Ordinary Differential Equations

Initial-Values Problems

1

Initial-Values Problems for ODE

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad , a \leq x \leq b \, , \qquad y(a) = \alpha \, .$$

- Euler's Method
- Higher – Order Taylor Methods
- Runge – Kutta Methods

2

Euler's Method

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad , a \le x \le b \, , \qquad y(a) = \alpha$$

- Selecting the mesh points:
  $x_i = a + ih$ for each $i = 0, 1, 2, \dots \, N$.
- Step size: $h = \frac{b-a}{N} = x_{i+1} - x_i$
- Taylor's Theorem:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + (x_{i+1} - x_i)y'(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} y''(\vartheta_i) \, ,$$
$$\vartheta_i \in (x_i, x_{i+1})$$

$$\rightarrow y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + \frac{h^2}{2} y''(\vartheta_i)$$

3

Euler's Method

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + hf(x_i, y(x_i))$$

- $y_i = y(x_i)$
- $y_0 = \alpha$
- $y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$, for each $i = 0, 1, 2, \dots \, N$

4

Euler's Method - Algorithm

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + \frac{h^2}{2} y''(\vartheta_i)$$

- Approximating the solution of the initial-value problem
$$y' = f(x, y) \quad , a \le x \le b \, , \qquad y(a) = \alpha$$
at $N + 1$ equally spaced numbers in the interval $[a, b]$:
- INPUT: a, b; integer N; initial condition α
- OUTPUT: y at the $(N + 1)$ values of x.

5

Euler's Method - Algorithm

INPUT: a, b; integer N; initial condition α
OUTPUT: y at the $(N + 1)$ values of x.

- Step 1 Set $h = (b - a)/N$;
  $x = a$;
  $y = \alpha$;
  OUTPUT (x, y).
- Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do Steps 3, 4.
  Step 3 Set $y = y + hf(x, y)$; (*Compute* y_i)
  $x = a + ih$. (*Compute* x_i)
  Step 4 OUTPUT (x, y).
- *Step 5* STOP

6

Thực hành nhỏ

- PT vi phân:

$$y' = y - x^2 + 1\,, 0 \le x \le 2\,, y(0) = 0.5$$

- Dùng EM để giải PT trên. Vẽ kết quả.
- Biết nghiệm giải tích: $y(x) = (x+1)^2 - 0.5e^x$. Hãy vẽ đồng thời kết quả số và kết quả từ nghiệm giải tích trên cùng đồ thị.

7

```
# Euler method Python code
# function
def f(x,y):
    return x+y
# or
# f = lambda x: x+y
# Euler method
def euler(x,y,b,N):
  h = (b-x)/N
  for i in range(N):
      y = y + h * f(x, y)
      x = x+h
      print('%.4f\t%.4f'% (x,y) )
      print('------------------------')
```

```
# Input
print('Enter initial conditions:')
a = float(input('a = '))
y0 = float(input('y0 = '))
print('Enter final point: ')
b = float(input('b = '))
print('Enter number of steps:')
N = int(input('N = ‘))
# Euler method call
euler(a,y0,b,N)
```

9

```
# Euler method Python code
# function
def f(x,y):
    return x+y    # your f(x,y)
# or
# f = lambda x: x+y
# Euler method
def euler(x,y,h,N):
for i in range(N):
        y = y + h * f(x, y)
        x = x+h
        print('%.4f\t%.4f'% (x,y) )
        print('-----------------------')
```

```
# Input
a = 0
y0 = 1.0
b = 1.0
N = 100
h = (b-a)/N
# Euler method call
euler(a,y0,h,N)
```

10

Higher-Order Taylor Methods

- Khai triển Taylor đến các số hạng bậc cao cho
- $y(x_{i+1}) = y(x_i) + hF^{(n)}\big(x_i, y(x_i)\big)$
- $F^{(n)}\big(x_i, y(x_i)\big) = f(x_i, y(x_i)) + \frac{h}{2} f'(x_i, y(x_i)) + \cdots + \frac{h^{n-1}}{n!} f^{(n-1)}(x_i, y(x_i))$
- Hoặc đặt $y(x_i) \equiv y_i$
- $y_{i+1} = y_i + hF^{(n)}(x_i, y_i)$
- $F^{(n)}(x_i, y_i) = f(x_i, y_i) + \frac{h}{2} f'(x_i, y_i) + \cdots + \frac{h^{n-1}}{n!} f^{(n-1)}(x_i, y_i)$
- Phải tính đạo hàm bậc cao!
- Euler method ứng với $n = 1$

12

Runge – Kutta Methods

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad , a \leq x \leq b \, , \qquad y(a) = \alpha$$

- Midpoint Method / Runge-Kutta Methods of Order Two [RK2]
- Modified Euler Method
- Heun Method / Runge-Kutta Methods of Order Three [RK3]
- Higher-Order Runge-Kutta Methods: RK4

Runge – Kutta Methods

Midpoint Method / RK2:

