1. Persamaan Pembezaan Biasa

1.0 Pengiraan ODE
1.1 Masalah nilai awal
1.2 Masalah nilai sempadan
1.3 Masalah nilai eigen

- Tugasan 2
- Tugasan 3
- Tugasan 4

1.0 Pengiraan ODE

1.0.0 Kerelevanan

Fenomena fizik banyak diperihalkan oleh persamaan pembezaan. Pembezaan digunakan apabila kadar perubahan diambilkira. Mungkin juga ada terma pembezaan peringkat tinggi, di mana perubahan kadar itu sendiri dipertimbangkan.

Pembezaan biasa, berlainan dengan pembezaan separa, ialah ukuran kadar perubaha sesuatu secara keseluruhan terhadap sesuatu parameter.

Penyelesaian persamaan pembezaan biasa selalunya membabitkan kamiran. Ada persamaan yang boleh diselesaikan secara analisis, tetapi banyak juga yang tidak boleh diselesaikan sedemikian. Kaedah berangka, secara berkomputer, diperlukan.

1.0.1 Jenis Persamaan Pembezaan

Persamaan pemezaan biasa (ODE) membabitkan pembezaan menyeluruh, sementara persamaan pembezaan separa (PDE) membabitkan pembezaan separa. Pembezaan separa ialah apabila pembezaan dilakukan hanya terhadap satu daripada parameter fungsi berkenaan, dengan menganggapkan parameter yang lain sebagai malar.

Persamaan peringkat ke *n* boleh ditrurunkan kepada *n* persamaan peringkat pertama. Misalnya,

$$F = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

boleh ditulis

$$F = m\frac{dv}{dt}$$

dan

$$v = \frac{dx}{dt}.$$

Maka di sini kita pertimbangkan utamanya persamaan pembezaan peringkat pertama.

Persamaan pembezaan biasa boleh dikategorikan kepada tiga: masalah nilai awal, masalah nilai sempadan, dan masalah nilai eigen.

Masalah nilai awal ODE membabitkan persamaan berbentuk seperti berikut,

$$\frac{du}{dt} = F\big(u(t)\big)$$

dengan $u(t=0)$ diberi. Diberi nilai awal ini, kita perlu selesaikan untuk fungsi u pada t selepas 0.

Bagi masalah nilai sempadan pula, kita misalnya dibekalkan persamaan seperti,

$$\nabla^2 u = -\rho(\mathbf{x})$$

dalam suatu ruang R, dengan diberi u dan/atau $\frac{\partial u}{\partial x}$ di atas sempadannya, dR. Fungsi u perlu diselesaikan, dikekang nilai-nilai di sempadan.

Contoh masalah nilai eigen ialah persamaan pembezaan biasa

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \lambda u = g(u)$$

dalam ruang $0 \leq x \leq L$, dengan nilai-nilai sempadan $u(0)$, $u(L)$ diberi, dan ada kekangan atas $\frac{du}{dx}(x = 0)$, yang membenarkan λ dengan hanya nilai-nilai tertentu.

Apabila terma dalam persamaan membabitkan pembezaan separa, kita ada persamaan pembezaan separa (PDE). Contoh,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla(\mathbf{f}(u)) = 0$$

yang membabitkan pembezaan separa terhadap masa t, dan terhadap ruang (x,y,z).

Ada banyak kes persamaan-persamaan pembezaan dengan keadaan-keadaan ini bercampur.

1.1 Masalah Nilai Awal

1.1.0 Bentuk persamaan dan penyelesaian

Bentuk am persamaan bagi masalah nilai awal berbentuk berikut:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + f(\mathbf{u}(t), t) = 0.$$

Contoh-contoh termasuk:

$$\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} = 0,$$

iaitu reputan linear,

$$\frac{du}{dt} + \frac{u^2}{\tau} = 0,$$

bagi reputan tak linear,

$$\frac{\partial T}{\partial t} - k\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0,$$

reasapan, dan

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \omega^2\xi = 0,$$

pengayun harmonik.

Secara am, penyelesaian persamaan nilai awal ini membabitkan kamiran terhadap pemboleubah bezaan,

$$u^{(n+1)} \equiv u\left(t^{(n+1)}\right) = u^{(n)} - \int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} f(u(t), t)dt$$

(1 dimensi ruang). Untuk f berbentuk tertentu, kamiran boleh dilakukan secara analisis. Dalam kes lain, kamiran itu perlu dianggarkan. Tulis anggaran untuk $u^{(n+1)}$ sebagai,

$$u^{(n+1)} = P(u^{(n)}, u^{(n+1)}, \Delta t)$$

di mana $\Delta t = t^{(n+1)} - t^{(n)}$, dengan andaian ia bergantung kepada $u^{(n)}$ dan $u^{(n+1)}$. Dalam kes ini, kita kata P berbentuk tersirat. Jika tiada pergantungan kepada $u^{(n+1)}$, kita kata P tersurat.

Kita bincangkan beberapa kaedah anggaran untuk penyelesaian berangka.

1.1.1 Kaedah Euler (peringkat pertama)

Persamaan

$$\frac{du}{dt} + f(u, t) = 0$$

didiskretkan, menggunakan

$$\int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} f(u(t), t)\, dt = \Delta t\ f\left(u^{(n)}, t^{(n)}\right)$$

memberikan

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - \Delta t\ f\left(u^{(n)}, t^{(n)}\right)$$

Kira $u^{(0)}$ di sebelah kiri daripada syarat sempadan (nilai awal), dan kemudian gunakan ini untuk seterusnya dapatkan $u^{(1)}$, $u^{(2)}$, dan seterusnya.

