Przykład układu równań I-rzędu:

równanie Newtona dla punktu o masie M poruszającego się w jednym wymiarze pod wpływem sił:

- **harmonicznej** $-M\omega^2 x(t)$
- **tarcia** $-Mg\dot{x}(t)$
- **zewnętrznej, stałej** F

$$M\ddot{x}(t) = -M\omega^2 x(t) - Mg\dot{x}(t) + F$$

równoważne

$$\dot{v}(t) = -\omega^2 x(t) - gv(t) + F / M$$
$$\dot{x}(t) = 0 \cdot x(t) + v(t)$$

z warunkami początkowymi (jednopunktowymi):

$$x(t_0) = x_0, \qquad v(t_0) = v_0$$

... i analogicznie dla większej liczby równań ...

Dwupunktowe warunki brzegowe

- **przynajmniej 1 równanie II-rzędu lub 2 równania I-rzędu**

ogólnie:

$$\frac{df_i(x)}{dx} = g_i(x, f_1, f_2, \ldots, f_N), \qquad i = 1,2,\ldots,N$$

w x_1

$$B_{1j}(x_1, f_1(x_1), \ldots, f_N(x_1)) = 0, \qquad j = 1,\ldots,n_1$$

a w x_2

$$B_{2k}(x_2, f_1(x_2), \ldots, f_N(x_2)) = 0, \qquad k = 1,\ldots,n_2$$

i

$n_1 + n_2 = N$ **- ilość warunków brzegowych**

= ilości stałych jednoznacznie określających

rozwiązanie:

$$\left[\, f_1(x), f_2(x), \ldots f_N(x) \right]$$

w przedziale $\left[x_1, x_2 \right]$

przykład warunków brzegowych dla 2 równań

I-rzędu (jednego równania II-rzędu)

$$\frac{d^2 f_1(x)}{dx^2} = g_2(x, f_1(x), f_1^{/}(x)), \qquad f_1(x_1) = y_1, \qquad f_1(x_2) = y_2$$

$$B_{11} = 0 \Leftrightarrow f_1(x_1) - y_1 = 0$$

$$B_{21} = 0 \Leftrightarrow f_1(x_2) - y_2 = 0$$

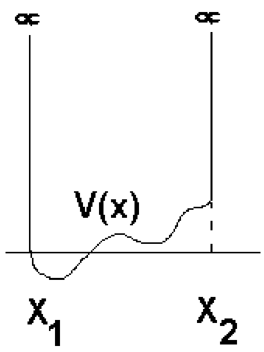
równoważne

$$\frac{df_1(x)}{dx} = g_1(x, f_1, f_2), \qquad g_1 = 1 \cdot f_2(x), \qquad f_2 = f_1^{/}$$

$$\frac{df_2(x)}{dx} = g_2(x, f_1, f_2),$$

przykład:

równanie Schroedingera dla cząstki w studni potencjału



$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\psi(x)$$

równoważne 2 równaniom I-rzędu

dla $\psi(x)$ $\quad i \quad$ $\psi_2(x) = \psi'(x)$

z warunkami brzegowymi

$$\psi(x_1) = 0, \qquad \psi(x_2) = 0$$ **czyli**

$$B_{11} = 0, \qquad B_{21} = 0$$

dodatkowo trzeba znaleźć E **, dla którego równanie ma rozwiązanie przy zadanych war. brzegowych**

redukcja zagadnienia własnego do problemu brzegowego:

traktujemy E **jako dodatkową funkcję** ψ_3 **;**

równanie na ψ_3 **:**

$$\frac{d\psi_3}{dx} = 0$$

Metoda strzału

n_1 warunków brzegowych w x_1 =>

zatem

$n_2 = N - n_1$ "wolnych startowych wartości"

inaczej -

n2 stopni swobody w określeniu wartości

$$f_i(x_1), \qquad i = 1,2,\dots N$$

... to mogą być np. wartości $f_i(x_1)$ dla $i=n_1+1, n_1+2, .., N$

... lub jakiekolwiek inne albo ich kombinacje...

oznaczmy te "swobodne" parametry

jako składowe pewnego wektora V

$$f_i(x_1; v_1, v_2, \dots v_{n_2}), \qquad i = 1,2,\dots N$$

(to mogą być np. wartości $f_i(x_1)$ dla

$i = n_1 + 1, \dots, N$)

rozwiązując numerycznie układ równań

od x_1 do x_2 dla wybranych wartości parametrów

V_1, V_2, ... V_{n2}

tzn. mając określone wszystkie wartości np.,

$f_i(x_1)$ **, i = 1,2,..., N**

dowolną wcześniej poznaną metodą (np. met. Eulera)

otrzymamy w x_2 wartości $f_i\,(x_2)$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1(x_2) \\ f_2(x_2) \\ \ldots \\ f_N(x_2) \end{bmatrix}$$

ponieważ wybraliśmy parametry V_1, V_2, ... V_{n2} dowolnie, to na ogół warunki brzegowe w x_2

$$B_{2k}(x_2, f_1(x_2), \ldots, f_N(x_2)) = 0, \qquad k = 1, \ldots, n_2$$

nie są spełnione ($B_{2k} \neq 0$) i

$$G_k = B_{2k}(x_2, \mathbf{f}(x_2)), \qquad k = 1, \ldots, n_2$$

jako składowe wektora ”niezgodności” G

w x2

<u>zadanie</u>

znaleźć takie wolne parametry $\mathbf{V}$, dające G = 0

G zależy od $\mathbf{V}$,

problem sprowadza się do znalezienia

$$\mathbf{G}(\mathbf{v}) = 0$$

czyli n_2 - wymiarowego

zagadnienia znajdowania zer układu równań (!)