- $y_i \equiv y(x_i)$
- $y_0 = \alpha$
- $y_{i+1} = y_i + hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i)\right)$, for each $i = 0, 1, 2, \dots\ N - 1$

Modified Euler Method:

- $y_0 = \alpha$
- $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_i + hf(x_i, y_i))]$,
  for each $i = 0, 1, 2, \dots\ N - 1$

Runge – Kutta Methods

Heun Method [RK3] $\left(O\left(h^3\right)\right)$

- $y_0 = \alpha$

$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{4}\left[f(x_i, y_i) + 3f\left(x_i + \frac{2h}{3}, y_i + \frac{2h}{3} f\left(x_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{h}{3} f(x_i, y_i)\right)\right)\right]$

for each $i = 0, 1, 2, \ldots\ N-1$

$k_1 = hf(x_i, y_i)$
$k_2 = hf\left(x_i + \frac{h}{3}, y_i + \frac{1}{3}k_1\right)$
$k_3 = hf\left(x_i + \frac{2h}{3}, y_i + \frac{2}{3}k_2\right)$
$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{4}[k_1 + 3k_3]$

16

Runge – Kutta Methods

Runge – Kutta Order Four [RK4] $(O(h^4))$

- $y_0 = \alpha$
- $k_1 = hf(x_i, y_i)$
- $k_2 = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_1\right)$
- $k_3 = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_2\right)$
- $k_4 = hf(x_{i+1}, y_i + k_3)$

$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$ for each $i = 0, 1, 2, \ldots\ N-1$

17

RK4 - Algorithm

INPUT: a, b; integer N; initial condition α
OUTPUT: y at the $(N + 1)$ values of x

- Step 1 Set $h = (b - a)/N;$
  $x = a;$
  $y = \alpha;$
  OUTPUT (x, y).
- Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do Steps 3 – 5
- *Step 3* $k_1 = hf(x_i, y_i)$
  $k_2 = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_1\right)$
  $k_3 = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_2\right)$
  $k_4 = hf(x_{i+1}, y_i + k_3)$
- *Step 4 Set* $y = y + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$ *(Compute y_i)*
  $x = a + ih$ *(Compute x_i)*
  Step 5 OUTPUT (x, y).
- *Step 6* STOP

18

Thực hành

- Cho PT vi phân:
  $$y' = y - x^2 + 1\ , 0 \le x \le 2\ , y(0) = 0.5$$
- Dùng PP Midpoint, Modified Euler, RK3, RK4 để giải PT trên. Xuất dữ liệu ra file theo kiểu bảng. Vẽ kết quả.
- [Nghiệm giải tích: $y(x) = (x+1)^2 - 0.5e^x$]

20

Higher-Order Differential Equations [HODE] & Systems of Differential Equations [SoDE]

22

Systems of Differential Equations [SoDE]

$$\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1, \dots, y_m) \\ \dfrac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1, \dots, y_m) \\ \vdots \\ \dfrac{dy_m}{dx} = f_m(x, y_1, \dots, y_m) \end{cases}$$

$$a \le x \le b \, , y_j(a) = \alpha_j \ \ , j = 1, \dots, m$$

23

Euler Method for SoDE

- $y_{0,j} = \alpha_j$ for $j = 1, \dots, m$ [j : chỉ số chạy cho số phương trình của hệ (m)]

  $y_{i+1,j} = y_{i,j} + hf_j(x_i, y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,m})$ for each $j = 1, \dots, m$ [$*$]
- for each $i = 0, 1, 2, \dots N-1$ [i: chỉ số chạy theo khoảng chia thời gian]

24

Euler's Method - Algorithm

PT vi phân

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

INPUT: a, b; integer N; initial condition α
OUTPUT: y at the $(N + 1)$ values of x.

- Step 1 Set $h = (b-a)/N$;
  $x = a$;
  $y = \alpha$;
  OUTPUT (x, y).
- Step 2 For $i = 1, 2, \dots, N$ do Steps 3, 4.
  Step 3 Set $y = y + hf(x, y)$; (Compute y_i)
  $x = a + ih$. (Compute x_i)
  Step 4 OUTPUT (x, y).
- Step 5 STOP

Hệ PT vi phân (m phương trình)

$$y_{i+1,j} = y_{i,j} + hf_j(x_i, y_{i,1}, \dots, y_{i,m}); j = 1, 2, \dots, m$$

INPUT: a, b; integer N; initial condition α_j
OUTPUT: y_j at the $(N + 1)$ values of x.