Kaedah ini merupakan kaedah tersurat dan cekap, olehkerana pengiraan yang minimal. Bagaimana dari segi ketepatan dan kestabilan?

Siri Taylor memberikan,

$$u^{(n+1)} = u\left(t^{(n)} + \Delta t\right) = u\left(t^{(n)}\right) + \Delta t\left(\frac{du}{dt}\right)^{(n)} + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)^{(n)} + \cdots$$

$$= u^{(n)} - \Delta t f\left(u^{(n)}, t^{(n)}\right) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)^{(n)} + \cdots$$

Jadi,

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n)}}{\Delta t} + f(u,t) = O(\Delta t)$$

Ini bermakna kaedah Euler ini tepat peringkat pertama.

Katakan ralat diberi sebagai ε. Jadi,

$$u^{(n+1)} + \varepsilon^{(n+1)} = u^{(n)} + \varepsilon^{(n)} - f\left(u^{(n)} + \varepsilon^{(n)}, t^{(n)}\right)\Delta t$$

Oleh kerana ε kecil, kitab oleh kembangkan f seberikut,

$$u^{(n+1)} + \varepsilon^{(n+1)} = u^{(n)} + \varepsilon^{(n)} - f\left(u^{(n)}, t^{(n)}\right)\Delta t - \Delta t \varepsilon^{(n)}\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)^{(n)} + \cdots$$

Jika ditolak persamaan asal, kita dapati,

$$\varepsilon^{(n+1)} = \varepsilon^{(n)} - \Delta t \varepsilon^{(n)}\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)^{(n)} + O(\varepsilon^2).$$

Gandaan ralat g diberi hubungan

$$\varepsilon^{(n+1)} = g\varepsilon^{(n)}$$

Maka,

$$g = 1 - \Delta t\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)$$

Untuk kestabilan,

$$0 \leq \Delta t\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right) \leq 2$$

iaitu

$$\Delta t \leq 2/\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right).$$

Dalam kes $\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right) < 0$ iaitu pertumbuhan eksponenan, syarat $0 \leq \Delta t\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)$ dilanggar. Ini bermakna kaedah Euler tidak stabil atau tidak sah untuk persamaan pertumbuhan.

Dalam kes $\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right) > 0$ iaitu reputan, kita dapati $0 < \Delta t \leq {}^{2}/_{\tau}$, di mana τ adalah masahayat reputan, maka syarat ketabilan ditaati bagi Δt tertentu. Kaedah Euler stabil untuk persamaan reputan, bagi Δt kecil.

Dalam kes u dan f kompleks, iaitu keadaan mengayun, kita boleh fahamkan dari segi pergerakan harmonic mudah, yang diberikan oleh

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \omega^2\xi = 0$$

Persamaan ini boledh ditulis sebagai gabungan dua persamaan,

$$\frac{dy}{dt} - \omega z = 0$$

dan

$$\frac{dz}{dt} + \omega y = 0 .$$

Kalau diambil $u = y + iz$, dengan y dan z kedua-dua nyata, hasiltambah persamaan pertama dengan persamaan kedua didarab i,memberikan,

$$\frac{du}{dt} + i\omega u = 0 .$$

Maka

$$\frac{\partial f}{\partial u} = i\omega$$

dan

$$g = 1 - i\omega\Delta t.$$

Untuk kestabilan,

$$|g| \equiv (1 + \omega^2 \Delta t^2) > 1 \quad .$$

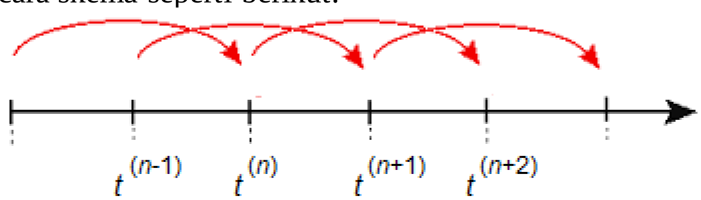
Maka kaedah Euler tidak stabil atau tidak sah untuk persamaan mengayun.

1.1.2 Kaedah Lompat Katak (atau kaedah berpusat masa)

Kaedah ini menggunakan anggaran

$$u^{(n+1)} = u^{(n-1)} - \Delta t\, f\left(u^{(n)}, t^{(n)}\right)$$

sepersti ditunjukkan secara skema seperti berikut.



Kalau dipertimbangkan siri Taylor,

$$u^{(n+1)} = u\left(t^{(n)}\right) + \Delta t \left(\frac{du}{dt}\right)^{(n)} + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)^{(n)} + \frac{(\Delta t)^3}{3!}\left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)^{(n)} + \cdots$$

dan

$$u^{(n-1)} = u\left(t^{(n)}\right) - \Delta t \left(\frac{du}{dt}\right)^{(n)} + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\left(\frac{d^2u}{dt^2}\right)^{(n)} - \frac{(\Delta t)^3}{3!}\left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)^{(n)} + \cdots$$

yang bila ditolak di antaranya, memebrikan,

$$u^{(n+1)} - u^{(n-1)} = 2\Delta t \left(\frac{du}{dt}\right)^{(n)} + \frac{(\Delta t)^3}{3}\left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)^{(n)} + \cdots$$

$$= 2\Delta t f(u,t) + \frac{(\Delta t)^3}{3}\left(\frac{d^3u}{dt^3}\right)^{(n)} + \cdots$$

Jadi

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n-1)}}{2\Delta t} + f(u,t) = O(\Delta t^2)$$

iaitu kaedah ini tepat peringkat kedua.

