

Metoda Numerowa

Andrzej Bara

5 stycznia 2017

UMCS

Metoda Numerowa

Ćwiczenia

Użyteczna transformacja

Ćwiczenia

Metoda Numerowa

J.L. Quiroz Gonzáles, D. Thompson: Getting started with Numerov Method, *Computers in Physics*, **11**, Sep/Oct 1997.

Metoda służy do rozwiązywania równań typu

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = U(x) + V(x)y, \quad (1)$$

gdzie $y = y(x)$. Do tej klasy równań, oprócz równania Schrödingera

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar} [V(x) - E] \psi, \quad (2)$$

zalicza się też równanie klasycznego, oscylatora harmonicznego

$$m \frac{d^2 y}{dx^2} = f_0 \cos \omega x - ky \quad (3)$$

i równanie Poissona opisujące potencjał zadanego rozkładu ładunku.

Po dyskretyzacji x mamy

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{dy}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3y}{dx^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4y}{dx^4} + \dots \quad (4)$$

Podobnie

$$y_{n-1} = y_n - h \frac{dy}{dx} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} - \frac{h^3}{3!} \frac{d^3y}{dx^3} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4y}{dx^4} + \dots \quad (5)$$

Stąd

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} \approx 2 \left(\frac{h^2}{2!} \frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4y}{dx^4} + O(h^6) \right). \quad (6)$$

Oznaczając prawą stronę równania (1) przez

$$F = U(x) + V(x)y, \quad (7)$$

otrzymamy

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2 F_n + \frac{h^4}{12} \frac{d^2 F}{dx^2} + O(h^6). \quad (8)$$

Drugą pochodną F zapiszemy w postaci

$$F_{n+1} - 2F_n + F_{n-1} \approx 2 \left(\frac{h^2}{2!} \frac{d^2 F}{dx^2} + \frac{h^4}{4!} \frac{d^4 F}{dx^4} + O(h^6) \right). \quad (9)$$

Po wstawieniu do (8) otrzymamy różnicowy algorytm całkowania równania (1)

$$y_{n+1} = \frac{2y_n - y_{n-1} + h^2/12(U_{n+1} + 10F_n + F_{n-1})}{(1 - V_{n+1}h^2/12)} + O(h^6). \quad (10)$$

Wykonanie jednego kroku całkowania z dużą dokładnością, równą $O(h^6)$, wymaga tylko jednokrotnego wyznaczenia funkcji U i V .

Metoda Rungego-Kutty, w celu osiągnięcia tej samej dokładności, potrzebuje obliczyć sześć wartości U i sześć wartości V na jeden krok całkowania (patrz: Press, Teukolsky, Vetterling, Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge UP, Cambridge, 1992.)

Z równania (10) widać, że dla wyznaczenia wartości y_{n+1} potrzebujemy znać wartość y w dwu punktach poprzednich. Jak rozpocząć obliczenia? Załóżmy, że znamy wartość początkową $y_0 = y(x_0)$, która pozwala obliczyć F_0 i znamy pochodną y'_0 (zagadnienie Cauchy'ego). Chcąc wyznaczyć y_2 z dokładnością $O(h^6)$ musimy z taką dokładnością znać y_1 . Wystarczy jednak niższa dokładność obliczeń y_1 , równa $O(h^5)$, a to z tego względu, iż błąd końcowy algorytmu jest rzędu h^5 , a y_1 wyznaczamy tylko raz.

Obliczymy y_1 z rozwinięcia Taylora

$$y_1 = y_0 + hy'_0 + h^2/2! F_0 + h^3/3! F'_0 + h^4/4! F''_0 + O(h^5). \quad (11)$$

Za pochodną F'_0 wstawiamy

$$F'_0 = \frac{F_1 - F_0}{h} + O(h) \quad (12)$$

i obcinamy tak otrzymany szereg. Daje to

$$y_1 = \frac{y_0 + hy'_0 + h^2/6 (U_1 - 2F_0)}{1 - V_1 h^2/6} + O(h^4). \quad (13)$$

Użycie tak wyliczonego y_1 z dokładnością $O(h^4)$, może spowodować, wzrost globalnego błędu obliczeń do $O(h^4)$!