- Step 1 Set $h = (b-a)/N$;
  $x = a$;
  For $j = 1, \dots, m$: $y_j = \alpha_j$;
  OUTPUT $(x, y_1, \dots, y_m)$.
- Step 2 For $i = 1, 2, \dots, N$ do Steps 3 – 4
  Step 3 For $j = 1, \dots, m$: Set $y_j = y_j + hf_j(x_i, y_{i,1}, \dots, y_{i,m})$
  $x = a + ih$
  Step 4 OUTPUT $(x, y_1, \dots, y_m)$.
- Step 5 STOP

25

“SoDE” dạng ma trận/ mảng

- Có thể viết hệ PT vi phân dưới dạng ma trận như sau

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \quad , \qquad a \le x \le b\, , \boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{\alpha}$$

- Cũng rất nên “ma trận hoá”, tức tạo mảng / array cho y và f trong code
- Gọi $\boldsymbol{y}$ và $\boldsymbol{f}$ là mảng [trong trường hợp này là mảng 1 chiều, tương tự 1 vector hoặc như 1 ma trận cột] với các thành phần $\{y_j\}$ (viết đầy đủ là $y_j(x)$, hoặc $y_j(x_i)$ nếu xét đến bước thời gian thứ i) và $\{f_j\}$ một cách tương ứng. PT [*] có thể được viết gọn thành

$$\boldsymbol{y}_{i+1} = \boldsymbol{y}_i + h\boldsymbol{f}(x_i, \boldsymbol{y}_i) \quad \text{or} \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + h\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$$

26

Euler’s Method - Algorithm

PT vi phân

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

INPUT: a, b; integer N; initial condition α
OUTPUT: y at the $(N + 1)$ values of x.

- Step 1 Set $h = (b - a)/N$;
  $x = a$;
  $y = \alpha$;
  OUTPUT (x, y).
- Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do Steps 3, 4.
  Step 3 Set $y = y + hf(x, y)$; (Compute y_i)
  $x = a + ih$. (Compute x_i)
  Step 4 OUTPUT (x, y).
- Step 5 STOP

Hệ PT vi phân (m phương trình) [dạng mảng]

$$\boldsymbol{y}_{i+1} = \boldsymbol{y}_i + h\boldsymbol{f}(x_i, \boldsymbol{y}_i)$$

INPUT: a, b; integer N; initial condition $\boldsymbol{\alpha}$
OUTPUT: $\boldsymbol{y}$ at the $(N + 1)$ values of x.

- Step 1 Set $h = (b - a)/N$;
  $x = a$;
  $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\alpha}$;
  OUTPUT $(x, \boldsymbol{y})$.
- Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do Steps 3 – 4
  Step 3 Set $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + h\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$
  $x = a + ih$
  Step 4 OUTPUT $(x, \boldsymbol{y})$.
- Step 5 STOP

Dùng ma trận/ mảng [màu đậm] cho $\boldsymbol{y}$ và $\boldsymbol{f}$ → code của SoDE có cấu trúc cơ bản giống hệt trường hợp 01 PT vi phân!

27

RK4 for SoDE

- $y_{0,j} = \alpha_j$ for $j = 1, \dots, m$
- $k_{1,j} = hf_j(x_i, y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,m})$ for each $j = 1, \dots, m$
- $k_{2,j} = hf_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i,1} + \frac{1}{2}k_{1,1}, y_{i,2} + \frac{1}{2}k_{1,2}, \dots, y_{i,m} + \frac{1}{2}k_{1,m}\right)$ for each $j = 1, \dots, m$
- $k_{3,j} = hf_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i,1} + \frac{1}{2}k_{2,1}, y_{i,2} + \frac{1}{2}k_{2,2}, \dots, y_{i,m} + \frac{1}{2}k_{2,m}\right)$ for each $j = 1, \dots, m$
- $k_{4,j} = hf_j(x_{i+1}, y_{i,1} + k_{3,1}, y_{i,1} + k_{3,2}, \dots, y_{i,m} + k_{3,m})$ for each $j = 1, \dots, m$

$$y_{i+1,j} = y_{i,j} + \frac{1}{6}\left[k_{1,j} + 2k_{2,j} + 2k_{3,j} + k_{4,j}\right] \text{ for each } j = 1, \dots, m$$

for each $i = 0, 1, 2, \dots N - 1$

RK4 – Algorithm SoDE

INPUT: a, b; integer N; initial conditions α_j
OUTPUT: y_j at the $(N + 1)$ values of x

- Step 1 Set $h = (b - a)/N$;
  $x = a$;
  For $j = 1, 2, \dots, m$: $y_j = \alpha_j$;
  OUTPUT (x, y_j).
- Step 2 For $i = 1, 2, \dots, N$ do Steps 3 – 5
- *Step 3* For $j = 1, \dots, m$: $k_{1,j} = hf_j(x_i, y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,m})$
  For $j = 1, \dots, m$: $k_{2,j} = hf_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i,1} + \frac{1}{2}k_{1,1}, y_{i,2} + \frac{1}{2}k_{1,2}, \dots, y_{i,m} + \frac{1}{2}k_{1,m}\right)$
  For $j = 1, \dots, m$: $k_{3,j} = hf_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i,1} + \frac{1}{2}k_{2,1}, y_{i,2} + \frac{1}{2}k_{2,2}, \dots, y_{i,m} + \frac{1}{2}k_{2,m}\right)$
  For $j = 1, \dots, m$: $k_{4,j} = hf_j(x_{i+1}, y_{i,1} + k_{3,1}, y_{i,2} + k_{3,2}, \dots, y_{i,m} + k_{3,m})$
- *Step 4* For $j = 1, \dots, m$: *Set* $y_j = y_j + \frac{1}{6}\left[k_{1,j} + 2k_{2,j} + 2k_{3,j} + k_{4,j}\right]$ *(Compute $y_{i,j}$)*
  $x = a + ih$ *(Compute x_i)*
  Step 5 OUTPUT (x, y_j).
- *Step 6* STOP