Menggunakan cara yang sama untuk mengira ralat seperti yang dibuat untuk kaedah Euler, kita dapati,

$$\varepsilon^{(n+1)} = \varepsilon^{(n-1)} - 2\Delta t \varepsilon^{(n)} \left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)^{(n)} + O(\varepsilon^2)$$

.
Jadi, jika diabaikan $O(\varepsilon^2)$ dan dibahagi dengan $\varepsilon^{(n-1)}$,

$$g^2 + 2g\Delta t\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right) - 1 = 0$$

iaitu

$$g = -\alpha \pm \sqrt{1+\alpha^2}$$

di mana

$$\alpha = \Delta t\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)$$

Bila α nyata $|g| > 1$. Maka kaedah Lompat Katak tak stabil untuk persamaan pertumbuhan atau reputan. Kalau $\alpha = i\beta$ khayal,

$$g = i\beta \pm \sqrt{1-\beta^2}$$

Kita dapati $|g|=1$ jika $1-\beta^2 > 0$, iaitu untuk kestabilan, $\Delta t < 1/\omega$. Jadi, kaedah Lompat Katak stabil untuk persamaan mengayun kalau Δt kecil

Satu masalah dengan kaedah itu ialah pada kiraan pertama, apakah nilai yang hendak digunakan untuk $u^{(1)}$? Satu pilihan ialah dengan memilih $u^{(1)} = u^{(0)}$. Satu lagi pilihan ialah dengan menggunakab kaedah Euler dahulu untuk mengira $u^{(1)}$. Satu lagi masalah ia;lah kemungkinan berlakunya nyahgandingan di antara penyelesaian genap dengan penyelesaian ganjil

1.1.3 Kaedah Trapezoid

Kaedah ini menganggarkan kamiran sebagai trapezium:

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - \frac{(f^{(n)} + f^{(n+1)})}{2}\Delta t\,.$$

Ini kaedah tersirat kerana $f^{(n+1)} = f(u^{(n+1)})$.

Kita perlu selesaikan utk $u^{(n+1)}$. Misalnya, diberi

$$\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} = 0,$$

iaitu $f(u) = u/\tau$. Maka

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - \frac{(u^{(n)} + u^{(n+1)})}{2\tau}\Delta t\,,$$

memberikan

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} \frac{\left(1 - {\Delta t}/{2\tau}\right)}{\left(1 + {\Delta t}/{2\tau}\right)}.$$

Kaedah ini tepat peringkat kedua. Faktor gandaan ralat

$$g = \frac{1 - {\alpha}/{2}}{1 + {\alpha}/{2}}$$

dengan

$$\alpha = \Delta t \frac{\partial f}{\partial u}.$$

Bagi persamaan reputan, $\frac{\partial f}{\partial u} > 0$, jadi ia stabil untuk mana-mana $\Delta t > 0$; ia stabil tanpa syarat. Bagi persamaan mengayun, $|g|^2 = g^*g = 1$, maka ia juga stabil tanpa syarat.

Namun, kaedah ini mempunyai beberapa masalah. Pertama, jika Δt besar digunakan, ralat pangkasan besar terakibat. Juga, mungkin ada kesusahan untuk mengira fungsi penghampiran, kerana ketersiratan, terutama bila f berbentuk rumit.

1.1.4 Kaedah Euler-belakang (kaedah peramal-pembetul)

Dalam kaedah ini, nilai untuk f dikira menggunakan nilai u yang diramal menggunakan penghampiran Euler. Anggaran awal bagi nilai $u^{(n+1)}$,

$$u^{(n+1)*} = u^{(n)} - f^{(n)}\Delta t$$

di mana $f^{(n)} = f(u^{(n)}, t^{(n)})$, dan ini digunakan untuk mengira f, memberikan $f^{(n+1)*}$, yang seterusnya digunakan dalam anggaran yang lebih betul,

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - f^{(n+1)*}\Delta t.$$

Keadah ini stabil untuk persamaan mengayun bagi

$$\Delta t \leq \frac{1}{\omega}.$$

1.1.5 Kaedah Adams-Bashforth

Asas pada kaedah ini ialah, $f(t)$ dianggarkan daripada penentuluaran garis lurus di antara $f^{(n-1)}$ dan $f^{(n)}$,

$$f(t) = \frac{(t-t^{(n-1)})}{\Delta t} f^{(n)} - \frac{(t-t^{(n)})}{\Delta t} f^{(n-1)} + O(\Delta t^2)$$

memberikan

$$\int_{t^{(n)}}^{t^{(n+1)}} f(u(t),t)\,dt = \Delta t\left(\frac{3}{2} f^{(n)} - \frac{1}{2} f^{(n-1)}\right) + O(\Delta t^2).$$

Digunakan,

$$u^{(n+1)} = u^{(n-1)} - \frac{1}{2}(3f^{(n)} - f^{(n-1)})\Delta t.$$

Ini ialah kaedah Adams-Bashforth dua langkah. Ia tepat peringkat kedua.

Dikira faktor gandaan,

$$g = \frac{1}{2} - \frac{3\alpha}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{9}{4}\alpha^2 - \alpha + 1}.$$

Maka kaedah ini stabil bagi

$$\Delta t \leq \frac{1}{\partial f/\partial u}$$

untuk persamaan mereput, dan tak stabil secara lemah untuk persamaan mengayun.

Kaedah peringkat lebih tinggi boleh diperolehi dengan penentuluaran menggunakan polinomial tertib lebih tinggi. Sebagai contoh, kalau digunakan polinomial kuasa tiga ke atas $f^{(n)}$, $f^{(n-1)}$, $f^{(n-2)}$ dan $f^{(n-3)}$, diperolehi kaedah Adams-Bashforth empat langkah,

$$u^{(n+1)} = u^{(n-1)} - \frac{1}{24}(55f^{(n)} - 59f^{(n-1)} + 37f^{(n-2)} - 9f^{(n-3)})\Delta t.$$

Ini lebih tepat, namun kita berdepan dengan masalah biasa kaedah banyak langkah, iaitu perlu dikira beberapa nilai awal menggunakan kaedah lain.