Z równania (11) widzimy, że w celu zmniejszenia błędu, powinniśmy jak najdokładniej obliczyć drugą pochodną F_0'' . Jak to zrobić?

- Obliczyć y_1 analitycznie. Nie zawsze jest to praktyczne
- Obliczyć y_1 z równania (11) bez członów F_0' i F_0'' i zastosować standardowy algorytm Numerowa (1) w celu pierwszego oszacowania y_2 . Wartość tę można następnie wykorzystać do wyznaczenia F_0'' . Powtarzać obliczenia y_1 i y_2 , lecz z wykorzystaniem nowych F_0'' , do momentu gdy obie wartości przestaną się zmieniać. Żmudne.
- Wykonać jeden krok całkowania z wykorzystaniem innego, samostartującego algorytmu całkowania (np. RK4) i następnie przejść do metody Numerowa. Utrata dokładności.

Założmy, że mamy pierwsze oszacowanie y_1 , które pozwoli oszacować F_2 . Korzystając z F_0 , F_1 i F_2 szacujemy F_0'' i stąd, z żadaną dokładnością, otrzymujemy y_1 . Poszukujemy y_1 w postaci

$$y_1 = y_0 + hy_0' + h^2(aF_0 + bF_1 + cF_2). \quad (14)$$

Stałe a , b , c powinny być takie, by równania (11) i (14) były ze sobą zgodne. Otrzymamy je rozwijając F_1 i F_2 w szereg Taylora w punkcie x_0 .

$$\begin{aligned} (aF_0 + bF_1 + cF_2) &= aF_0 + b(F_0 + hF_0' + h^2/2 F_0'' + \dots) \\ &\quad + c(F_1 + hF_1' + h^2/2 F_1'' + \dots) \\ &= F_0(a + b + c) + F_0'h(b + 2c) + F_0''h^2/2(b + 4c) + \dots \end{aligned}$$

Porównując z równaniem (11) dostaniemy

$$a + b + c = 1/2, \quad b + 2c = 1/6, \quad b + 4c = 1/12. \quad (15)$$

$$a = 7/24, \quad b = 1/4, \quad c = -1/24. \quad (16)$$

Stąd

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hy'_0 + h^2/24(7F_0 + 6F_1 - F_2) + O(h^5), \\ y_2 &= \frac{2y_1 - y_0 + h^2/12(U_2 + 10F_1 + F_0)}{(1 - V_2h^2/12)} + O(h^5). \end{aligned} \quad (17)$$

Z dokładnością do członów $O(h^5)$ układ równań (17) jest liniowy względem y_1 i y_2 (uwaga: y_1 i y_2 wchodzi do F_1, F_2). Grupując, mamy

$$\begin{aligned} a_{11}y_1 + a_{12}y_2 &= b_1; \\ a_{21}y_1 + a_{22}y_2 &= b_2. \end{aligned} \quad (18)$$

gdzie

$$a_{11} = 1 - V_1 h^2 / 4, \quad (19)$$

$$a_{12} = V_2 h^2 / 24, \quad (20)$$

$$a_{21} = -2 - 5V_1 h^2 / b, \quad (21)$$

$$a_{22} = -1 - V_2 h^2 / 12, \quad (22)$$

$$b_1 = y_0 + h y'_0 + h^2 (7F_0 + 6U_1 - U_2) / 24, \quad (23)$$

$$b_2 = -y_0 + h^2 (F_0 + 10U_1 + U_2). \quad (24)$$

Stąd dostajemy y_1 z błędem $O(h^5)$.