RK4 for SoDE [dạng ma trận/ mảng]

<table>
<tr>
<td>

- $\boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{\alpha};$
- $\boldsymbol{k}_1 = h\boldsymbol{f}(x_i, \boldsymbol{y}_i)$
- $\boldsymbol{k}_2 = h\boldsymbol{f}\left(x_i + \frac{h}{2}, \boldsymbol{y}_i + \frac{1}{2}\boldsymbol{k}_1\right)$
- $\boldsymbol{k}_3 = h\boldsymbol{f}\left(x_i + \frac{h}{2}, \boldsymbol{y}_i + \frac{1}{2}\boldsymbol{k}_2\right)$
- $\boldsymbol{k}_4 = h\boldsymbol{f}(x_i + h, \boldsymbol{y}_i + \boldsymbol{k}_3)$

$\boldsymbol{y}_{i+1} = \boldsymbol{y}_i + \frac{1}{6}[\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4]$

for each $i = 0, 1, 2, \ldots\ N - 1$

</td>
<td>Hoặc kiểu viết khác $\Leftrightarrow$</td>
<td>

- $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{\alpha};$
- $\boldsymbol{k}_1 = h\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$
- $\boldsymbol{k}_2 = h\boldsymbol{f}\left(x + \frac{h}{2}, \boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\boldsymbol{k}_1\right)$
- $\boldsymbol{k}_3 = h\boldsymbol{f}\left(x + \frac{h}{2}, \boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\boldsymbol{k}_2\right)$
- $\boldsymbol{k}_4 = h\boldsymbol{f}(x + h, \boldsymbol{y} + \boldsymbol{k}_3)$

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + \frac{1}{6}[\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4]$

for each $i = 0, 1, 2, \ldots\ N - 1$

</td>
</tr>
</table>

31

RK4 – Algorithm SoDE [dùng ma trận/ mảng]

INPUT: a, b; integer N; initial conditions $\boldsymbol{\alpha}$

OUTPUT: $\boldsymbol{y}$ at the $(N + 1)$ values of x

- Step 1 Set $h = (b - a)/N;$
  $x = a;$
  $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\alpha};$
  OUTPUT $(x, \boldsymbol{y})$.
- Step 2 For $i = 1, 2, \ldots, N$ do Steps 3 – 5
- Step 3 $\boldsymbol{k}_1 = h\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$
  $\boldsymbol{k}_2 = h\boldsymbol{f}\left(x + \frac{h}{2}, \boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\boldsymbol{k}_1\right)$
  $\boldsymbol{k}_3 = h\boldsymbol{f}\left(x + \frac{h}{2}, \boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\boldsymbol{k}_2\right)$
  $\boldsymbol{k}_4 = h\boldsymbol{f}(x + h, \boldsymbol{y} + \boldsymbol{k}_3)$
- Step 4 *Set* $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + \frac{1}{6}[\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4]$ (*Compute* $\boldsymbol{y}$)
  $x = a + ih$ (*Compute* x_i)
  Step 5 OUTPUT $(x, \boldsymbol{y})$.
- Step 6 STOP

Nếu sử dụng ma trận/ mảng [màu đậm] cho $\boldsymbol{y}$ và $\boldsymbol{f}$, tức là cần khai báo mảng khi lập trình, thì code RK4 của SoDE có cấu trúc cơ bản giống y trường hợp 01 PT vi phân!

32

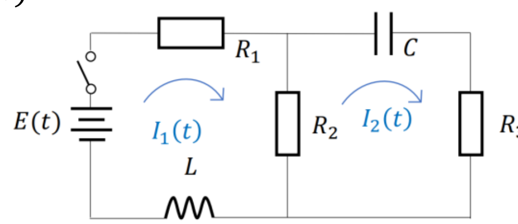
“Kirchhoff’s Law” cho mạch điện

- “Kirchhoff’s Law” cho mạch điện kín: Dòng điện $I(t)$ trong mạch đóng gồm trở R, tụ C, cuộn dây L và nguồn thế $E(t)$ được cho bởi:

$$LI'(t) + RI(t) + \frac{1}{C}\int I(t)dt = E(t)$$

- Áp dụng Kirchhoff’s Law cho mạch điện

$$E(t) = 12\text{V}, L = 2\text{H}, C = 0.5\text{F},$$
$$R_1 = 2\Omega\, , R_2 = 6\Omega\, , R_3 = 4\Omega.$$