1.1.6 Kaedah Runge-Kutta

Anggarkan kamiran *f* menggunakan titik tengah, $f^{(n+½)}$, kemudian anggarkan $f^{(n+½)}$ menggunakan kaedah Euler:

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - f(u^{\left(n+\frac{1}{2}\right)*}, t^{\left(n+\frac{1}{2}\right)})\Delta t$$

Ini dinamakan kaedah Runge-Kutta peringkat kedua. Ia tepat peringkat kedua.

Seperti biasa, untuk dapatkan peringkat lebih tinggi, gantikan penghampiran garis lurus dengan polinomial peringkat lebih tinggi. Bagi peringkat ketiga, suatu parabola, hukum Simpson memberikan,

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - \frac{\Delta t}{6}\left[f^{(n)} + 4f^{(n+\frac{1}{2})} + f^{(n+1)}\right] + O(\Delta t^5)$$

Algoritma untuk mengira penyelesaian adalah seperti berikut.

$$k_1 = \Delta t f(u^{(n)}, t^{(n)})$$

daripada kaedah Euler,

$$k_2 = \Delta t f(u^{(n)} + \frac{1}{2}k_1, t^{\left(n+\frac{1}{2}\right)})$$

daripada kaedah trapezoid,

$$k_3 = \Delta t f(u^{(n)} - k_1 + 2k_2, t^{(n+1)})$$

daripada tentuluaran linear, dan akhirnya, digabung,

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)$$

Ia tepat peringkat ketiga. Untuk kaedah Runge-Kutta peringkat keempat, algoritmanya begini:

$$k_1 = \Delta t f(u^{(n)}, t^{(n)})$$
$$k_2 = \Delta t f(u^{(n)} + \frac{1}{2}k_1, t^{\left(n+\frac{1}{2}\right)})$$
$$k_3 = \Delta t f(u^{(n)} + \frac{1}{2}k_2, t^{\left(n+\frac{1}{2}\right)})$$
$$k_4 = \Delta t f(u^{(n)} + k_3, t^{(n+1)})$$
$$u^{(n+1)} = u^{(n)} - \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Ia tepat peringkat keempat. Kaedah Runge-Kutta peringkat keempat ini dilihat sebagai imbangan terbaik antara cekap dan tepat.

1.2 Masalah Nilai Sempadan

1.2.0 Bentuk persamaan dan penyelesaian

Banyak masalah dalam fizik boleh ditulis dalam bentuk persamaan pembezaan biasa yang linear dan tertib dua,

$$\frac{d^2u}{dx^2} + k^2(x)u = S(x)$$

di mana S adalah sebutan tak homogen (disebut "pemacu"), dan k^2 nyata. Kalau S = 0, kita ada persamaan homogen, dan dalam kes ini, bagi k^2 positif, kita dapati penyelesaian mengayun dengan nombor gelombang tempatan k, sementara bagi k^2 negatif kita dapati penyelesaian tumbuh/reput secara eksponenan dengan kadar tempatan $\sqrt{(-k^2)}$.

Sebagai contoh, lihat persamaan Poisson,

$$\nabla^2\Phi = -4\pi\rho.$$

Untuk keadaan bersimetri sfera, dalam kordinat sferaan,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Phi}{dr}\right) = -4\pi\rho$$

dan, dengan penggantian

$$\Phi(r) = r^{-1}\phi(r),$$

didapati,

$$\frac{d^2\phi}{dr^2} = -4\pi r\rho.$$

Kita dapati persamaan pembezaan biasa linear tertib dua dengan $k^2 = 0$ dan $S = -4\pi r\rho$.

Masalah nilai sempadan dikekang oleh keadaan di sekurang-kurangnya dua sempadan, berbanding masalah nilai awal yang hanya satu sempadan. Kita perlu mencari penyelesaian yang memuaskan kehendak di sempadan-sempadan. Oleh itu kita tidak boleh sewenang membina penyelesaian daripada kehendak satu sempadan permulaan.

Syarat pada sesuatu sempadan boleh dikenakan samada ke atas nilai fungsi yang hendak dikira, atau kecerunannya. Untuk masalah dalam 1 dimensi, ada 4 kemungkinan syarat sempadan (katakan sempadan di x = 0 dan x = l):

:
1. $u(0) = u_0$ dan $u(l) = u_1$
2. $u(0) = u_0$ dan $u'(l) = v_1$
3. $u'(0) = v_0$ dan $u(l) = u_1$
4. $u'(0) = v_0$ dan $u'(l) = v_1$

Kita bincang beberapa kaedah penyelesaian masalah nilai sempadan.

1.2.1 Kaedah menembak

Dalam kaedah ini, kita cuba penyelesaian yang dibina dari satu sempadan, seperti masalah nilai awal, dan kemudian sesuaikannya supaya ia memuaskan syarat di sempadan lain dengan mengubah-ubah satu parameter yang dipilih.

Misalnya, kita ada masalah berikut:

$u'' = f(u, u'; x)$.