wracamy do wielowymiarowej metody Newtona-Raphsona !

iteracje:

$$[\alpha] \cdot \delta\mathbf{v} = -\mathbf{G}$$

$$[\alpha]_{ij} = \frac{\partial G_i}{\partial v_j}$$

$$\mathbf{v}^{new} = \mathbf{v}^{old} + \delta\mathbf{v}$$

niestety nie znamy ścisłych (analitycznych) wzorów na pochodne G po v, bo nie jest znana funkcyjna, analityczna zależność G(v)

ale, pochodne G po v można przybliżyć przez

$$\frac{\partial G_i}{\partial v_j} \approx \frac{G_i(v_1,..,v_j+\Delta v_j,...)-G_i(v_1,..,v_j,..)}{\Delta v_j}$$

bardzo żmudny proces....

przykład N=2

$$\frac{df_1}{dx} = g_1(x, f_1, f_2)$$

$$\frac{df_2}{dx} = g_2(x, f_1, f_2)$$

$f_1(x_1) = y_1$ **a** $f_2(x_1)$ **nie jest określone**

to równanie to

$B_{11}(f_1, f_2) = 0$

$B_{21}(f_1, f_2) = 0$ **należy spełnić w** x_2

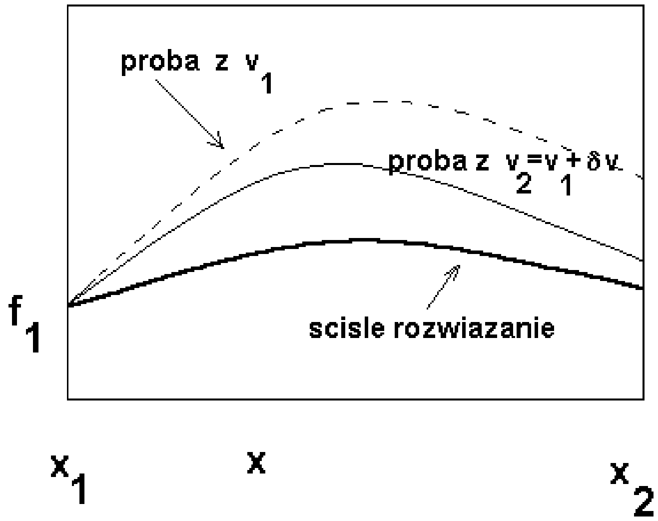
wybieramy dowolne (rozsądne) $v = v_1 = f_2(x_1)$

i całkujemy od x_1 do x_2 , z warunkiem początkowym

$$f_1(x_1)=y_1, \qquad f_2(x_1)=v_1$$

f_2 **może być np. pochodną** f_1 **z**

równania II-rzędu na f_1



δv **- znalezione wg powyższego schematu**

<u>**”zszywanie”**</u> **w punkcie pośrednim**

<u>**kombinacja bazy kanonicznej**</u>

baza kanoniczna w x_1 $\begin{bmatrix}1\\0\\0\\..\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}0\\1\\0\\..\\0\end{bmatrix}, \ldots, \begin{bmatrix}0\\0\\0\\..\\1\end{bmatrix}$

całkujemy równania w bazie kanonicznej

od x_1 do x_0 ---> oraz

od x_2 do x_0 <---

w x_0 mamy N

$$\begin{bmatrix}y_{11}\\y_{12}\\..\\y_{1N}\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}y_{21}\\y_{22}\\..\\y_{2N}\end{bmatrix} \quad .. \quad \begin{bmatrix}y_{N1}\\y_{N2}\\..\\y_{NN}\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}_1 \quad \mathbf{y}_2 \quad .. \quad \mathbf{y}_N$$

rozwiązań *”out”* powstałych ze ”scałkowania” wektorów bazy kanonicznej w x_1 , oraz N rozwiązań *”in”*

$$\begin{bmatrix} z_{11} \\ z_{12} \\ .. \\ z_{1N} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} z_{21} \\ z_{22} \\ .. \\ z_{2N} \end{bmatrix} \quad .. \quad \begin{bmatrix} z_{N1} \\ z_{N2} \\ .. \\ z_{NN} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z}_1 \quad \mathbf{z}_2 \quad .. \quad \mathbf{z}_N$$

jeśli dla N równań I-rzędu znamy w x_1 np.

n_1 wartości funkcji

$$f_1(x_1),\ldots, f_{n1}(x_1)$$

a w x_2 $n_2 = N - n_1$ wartości

$$f_{n1+1}(x_2),\ldots, f_{n2}(x_2)$$

to żądając "zszycia" kombinacji rozwiązań *"out"*

z kombinacją rozwiązań *"in"*

$$\sum_{i=1}^{n1} f_i(x_1)\mathbf{y}_i + \sum_{j=1}^{n2} c_j \mathbf{y}_{n1+j} - \sum_{i=1}^{n2} f_i(x_2)\mathbf{z}_i - \sum_{j=n2+1}^{N} c_j \mathbf{y}_j = 0$$

out **in**

$$\begin{bmatrix} & & \\ & & \\ & & \\ & & \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ .. \\ c_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ \\ \\ \\ \end{bmatrix}$$