- Ta được hệ phương trình vi tích phân:

$$2I_1'(t) + 2I_1(t) + 6[I_1(t) - I_2(t)] = 12$$

$$\frac{1}{0.5}\int I_2(t)dt + 4I_2(t) + 6[I_2(t) - I_1(t)] = 0$$

“Kirchhoff’s Law” cho mạch điện

$$2I_1'(t) + 2I_1(t) + 6[I_1(t) - I_2(t)] = 12$$

$$\frac{1}{0.5}\int I_2(t)dt + 4I_2(t) + 6[I_2(t) - I_1(t)] = 0$$

- Giả sử mạch điện đóng mạch tại thời điểm $t = 0$.
- Khi đó, $I_1(0) = I_2(0) = 0$. Xét $0 \leq t \leq 1$.
- Có thể biến đổi hệ PT vi tích phân thành hệ phương trình vi phân:

$$I_1'(t) = f_1(t, I_1, I_2) = -4I_1(t) + 3I_2(t) + 6$$
$$I_2'(t) = f_2(t, I_1, I_2) = -2.4I_1(t) + 1.6I_2(t) + 3.6$$

- Hãy giải hệ phương trình trên bằng phương pháp RK4 và MEM.
Vẽ đồ thị $I_1(t)$ và $I_2(t)$.

"Kirchhoff's Law" cho mạch điện

- Hãy giải hệ phương trình trên bằng phương pháp RK4 và MEM. Vẽ đồ thị $I_1(t)$ và $I_2(t)$.
- So sánh (trên cùng đồ thị) với nghiệm giải tích

  $I_1(t) = -3.375e^{-2t} + 1.875e^{-0.4t} + 1.5$

  $I_2(t) = -2.25e^{-2t} + 2.25e^{-0.4t}$

Higher-Order Differential Equations

- Xét bài toán PT vi phân bậc cao

$$y^{(m)}(x) = f\left(x, y', y'', \dots, y^{(m-1)}\right) \ [*]$$

- với $a \le x \le b$ và các điều kiện ban đầu

$$y(a) = \alpha_1, y'(a) = \alpha_2, \dots, y^{(m-1)}(a) = \alpha_m$$

- Đặt $u_1(x) = y(x), u_2(x) = y'(x), \dots, u_m(x) = y^{(m-1)}(x)$. Khi đó PT [*] thành

$$\frac{du_1}{dx} = \frac{dy}{dx} = u_2(x), \frac{du_2}{dx} = \frac{dy'}{dx} = u_3(x), \dots, \frac{du_{m-1}}{dx} = \frac{dy^{(m-2)}}{dx} = u_m(x)$$

$$\frac{du_m}{dx} = \frac{dy^{(m-1)}}{dx} = f(x, u_1, u_2, \dots, u_m)$$

- với điều kiện ban đầu: $u_1(a) = \alpha_1, u_2(a) = \alpha_2, \dots, u_m(a) = \alpha_m$.

HODE $\rightarrow$ SoDE

PT vi phân bậc cao [HODE]

$$y^{(m)}(x) = f\left(x, y', y'', \dots, y^{(m-1)}\right)$$

với $a \le x \le b$ và đk ban đầu

$$y(a) = \alpha_1,$$
$$y'(a) = \alpha_2, \dots,$$
$$y^{(m-1)}(a) = \alpha_m$$

$$u_1(x) \equiv y(x),$$
$$u_2(x) \equiv y'(x),$$
$$\dots$$
$$u_m(x) \equiv y^{(m-1)}(x)$$

$$\Longleftrightarrow$$

Hệ PT vi phân [SoDE]

$$\frac{du_1}{dx} = u_2(x),$$
$$\frac{du_2}{dx} = u_3(x),$$
$$\dots$$
$$\frac{du_{m-1}}{dx} = u_m(x),$$
$$\frac{du_m}{dx} = f(x, u_1, u_2, \dots, u_m)$$

với $u_1(a) = \alpha_1, u_2(a) = \alpha_2, \dots,$ $u_m(a) = \alpha_m$. $a \le x \le b$.

40

Thực hành: Bài toán Con lắc [Pendulum]

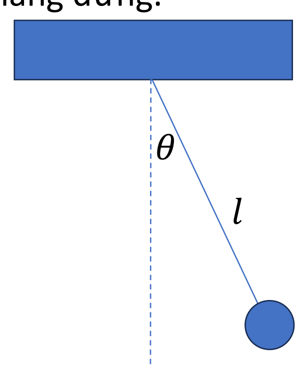
- Con lắc có dây dài l dao động tạo góc θ so với phương thẳng đứng.
- PT chuyển động của con lắc [một cách gần đúng]:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\sin\theta = 0 \;\; [1]$$

- Tại thời điểm ban đầu $\theta(t_0) = \theta_0$ và vận tốc góc là $\theta'(t_0) = \theta'_0$.
- Đối với góc quay đủ nhỏ, PT [1] có dạng

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\theta = 0 \;\; [2]$$

- Áp dụng RK4 để giải PT [1], [2]. Giả sử $\theta_0 = \pi/6$, $\theta'_0 = 0$; $l = 60cm$. So sánh [vẽ đồ thị $\theta(t)$] các kết quả.