Tuliskan ini sebagai persamaan-persamaan peringkat pertama: definisikan $y_1 = u$ dan $y_2 = u'$. Jadi,

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2$$

dan

$$\frac{dy_2}{dx} = f(y_1, y_1; x).$$

Katakan syarat sempadan $u(0) = u_0$ dan $u(l) = u_1$. Parameterkan tekaan untuk $u'(0)$ sebagai δ. Selesaikan menggunakan kaedah untuk masalah nilai awal dengan nilai awal $u(0) = y_1(0) = u_0$ dan $u'(0) = y_2(0) = \delta$, untuk memperolehi $u(l)$. Kemudian, suaikan δ supaya $u(l) = u_1$. Bolehlah anggap penyesuaian ini sebagai suatu masalah punca, iaitu mencari δ supaya $F[u(l),\delta] - u_1 = 0$, di mana F adalah hasil kiraan berangka untuk $u(l)$ dengan parameter δ.

1.2.2 Kaedah linear

Bagi persamaan linear,

$u'' + d(x)u' + q(x)u = s(x)$

hasiltambah linear penyelesaian-penyelesaian juga merupakan penyelesaian. Katakan u_{δ_1} dan sebagainya adalah penyelesaian dengan parameter δ_1, dan penyelesaian sebenar, yang memuaskan syarat sempadan, ialah

$$u(x) = au_{\delta_1} + bu_{\delta_2}$$

Maka, di sempadan, pada $x = 0$,

$$u(0) = u_{\delta_1}(0) = u_{\delta_2}(0) = u_0$$

iaitu $a + b = 1$, dan pada $x = l$,

$$au_{\delta_1}(l) + au_{\delta_1}(l) = u_1$$

memberikan

$$a = \frac{u_{\delta_2}(l) - u_1}{u_{\delta_2}(l) - u_{\delta_1}(l)}$$

dan

$$b = \frac{u_1 - u_{\delta_1}(l)}{u_{\delta_2}(l) - u_{\delta_1}(l)}.$$

Maka dengan mengira penyelesaian bagi dua nilai parameter, penyelasaian sebenar dapat diperolehi.

1.2.3 Kaedah Numerov (kaedah Cowling)

Ini merupakan kaedah mudah dan cekap bagi

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

Kembangkan $u(x + \delta)$ sebagai siri Taylor hingga peringkat empat,

$$u(x \pm \delta) = u(x) \pm \delta u'(x) + \frac{\delta^2}{2!}u''(x) \pm \frac{\delta^3}{3!}u'''(x) + \frac{\delta^4}{4!}u''''(x) + O(\delta^5).$$

Maka

$$\frac{u(x+\delta) + u(x-\delta) - 2u(x)}{\delta^2} = u''(x) + \frac{\delta^2}{12}u''''(x) + O(\delta^4)$$

Daripada persamaan asal, kita perolehi dengan pendiskretan bersaiz δ,

$$u''''_j = \frac{d^2}{dx^2}(-k^2 + S)|_{x=x_j} \cong \frac{\left(\left(\frac{-d(k^2u)}{dx}+\frac{dS}{dx}\right)|_{j+1} - \left(\frac{-d(k^2u)}{dx}+\frac{dS}{dx}\right)|_j\right)}{\delta} = -\frac{(k^2u)_{j+1} - 2(k^2u)_j + (k^2u)_{j-1}}{\delta^2} + \frac{S_{j+1} - 2S_j + S_{j-1}}{\delta^2}$$

memberikan

$$\left(1 + \frac{\delta^2}{12}k_{j+1}^2\right)u_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5\delta^2}{12}k_j^2\right)u_n + \left(1 + \frac{\delta^2}{12}k_{j-1}^2\right)u_{n-1} = \frac{\delta^2}{12}(S_{j+1} + 10S_j + S_{j-1})$$

dengan ralat peringkat δ^5. Persamaan ini memberikan kaedah untuk mengira u_{n+1} dan seterusnya menggunakan dua nilai awal u_0 dan u_1 misalnya. Syarat sempadan bolehlah dipuaskan seperti dalam kaedah menembak. Kalau syarat sempadan merupakan pemberian u dan u' pada satu sempadan yang sama, daripada ini boleh diperolehi dua nilai u awal untuk lakukan penyelesaian.

1.2.4 Kaedah songsangan matriks

Bagi persamaan pembezaan peringkat kedua, seumpam persamaan Poisson dalam satu dimensi,

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \rho(x)$$

dengan syarat sempadan memberikan ϕ pada $x = 0$ dan $x = L$, pendiskretan ruang memberikan,

$$\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1} = (\Delta x)^2\rho_j \qquad 1 \le j \le J \quad .$$

Di sini kita ada (J-2) persamaan linear:

$$\begin{aligned}
-2\phi_2 + \phi_3 &= (\Delta x)^2\rho_2 - \phi_1 \\
\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4 &= (\Delta x)^2\rho_3 \\
\phi_3 - 2\phi_4 + \phi_5 &= (\Delta x)^2\rho_4 \\
\dots & \\
\phi_{J-3} - 2\phi_{J-2} + \phi_{J-1} &= (\Delta x)^2\rho_{J-2} \\
\phi_{J-2} - 2\phi_{J-1} &= (\Delta x)^2\rho_{J-1} - \phi_J
\end{aligned}$$

yang boleh ditulis dalam bentuk matriks,

$$\mathbf{Af} = \mathbf{b}$$

dengan

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Penyelesaian untuk f ialah,

$$\mathbf{f} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \, .$$

Syarat sempadan, secara am, boleh ditulis,

$$\Delta x \; d \; \phi_J + e(\phi_J - \phi_{J-1}) = \Delta x \; c_2 \qquad \text{pada } x = 0$$

$$\Delta x \; d \; \phi_J + e(\phi_J - \phi_{J-1}) = \Delta x \; c_2 \qquad \text{pada } x = L = (J\text{-}1)\,\Delta x$$

Kiraan penyelesaian matriks ini boleh dilakukan menggunakan songsangan matriks tiga pepenjuru (**A** berbentuk matrikstiga pepenjuru, iaitu, ia mempunyai unsur-unsur bernilai 0, kecuali di tiga pepenjuru tengah), atau kaedah lain. Penyelesaian persamaan matriks dibincangkan dalam bab berikut.

