundary Value Problems — Lecture 57 — Numerical Methods for Engineers*. Youtube. 2021. URL: https://www.youtube.com/watch?v=qIfxydBEdzg&ab_channel=JeffreyChasnov.