კვანტური მექანიკის რიცხვითი ანალიზის შესავალი

<u>რამაზ ბოჭორიშვილი</u>

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

სეზონური სკოლა, სიღნაღი, **1-9** თებერვალი **2016**

გეგმა

1. რა შემთხვევაში გამოიყენება რიცხვითი მეთოდები?
2. შრედინგერის განტოლება
3. პუასონის განტოლება

რა შემთხვევაში გამოიყენება რიცხვითი მეთოდები?

- განტოლების ანალიზური ამოხსნა შეუძლებელია
- P: განიხილეთ ერთ განზომილებიანი სტაციონალური შრედინგერის განტოლება და აღწერეთ

a. პირობები, როცა ამოხსნა ანალიზურად შესაძლებელია
b. პირობები, როცა ამოხსნა ანალიზურად შეუძლებელია
c. შეადარეთ ა და ბ ფიზიკური ინტერპრეტაციის /პრაქტიკული გამოყენების თვალსაზრისით
d. რამდენად „ზუსტად „ შეიძლება ჩაითვალოს ამონახსნი, თუ ფორმულა შეიცავს ტრიგონომეტრიულ ფუნქციას, ექსპონენტას, ტრანსცედენტული განტოლების ამონახსნს ან ინტეგრალს რაიმე სხვა ფუნქციიდან ან წარმოდგენილია უსასრულო მწკრივის სახით?

რა რესურსია საჭირო წინა სლაიდზე მოცემული დავალების შესასრულებლად?

- გუნდი/ჯგუფი?

რა რესურსია საჭირო წინა სლაიდზე მოცემული დავალების შესასრულებლად?

- გუნდი/ჯგუფი?
- დრო?
- პრეზენტაციის მომზადება?
- საზოგადოების წინაშე მოყოლა?

თუ გუნდი აპირებს მუშაობას

- ჯგუფის ხელმძღვანელი
- წევრები - მაქსიმუმ 5
- ხელმძღვანელი 17:00-მდე აგზავნის წევრების სიას და ელ.ფოსტას მისამართზე ramaz.botchorishvili@tsu.ge
- მიიღებთ წვდომას dropbox ან drive

კიდევ რა შემთხვევაშია საჭირო რიცხვითი მეთოდები?

- იხ. სლაიდები რიცხვითი ანალიზი და გამოთვლითი მეცნიერე

რიცხვითი ანალიზის გაჭირვება/პრობლემები კვანტური მექანიკის ამოცანებში

- აღმოჩნდა, რომ ლიტერატურა საკმაოდ დიდია
- ისწავლება ზოგიერთ უნივერსიტეტში საკმაოდ დეტალურად, მირითადად მაგისტრატურაში
- 2015 წელს ზოგიერთი პროგრამული პაკეტის შექმნის მცდელობა MATLAB-ის ბაზაზე 10 წელს ითვლის
- არაფიზიკური ენერგია განტოლებაში იწვევს მეთოდის განშლადობას
- პათოლოგიური ასიმპტოტური ყოფაქცევა, მგრძნობიარეა მდგრადობის მიმართ
- მაღალი ნომრის საკუთრივი რიცხვებისთვის ოსცილატიურობა, დიდი გამოთვლითი რესურსის საჭიროება

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 1. A second ordered differential equation of the form

$$-\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y = \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a, b] \tag{1}$$

with p, q and ω specified such that $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in (a, b)$, is called a *Sturm-Liouville(SL) differential equation.*

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 1. A second ordered differential equation of the form

$$-\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y = \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a,b] \tag{1}$$

with p, q and ω specified such that $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in (a,b)$, is called a *Sturm-Liouville(SL) differential equation.*

Example 2. The Schrodinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi + V(x)\psi = E\psi$$

on an interval $[a,b]$ is a SL differential equation.

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 1. A second ordered differential equation of the form

$$-\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y = \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a,b] \tag{1}$$

with p, q and ω specified such that $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in (a,b)$, is called a *Sturm-Liouville(SL) differential equation.*

Mixed Boundary Conditions Boundary conditions of the form

$$\begin{aligned} c_a y(a) + d_a y'(a) &= \alpha \\ c_b y(b) + d_b y'(b) &= \beta \end{aligned} \tag{2}$$

where, $c_a, d_a, c_b, d_b, \alpha$ and β are constants, are called *mixed Dirichlet-Neumann* boundary conditions. When both $\alpha = \beta = 0$ the boundary conditions are said to be homogeneous. Special cases are *Dirichlet* BC ($d_a = d_b = 0$) and *Neumann* BC ($c_a = c_b = 0$)

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 4. The SL differential equation on a finite interval $[a, b]$ with homogeneous mixed boundary conditions, that is,

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y &= \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a, b] \\ c_a y(a) + d_a y'(a) &= 0 \\ c_b y(b) + d_b y'(b) &= 0 \end{aligned}$$

with $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in [a, b]$ is called as *regular Sturm-Liouville system* (or problem).