1.2.5 Kaedah ulangan

Ini merupakan kaedah laju dan cepat.

Pertimbangkan bentuk bagi persamaan perbezaan seperti berikut,

$$\alpha_j\phi_{j+1} + \beta_j\phi_j + \gamma_j\phi_{j-1} = \delta_j\,, \qquad 2 \le j \le J-1$$

dengan syarat sempadan

$$b\phi_2 + (a\Delta x - b)\phi_2 = c_1\Delta x$$

$$(e + d\Delta x)\phi_J - e\phi_{J-1} = c_2\Delta x.$$

Jadi kita boleh kaitkan

$$\alpha_1 = b, \quad \beta_1 = a\Delta x - b, \quad \gamma_1 = 0, \quad \delta_1 = c_1\Delta x$$

$$\alpha_J = 0, \quad \beta_J = d\Delta x + e, \quad \gamma_J = -e, \quad \delta_J = c_2\Delta x$$

Sekarang, cari hubungan ulangan berbentuk

$$\phi_j = E_j\phi_{J+1} + F_j$$

untuk $1 \le j \le J$. Apa itu E_j, F_j, perlu ditentukan. Tuliskan

$$\phi_{j-1} = E_{j-1}\phi_J + F_{j-1}$$

dan masukkannya ke dalam persamaan perbezaan memberikan,

$$\phi_j = \left(\frac{-\alpha_j}{\beta_j + \gamma_j E_{j-1}}\right)\phi_{j+1} + \frac{\delta_j - \gamma_j F_{j-1}}{(\beta_j + \gamma_j E_{j-1})}.$$

Ini memberikan hubungan ulangan tadi, asalkan

$$E_j = \frac{-\alpha_j}{\beta_j + \gamma_j E_{j-1}}$$

dan

$$F_j = \frac{\delta_j - \gamma_j F_{j-1}}{\beta_j + \gamma_j E_{j-1}}.$$

Ini pula sekarang merupakan hubungan ulangan utk E_j dan F_j. Untuk $j = 1$, $\gamma_1 = 0$, dan dengan itu

$$E_1 = \frac{-\alpha_1}{\beta_1} = \frac{-b}{a\Delta x - b}$$

dan

$$F_1 = \frac{\delta_1}{\beta_1} = \frac{c_1\Delta x}{a\Delta x - b}.$$

Daripada nilai-nlai ini, boleh dijana semua nilai-nilai E_j, F_j dalam suatu sapuan ke hadapan.
Kemudian, daripada syarat sempadan di $x = L$,

$$\beta_J\phi_J + \gamma_J\phi_{J-1} = \delta_J$$

yang bila dimasukkan ke dalam persamaan ulangan untuk ϕ_J menghasilkan

$$\phi_J = \frac{\delta_J - \gamma_J F_{J-1}}{\beta_J + \gamma_J E_{J-1}} = \frac{c_2\Delta x + eF_{J-1}}{d\Delta x + e(1 - E_{J-1})}$$

Daripada ini, boleh dijana semua nilai-nilai ϕ_j menggunakan hubungan ulangan untuk ϕ_j, dalam suatu sapuan ke belakang.

Algoritma dua sapuan ini adalah mudah dan cepat. .

1.2.6 Penyelesaian fungsi Green

Persamaan

$$\frac{d^2u}{dx^2} + k^2(x)u = S(x)$$

adalah linear, jadi boleh ditulis penyelesaian berbentuk

$$u(x) = \int_a^b G(x,y)S(y)dy$$

atau konvolusi,

$$u(x) = G*S$$

di mana a, b adalah sempadan x, dan di mana fungsi Green, G, memuaskan,

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x)\right]G(x,y) = \delta(x-y)$$

dengan δ sebagai fungsi delta Dirac,

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ \infty & x = 0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1$$

Di $x \neq y$, kita ada persamaan homogen

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x)\right]G(x,y) = 0.$$

Pada $x = y$, G' tidak selanjar. Kamiran persamaan untuk G ini, dari x-ε ke x+ε, dengan ε tersangat kecil, jika diandaikan k^2G selanjar, memberikan

$$\left.\frac{dG}{dx}\right|_{x=y+\varepsilon} - \left.\frac{dG}{dx}\right|_{x=y-\varepsilon} = 1$$

daripada sifat δ(x). Kita perlu cari G. Bagi $x < y$, cari penyelesaian (berangka) bagi persamaan homogen menggunakan syarat sempadan di sempadan x kecil, dan bagi $x > y$, cari penyelesaian (berangka) bagi persamaan homogen menggunakan syarat sempadan di sempadan x besar. Padankan dua penyelesaian ini di y supaya G selanjar, dan G' berubah dengan nilai 1. Seterusnya u didapati dengan me lakukan kamiran (berangka) konvolusi G dengan S.

1.3 Masalah Nilai Eigen

1.3.0 Bentuk masalah

Masalah nilai eigen membabitkan penyelesaian persamaan dengan memenuhi syarat sempadan untuk menentukan nilai-nilai eigen dalam persamaan yang memberi penyelesaian ini.

1.3.1 Cara penyelesian

Penyelesaian masalah nilai eigen mempunyai persamaan dengan penyelesian masalah nilai sempadan.

Secara kasarnya, yang berikut ini dijalankan. Tekaan nilai eigen dibuat. Tekaan ini diubah sehingga penyelesaian diperolehi, yang memenuhi syarat-syarat sempadan.