$$y_1 = \frac{a_{22}b_1 - a_{12}b_2}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \quad (25)$$

$$y_1 = \frac{L}{M} . \quad (26)$$

gdzie L i M są

$$L = y_0(1 - V_2 h^2/24) \quad (27)$$

$$+ h y'_0(1 - V_2 h^2/12) \quad (28)$$

$$+ h^2/24(7F_0 + 6U_1 - U_2) \quad (29)$$

$$- h^4 V_2/36(F_0 + 2U_1) , \quad (30)$$

$$M = 1 - V_1 h^2/4 + V_1 V_2 h^4/18 . \quad (31)$$

W pokazanej, ulepszonej metodzie Numerowa startujemy z równania (26) i dalej korzystamy z równania (10).

- Powtórzyć obliczenia prowadzące do wartości współczynników a, b, c pokazanych w równaniu (16).
- Napisać podprogram rozwiązywania równań różniczkowych metodą Numerowa i wykonać test programu sprawdzając w tym celu zgodność wyników numerycznych z rozwiązaniami analitycznymi kilku znanych równań. Jak krok całkowania h wpływa na wyniki obliczeń? Wykonać rysunki porównawcze rozwiązań dla trzech różnych kroków całkowania.
- Rozwiązać równanie $-0.5y'' + y + x = 0$, $[y(0) = 1, y'(0) = 0]$ stosując metodę Numerowa.

(Stephen B. Haley, An Underrated entanglement: Riccati and Schrödinger equations, Am. J. Phys., **65**, March 1997, pp237–243.)

Czasami (np. elektron w polu magnetycznym) równanie Schrödingera zawiera też pierwszą pochodną. Rozpatrzmy równanie

$$\frac{d^2 Z}{dx^2} - 2a(x)\frac{dZ}{dx} + b(x)Z(x) = 0, \quad (32)$$

w którym $Z(x)$ jest nieznaną funkcją, a $a(x)$ i $b(x)$ są funkcjami x . Pierwszą pochodną wyeliminujemy wykonując transformację (patrz np. Kamke)

$$Z(x) = Y(x) \exp \left[\int^x a(x') dx' \right]. \quad (33)$$

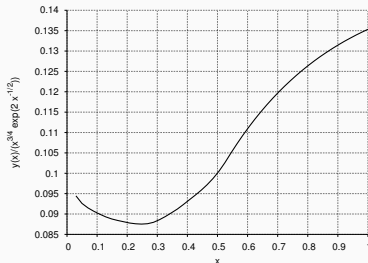
Prowadzi to do następującego równania dla $Y(x)$

$$\frac{d^2 Y}{dx^2} + f(x)Y(x) = 0, \quad \text{gdzie} \quad f(x) = \frac{da}{dx} - a^2(x) + b(x). \quad (34)$$

Podana transformacja jest częścią złożonej transformacji Liouville'a używanej przez Berezina i Shubina do wyznaczenia asymptotycznych własności funkcji własnych równania Schrödingera (patrz: F.A. Berezin, M.A. Shubin, Urownienie Schrödingera, Moskwa, 1983.)

Ponieważ znamy zazwyczaj postać analityczną współczynników $a(x)$ i $b(x)$ w równaniu (32) to wykonanie transformacji (33) jest proste i można stosować metodę Numerowa do otrzymanego równania (34).

Rozwiązać równanie $x^3 y'' = y$, $y(1) = 1$, $y'(1) = 0$ na odcinku $(0, 1]$.
Narysować zależność $y(x)/(x^{3/4} \exp(2x^{-1/2}))$ gdzie y jest rozwiązaniem równania. Wynik powinien być podobny do przedstawionego na rysunku.





J.L. Quiroz Gonzáles, D. Thompson: Getting started with Numerov Method, *Computers in Physics*, **11**, Sep/Oct 1997.



Stephen B. Haley, An Underrated entanglement: Riccati and Schrödinger equations, *Am. J. Phys.*, **65**, March 1997, pp 237–243.

Thank you!