41

Phương trình của con lắc

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\theta = 0$$
$$\theta(t_0 = 0) = \theta_0$$
$$\theta'(t_0) = \theta'_0$$

- Đặt

$$y_1 = \theta(t),$$
$$y_2 = \frac{d\theta}{dt}.$$

$\Longleftrightarrow$

- Hệ PTVP cho con lắc :

$$\frac{dy_1}{dt} = f_1 = y_2\,,$$
$$\frac{dy_2}{dt} = f_2 = -\frac{g}{l}y_1,$$
$$\Leftrightarrow \frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y})$$

- ĐK:

$$y_{01} = \theta(0) = \theta_0$$
$$y_{02} = \theta'(0) = \theta'_0$$

42

Thực hành: Bài toán "đạn pháo/ ném xiên"

- Hãy xét bài toán đạn pháo/ném xiên quen thuộc bạn đã biết. Chuyển đổi bài toán thành hệ phương trình vi phân. Viết ra hệ phương trình vi phân này.
- Áp dụng RK4 để giải hệ PT. Hãy tự chọn các điều kiện ban đầu một cách hợp lý.
- Vẽ quỹ đạo của đạn pháo theo các góc bắn khác nhau.
- Hãy xét thêm lực cản [ma sát/ frictional] $\boldsymbol{f}$. Giả sử $\boldsymbol{f}$ [đậm≡vector] có dạng:

$$\boldsymbol{f} = -km|v|^n \frac{\boldsymbol{v}}{|v|}$$

- $-\frac{\boldsymbol{v}}{|v|}$ nghĩa là lực ma sát này luôn ngược chiều với [vector] vận tốc. $n = 1$ cho trường hợp vận tốc nhỏ; $n = 3/2$ cho vận tốc trung bình; và $n = 2$ vận tốc cao.
- Dẫn ra hệ PT vi phân cho đạn pháo với lực cản này. Giải PT và vẽ đồ thị. Xem xét 03 trường hợp của n. Giả sử $k = 0.8$.

43

Phương trình của đạn pháo

- Đạn pháo có vận tốc bạn đầu V_0 và góc ném θ. PT chuyển động cho toạ độ và vận tốc:

$$x(t) = V_{0x}t \ , \qquad y(t) = V_{0y}t - \frac{1}{2}gt^2 \ ,$$
$$v_{0x}(t) = V_{0x} \ , \qquad v_{0y}(t) = V_{0y} - gt \ ,$$

- với $\left(V_{0x}, V_{0y}\right) = V_0(\cos\theta\,, \sin\theta)$.
- → PT quỹ đạo

$$y = \frac{V_{0y}}{V_{0x}}x - \frac{g}{2V_{0x}^2}x^2.$$

- Khoảng cách $\mathrm{R} = 2V_0^2\cos\theta\,\sin\theta\,/g$ và độ cao $\max\mathrm{H} = V_0^2\sin^2\theta/(2g)$

44

Phương trình của đạn pháo với ma sát

- Định luật II Newton cho đạn pháo với lực ma sát $\boldsymbol{f}$ và lực hấp dẫn $-mg\boldsymbol{e}_y$:

$$m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = \boldsymbol{f} - mg\boldsymbol{e}_y$$
$$\Rightarrow m\frac{d^2x}{dt^2} = f_x \ , \qquad m\frac{d^2y}{dt^2} = f_y - mg$$

- Với $\boldsymbol{f} = -km|v|^n\frac{\boldsymbol{v}}{|v|}$ → Hệ PT chuyển động cho đạn pháo

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -k|v|^n\frac{v_x}{|v|}, \frac{d^2y}{dt^2} = -k|v|^n\frac{v_y}{|v|} - g \ ; |v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}\,.$$

- $g = 9.8m/s^2\,, k = 0.8$
- Hãy thử thay $|v|^n$ → $\boldsymbol{v}^n$: $\frac{d^2x}{dt^2} = -kv_x^n\frac{v_x}{|v|}, \frac{d^2y}{dt^2} = -kv_y^n\frac{v_y}{|v|} - g$. Nhận xét.

45

Phương trình của đạn pháo với ma sát

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -k|v|^n \frac{v_x}{|v|}\,,$$
$$\frac{d^2y}{dt^2} = -k|v|^n \frac{v_y}{|v|} - g.$$
$$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$$

- Đặt

$$y_1 = x(t),\quad y_2 = \frac{dx}{dt}\,,\quad y_3 = y(t),\quad y_4 = \frac{dy}{dt}.$$

$\Longleftrightarrow$

Hệ PTVP cho đạn pháo với ma sát:

$$\frac{dy_1}{dt} = f_1 = y_2\,,$$
$$\frac{dy_2}{dt} = f_2 = -k(y_2^2 + y_4^2)^{(n-1)/2} y_2\,,$$
$$\frac{dy_3}{dt} = f_3 = y_4\,,$$
$$\frac{dy_4}{dt} = f_2 = -k(y_2^2 + y_4^2)^{(n-1)/2} y_4 - g$$
$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dt} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y})$$