Begini contoh caranya dengan lebih butiran. Pilih x_m, titik pertemuan penyelesaian dari sebelah kiri ϕ_l bertemu penyelesaian dari sebelah kanan ϕ_r, untuk dipadankan. Misalnya, boleh pilih x_m di mana $E = V(x_m)$. Kemudian teka nilai eigen terendah E_0 yang munasabah. Menggunakan syarat sempadan dari sebelah kiri, iaitu $\phi(x) = 0$, pilih $d\phi/dx$ yang sesuai di titik paling kiri untuk memperolehi ϕ_1 dan ϕ_2 awal di hujung kiri. Gunakan kaedah Numerov menggunakan nilai-nilai awal untuk memperolehi penyelesaian berangka sebelah kiri ϕ_l sehingga x_m, menggunakan E_0 tekaan ini. Lakukan sebegitu juga untuk sebelah kanan. Skalakan (darab dengan faktor sesuai) $\phi_r(x)$ sebelah kanan supaya ia sama dengan $\phi_l(x)$ sebelah kiri pada x_m. Ini untuk memuaskan keselanjaran ϕ di x_m. Kemudian kira

$$F(E) = \frac{[\phi_l(x_m+\delta)-\phi_l(x_m-\delta)]-[\phi_r(x_m+\delta)-\phi_r(x_m-\delta)]}{2\delta}$$

iaitu pendiskretan $\phi_l'(x_m) - \phi_r'(x_m)$, yang sepatutnya 0 supaya ada keselanjaran kecerunan di x_m. Lebar selang pendiskretan x adalah δ. Gunakan kaedah sekan untuk memperolehi nilai E_0, dengan mensyaratkan $F(E_0)$ lebih kecil daripada suatu had tertentu untuk nilai E_0 berkenaan dapat diterima. Kemudian buat tekaan untuk E_1, dan seterusnya, menggunakan kaedah yang sama untuk memperolehi E_1 dan seterusnya.

Tugasan 2

1. Zarah, jisim m, cas e, dalam medan $\mathbf{E}$, bergerak:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}$$
$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{m}\mathbf{E}(\mathbf{x},t)$$

Kaedah lompat katak digunakan untuk mendapat penyelasaian berangka:

$$\mathbf{x}^{(n)} = \mathbf{x}^{(n-2)} + 2\Delta t\mathbf{v}^{(n-1)}$$
$$\mathbf{v}^{(n+1)} = \mathbf{v}^{(n-1)} + 2\Delta t\frac{e}{m}\mathbf{E}(\mathbf{x}^{(n)},t^{(n)})$$

Satu zarah bergerak dengan halaju awal tertentu ke arah suatu cas titik pegun dengan parameter hentaman tertentu. Plot $\mathbf{x}(t)$, dan $\mathbf{v}(t)$ (2 dimensi pun cukuplah). Kira dan plot juga tenaga (kinetik + keupayaan) terhadap masa.

2. 100 zarah bersalingtindak diperihalkan:

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$
$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j\neq i}^{100}\frac{e_i e_j}{m_i}\frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^3}$$

Guna kaedah lompat katak untuk plot evolusi suatu kelompok 100 bintang bermula dengan tatarajah tertentu.

3. Suatu bandul daripada rod ringan panjang l dengan jisim m dihujung dalam satah menegak, dipacu daya f_d dan dihalang daya f_r. Dalam arah tangen pergerakan membulat jisim itu,

$$ma = f_g + f_d + f_r$$

dengan

graviti $\quad f_g = -mg \sin\theta$

geseran $\quad f_r = -kv = -kl\, d\theta/dt$

Katakan daya pemacu

$$f_d(t) = f_d^0 \cos\omega_0 t.$$

Ditulis semula ke dalam bentuk tak berdimensi, dengan $\sqrt{(l/g)}$ sebagai unit masa,

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + q\frac{d\theta}{dt} + \sin\theta = b\cos\omega_0 t$$

dengan $q = k/m$ dan $b = f_d^0/ml$.

Kenapakah bermanfaat menulis dalam bentuk tak berdimensi?

Mentransformasikannya menjadi persamaan-persamaan peringkat pertama, memberikan,

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega$$
$$\frac{d\omega}{dt} = -q\omega - \sin\theta + b\cos\omega_0 t$$

Kira nilai-nilai ω dan θ menggunakan kaedah Runge-Kutta tertib keempat bagi nilai-nilai (q, b, ω_0) tertentu dan plotkan plot fasa (ω lawan θ). Cuba (0.5, 0.9, 2/3) dan (0.5, 1.15, 2/3). Yang manakah bertelatah berkala dan yang mana bertelatah kalut?

Tugasan 3

1. Guna kaedah menembak untuk selesaikan persamaan

   $u'' = -\pi^2 (u + 1)/4$

   dengan syarat sempadan $u(0) = 0$ dan $u(1) = 1$, seperti berikut:-

   ulang: guna Runge Kutta peringkat ke4 untuk selesaikan persamaan dengan

   $u(0) = 0$ dan $u'(0) = \delta$, untuk dapatkan $|u_\delta(1) - 1|$.

   dapatkan $|u_\delta(1) - 1|$ untuk suatu nilai δ yang berbeza.

   guna ini dalam kaedah sekan untuk teka nilai δ yang akan berikan

   $|u_\delta(1) - 1|$ sifar.

2. 10,000 zarah memerlukan pengiraan 10,000,000 salingtindak setiap langkah masa. Ini terlalu banyak. Guna kaedah zarah-dalam-sel – gerakan zarah ditentukan oleh medan yang akibat daripada kedudukan zarah-zarah, seperti berikut (1 dimensi).