- ĐK ban đầu:

$$V_0 = \cdots,\quad V_{0x} = V_0\cos\theta\,,\quad V_{0y} = V_0\sin\theta\,,$$
$$y_1 = x(0) = 0,\quad y_2 = V_{0x},\quad y_3 = y(0) = 0,\quad y_4 = V_{0y}$$

46

Phương trình của đạn pháo với ma sát

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -kv_x^n \frac{v_x}{|v|}\,,$$
$$\frac{d^2y}{dt^2} = -kv_y^n \frac{v_y}{|v|} - g.$$
$$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$$

- Đặt

$$y_1 = x(t),\quad y_2 = \frac{dx}{dt}\,,\quad y_3 = y(t),\quad y_4 = \frac{dy}{dt}.$$

$\Longleftrightarrow$

- Hệ PTVP cho đạn pháo với ma sát:

$$\frac{dy_1}{dt} = f_1 = y_2\,,$$
$$\frac{dy_2}{dt} = f_2 = -ky_2^n \frac{y_2}{\sqrt{y_2^2 + y_4^2}}\,,$$
$$\frac{dy_3}{dt} = f_3 = y_4\,,$$
$$\frac{dy_4}{dt} = f_2 = -ky_4^n \frac{y_4}{\sqrt{y_2^2 + y_4^2}} - g$$
$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dt} = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y})$$

- ĐK ban đầu:

$$V_0 = \cdots,\quad V_{0x} = V_0\cos\theta\,,\quad V_{0y} = V_0\sin\theta\,,$$
$$y_1 = x(0) = 0,\quad y_2 = V_{0x},\quad y_3 = y(0) = 0,\quad y_4 = V_{0y}$$

47

Semiconductor Bloch Equations

- SBE trong gần đúng hiện tượng luận

$$\frac{\partial f_{j,\boldsymbol{k}}(t)}{\partial t} = -2Im\left[\Omega_{\boldsymbol{k}}^{R}(t)p_{\boldsymbol{k}}^{*}(t)\right]$$

$$\frac{\partial p_{\boldsymbol{k}}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left[e_{e,\boldsymbol{k}}(t) + e_{h,\boldsymbol{k}}(t)\ \right]p_{\boldsymbol{k}}(t) + i\left[1 - f_{e,\boldsymbol{k}}(t) - f_{h,\boldsymbol{k}}(t)\right]\Omega_{\boldsymbol{k}}^{R}(t) - \frac{p_{\boldsymbol{k}}(t)}{T_2}$$

- Chuyển sang năng lượng

$$\frac{\partial f_{j,\varepsilon}(t)}{\partial t} = -2Im[\Omega_{\varepsilon}^{R}(t)p_{\varepsilon}^{*}(t)]$$

$$\frac{\partial p_{\varepsilon}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\varepsilon - \Delta_0 - E_{\varepsilon}]p_{\varepsilon}(t) + i\left[1 - f_{e,\varepsilon}(t) - f_{h,\varepsilon}(t)\right]\Omega_{n}^{R}(t) - \frac{p_{\varepsilon}(t)}{T_2}$$

Semiconductor Bloch Equations

- Với

$$E_{\varepsilon} = \frac{\sqrt{E_R}}{\pi}\int_0^{\infty} d\varepsilon_1\, g(\varepsilon, \varepsilon_1)\left[f_{e,\varepsilon_1}(t) + f_{h,\varepsilon_1}(t)\right]$$

$$\Omega_{n}^{R}(t) = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\frac{\hbar\sqrt{\pi}}{\delta t}\chi_0 e^{-\frac{t^2}{\delta t^2}} + \frac{\sqrt{E_R}}{\pi}\int_0^{\infty} d\varepsilon_1\, g(\varepsilon, \varepsilon_1)p_{\varepsilon_1}(t)\right]$$

- Xin xem file project-SBE-T2t-2024-2025.pdf để biết/hiểu rõ tính toán chi tiết!

Semiconductor Bloch Equations

- SBE rời rạc hoá: $\varepsilon = n\Delta\varepsilon$, $n = 1, \dots, N$; $\Delta\varepsilon = \frac{\varepsilon_{max}}{N}$, $\varepsilon_{max} = 300$ meV.

$$\frac{\partial f_{j,n}(t)}{\partial t} = -2Im[\Omega_n^R(t)p_n^*(t)]$$

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[n\Delta\varepsilon - \Delta_0 - E_n]p_n(t) + i[1 - 2f_n(t)]\Omega_n^R(t) - \frac{p_n(t)}{T_2}$$

- Trong đó

$$E_n = \frac{\sqrt{E_R}}{\pi}\Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^{N} g(n, n_1)\left[f_{e,n_1}(t) + f_{h,n_1}(t)\right], \text{với } g(n, n_1) = \frac{1}{\sqrt{n\Delta\varepsilon}}\ln\left|\frac{\sqrt{n} + \sqrt{n_1}}{\sqrt{n} - \sqrt{n_1}}\right|.$$

$$\Omega_n^R(t) = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\frac{\hbar\sqrt{\pi}}{\delta t}\chi_0 e^{-\frac{t^2}{\delta t^2}} + \frac{\sqrt{E_R}}{\pi}\Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^{N} g(n, n_1)\, p_{n_1}(t)\right]$$