   Pergerakan zarah diberikan oleh kesan medan, atau keupayaan,

   $$\frac{dx_i}{dt} = v_i$$

   $$\frac{dv_i}{dt} = \frac{e_i}{m_i}E = \frac{e_i}{m_i}\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$$

   sementara keupayaan diberikan oleh ketumpatan zarah (lain) (yang bercas):

   $$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{\rho(x,t)}{\epsilon_0}.$$

   Guna kaedah lompat katak untuk mengira kedudukan zarah-zarah, Medan dikira menerusi pendiskretan ruang menjadi sel-sel α bersaiz Δ:

   $$E_\alpha^{(n-1)} = -\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\left(\frac{\phi_{\alpha+1}^{(n-1)} - \phi_{\alpha-1}^{(n-1)}}{2\Delta}\right)$$

   Keupayaan didapati daripada ketumpatan,

   $$\phi_{\alpha+1}^{(n+1)} - 2\phi_\alpha^{(n+1)} + \phi_{\alpha-1}^{(n+1)} = -\Delta^2\left(\frac{\rho_\alpha^{(n+1)}}{\varepsilon_0}\right).$$

   Boleh guna kaedah ulangan untuk kira ini, seperti berikut:-

   Guna $\phi_j = E_j\phi_{J+1} + F_j$ untuk $1 \le j \le J$

   dengan

   $$E_j = \frac{-\alpha_j}{\beta_j + \gamma_j E_{j-1}}$$

   $$F_j = \frac{\delta_j - \gamma_j F_{j-1}}{\beta_j + \gamma_j E_{j-1}}$$

   bagi persamaan am

   $$\alpha_j \phi_{j+1} + \beta_j \phi_j + \gamma_j \phi_{j-1} = \delta_j\,, \qquad 2 \le j \le J-1$$

   dengan syarat sempadan

   $$b\phi_2 + (a\Delta x - b)\phi_2 = c_1 \Delta x$$

   $$(e + d\Delta x)\phi_J - e\phi_{J-1} = c_2 \Delta x$$

   Kira

   $$E_1 = \frac{-\alpha_1}{\beta_1} = \frac{-b}{a\Delta x - b}$$

   $$F_1 = \frac{\delta_1}{\beta_1} = \frac{c_1 \Delta x}{a\Delta x - b}.$$

Lakukan sapuan ke hadapan untuk dapatkan nilai-nilai E_j, F_j lain menggunakan hubungan ulangan untuk E_j, F_j seperti di atas.

Kira

$$\phi_J = \frac{\delta_J - \gamma_J F_{J-1}}{\beta_J + \gamma_J E_{J-1}} = \frac{c_2 \Delta x + \varepsilon F_{J-1}}{d\Delta x + \varepsilon\left(1 - E_{J-1}\right)}.$$

Lakukan sapuan ke belakang untuk dapatkan nilai-nilai ϕ_j lain menggunakan hubungan ulangan untuk ϕ_j seperti di atas

Tugasan 4

1. Selesaikan persamaan Schroedinger dalam satu dimensi,

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\phi(x) = 0$$

bagi keupayaan

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\lambda(\lambda-1)\left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\cosh^2(\alpha x)}\right]$$

menerusi langkah-langkah berikut:

- Pilih unit-unit supaya $\hbar = m = 1$
- Pilih nilai sesuai untuk α dan λ, misalnya $\alpha = 1$ dan $\lambda = 4$.
- Plot $V(x)$ untuk julat x yang sesuai, misalnya $-4.0 < x < 4.0$.
- Pilih rantau untuk peyelesaian berangka. Rantau ini seharusnya cukup besar berbanding rantau di mana keupayaan berkesan.
- Pilih x_m, titik pertemuan penyelesaian dari sebelah kiri ϕ_l bertemu penyelesaian dari sebelah kanan ϕ_r, untuk dipadankan. Misalnya, boleh pilih x_m di mana $E = V(x_m)$.
- Teka nilai eigen terendah E_0 yang munasabah.
- Menggunakan syarat sempadan dari sebelah kiri, iaitu $\phi(x) = 0$, pilih $d\phi/dx$ yang sesuai di titik paling kiri untuk memperolehi ϕ_1 dan ϕ_2 awal di hujung kiri. Gunakan kaedah Numerov menggunakan nilai-nilai awal untuk memperolehi penyelesaian berangka sebelah kiri ϕ_l sehingga x_m, menggunakan E_0 tekaan ini.
- Begitu juga untuk sebelah kanan.
- Skalakan (darab dengan factor sesuai) $\phi_r(x)$ sebelah kanan supaya ia sama dengan $\phi_l(x)$ sebelah kiri pada x_m. Ini untuk keselanjaran ϕ di x_m.
- Kira

  $$F(E) = \frac{[\phi_l(x_m+\delta) - \phi_l(x_m-\delta)] - [\phi_r(x_m+\delta) - \phi_r(x_m-\delta)]}{2\delta}$$

  iaitu pendiskretan $\phi_l'(x_m) - \phi_r'(x_m)$, yang sepatutnya 0 supaya ada keselanjaran kecerunan di x_m. Lebar selang pendiskretan x adalah δ.
- Gunakan kaedah sekan untuk memperolehi nilai E_0, dengan mensyaratkan $F(E_0)$ lebih kecil daripada suatu had tertentu.
- Buat tekaan untuk E_1, dan seterusnya, menggunakan kaedah yang sama untuk memperolehi E_1 dan seterusnya.
- Bandingan penyelesaian berangka anda untuk nilai-nilai eigen E_n ini dengan penyelesaian analisisan,

  $$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\left[\frac{\lambda(\lambda-1)}{2} - (\lambda - 1 - n)^2\right].$$