50

Semiconductor Bloch Equations

Các tham số 'input'

- ĐK ban đầu: $f_{e,n}(t = t_0) = f_{h,n}(t = t_0) = 0$; $p_n(t = t_0) = 0$, $t_0 = -3 \times \delta t$ (δt là bề rộng xung laser)
- $\chi_0 = 0.1, \dots, 2$; $\delta t = 25$ fs ; Δ_0= 30meV; $dt = 2$fs; $t_{max} = 500$fs
- $N = 100$, $\Delta\varepsilon = \frac{\varepsilon_{max}}{N}$, $\varepsilon_{max} = 300$ meV
- $a_0 \approx 125$ Å , $E_R = 4.2$ meV .
- $\hbar = 658.5$ meV fs ($1fs = 10^{-15}s$)
- $T_2 = 200$fs

51

Semiconductor Bloch Equations – “Strategy”

- Chiến lược để lập trình cho SBE

$$\frac{\partial f_{j,n}(t)}{\partial t} = -2Im[\Omega_n^R(t)p_n^*(t)]$$

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[n\Delta\varepsilon - \Delta_0 - E_n]p_n(t) + i[1 - f_{e,n}(t) - f_{h,n}(t)]\Omega_n^R(t) - \frac{p_n(t)}{T_2}$$

- Ma trận/ Mảng hoá: Gọi $\boldsymbol{Y}$ là số phức với mảng $[2, N]$ (2 cột N hàng). Đặt $Y[1,n] = f_{e,n}(t) + if_{h,n}(t)$, →phần thực của $Y[1,n]$ là $f_{e,n}(t)$, phần ảo là $f_{h,n}(t)$; $Y[2,n] = p_n(t)$. $n = 1, \dots, N$
- SBE trở thành: [$\boldsymbol{F}$ là mảng $2 \times N$]

$$\frac{\partial \boldsymbol{Y}}{\partial t} = \boldsymbol{F}(t, \boldsymbol{Y}) \ \ \text{[code RK4 y như 1 chiều!]}$$

- Tất nhiên, khi đó bạn cần def hàm cho mảng $\boldsymbol{F}$, chẳng hạn như

For $n = 1 \dots N$: [cần nhớ khai báo mảng cho $\boldsymbol{F}$]

$$\boldsymbol{F}_{1,n} = -2Im\left[\Omega_n^R(\boldsymbol{Y})Y_{2,n}^*\right]$$

$$\boldsymbol{F}_{2,n} = -\frac{i}{\hbar}[n\Delta\varepsilon - \Delta_0 - E_n(\boldsymbol{Y})]Y_{2,n} + i\left[1 - Re[Y_{1,n}] - Im[Y_{1,n}]\right]\Omega_n^R(\boldsymbol{Y}) - \frac{Y_{2,n}}{T_2}$$

Return $\boldsymbol{F}$

52

Semiconductor Bloch Equations – “Strategy”

- Bạn cần/nên thêm 2 def cho 2 hàm $E_n(\boldsymbol{Y})$ và $\Omega_n^R(\boldsymbol{Y})$ để gọi ra khi tính $\boldsymbol{F}$ ở slides trước
- Def $E_n(\boldsymbol{Y})$ ...

$$E_n = \frac{\sqrt{E_R}}{\pi}\Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^{N} g(n, n_1)\left[Re[Y_{1,n_1}] + Im[Y_{1,n_1}]\right], \text{với } g(n, n_1) = \frac{1}{\sqrt{n\Delta\varepsilon}} \ln\left|\frac{\sqrt{n} + \sqrt{n_1}}{\sqrt{n} - \sqrt{n_1}}\right|$$

...

- Def $\Omega_n^R\ (\boldsymbol{Y})$ ...

$$\Omega_n^R = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\frac{\hbar\sqrt{\pi}}{\delta t}\chi_0 e^{-\frac{t^2}{\delta t^2}} + \frac{\sqrt{E_R}}{\pi}\Delta\varepsilon \sum_{n_1=1}^{N} g(n, n_1)\, Y_{2,n_1}\right]$$

...

- Cũng nên def hàm riêng cho $g(n, n_1)$ để gọn hơn và dễ dàng “kiểm soát”.

53

Semiconductor Bloch Equations – "Strategy"

- Hãy tạo files và lưu/'write' kết quả vào files để thuận tiện sử dụng khi cần. 'Write' theo cấu trúc bảng, ví dụ:
- Write ε, t , $\mathrm{Re}[Y_{1,\varepsilon}]$, $\mathrm{Im}[Y_{1,\varepsilon}]$, $\left|Y_{2,\varepsilon}\right|$
- Chú ý format cho hợp lý.
- Write $t, N(t), |P(t)|$

54