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 4. The SL differential equation on a finite interval $[a, b]$ with homogeneous mixed boundary conditions, that is,

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y &= \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a, b] \\ c_a y(a) + d_a y'(a) &= 0 \\ c_b y(b) + d_b y'(b) &= 0 \end{aligned}$$

with $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in [a, b]$ is called as *regular Sturm-Liouville system* (or problem).

Example 5. Quantum particle in a 1D box: The Schrodinger equation and boundary conditions are given by

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x) &= E\psi(x) \qquad x \in [0, L] \\ \psi(0) &= 0 \\ \psi(L) &= 0. \end{aligned}$$

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 4. The SL differential equation on a finite interval $[a,b]$ with homogeneous mixed boundary conditions, that is,

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y &= \lambda\omega(x)y, \qquad x\in[a,b] \\ c_a y(a) + d_a y'(a) &= 0 \\ c_b y(b) + d_b y'(b) &= 0 \end{aligned}$$

with $p(x)>0$ and $\omega(x)>0$ for $x\in[a,b]$ is called as *regular Sturm-Liouville system* (or problem).

Example 5. Quantum particle in a 1D box: The Schrodinger equation and boundary conditions are given by

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x) &= E\psi(x) \qquad x\in[0,L] \\ \psi(0) &= 0 \\ \psi(L) &= 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2} \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \end{aligned}$$

რეგულარული ამოცანის თვისებები

1. The eigenvalues are real, countable, ordered and there is a smallest eigenvalue. Thus, we can write them as $\lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$. However, there is no largest eigenvalue and $n \to \infty$, $\lambda_n \to \infty$.

2. For each eigenvalue λ_n there exists an eigenfunction ϕ_n with $n-1$ zeros on (a, b).

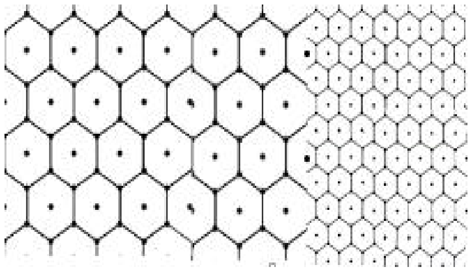
3. Eigenfunctions corresponding to different eigenvalues are orthogonal with respect to the weight function, $\sigma(x)$. Defining the inner product of $f(x)$ and $g(x)$ as

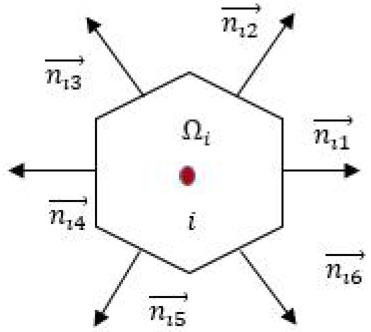
$$< f, g >= \int_a^b f(x)g(x)\sigma(x)\,dx, \tag{6.11}$$

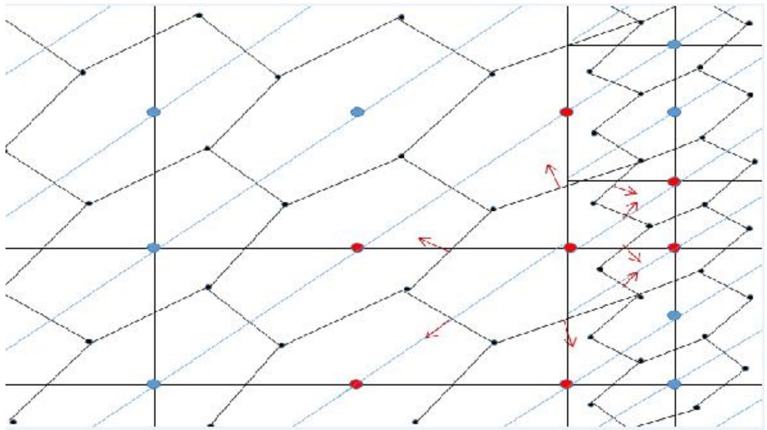
then the orthogonality of the eigenfunctios can be written in the form

$$< \phi_n, \phi_m >=< \phi_n, \phi_n > \delta_{nm}, \quad n, m = 1, 2, \ldots. \tag{6.12}$$

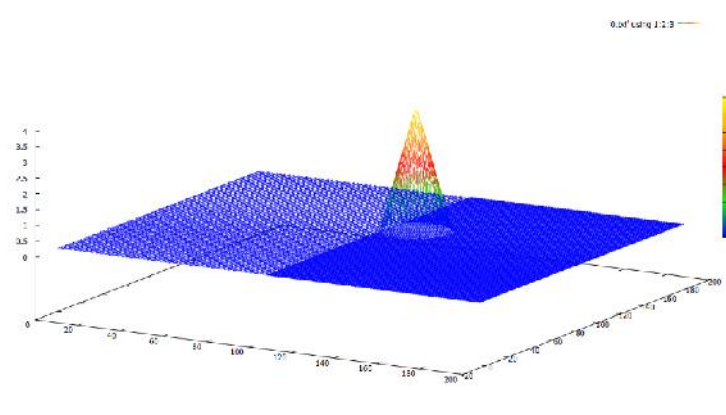
ექვსკუთხა ბადე

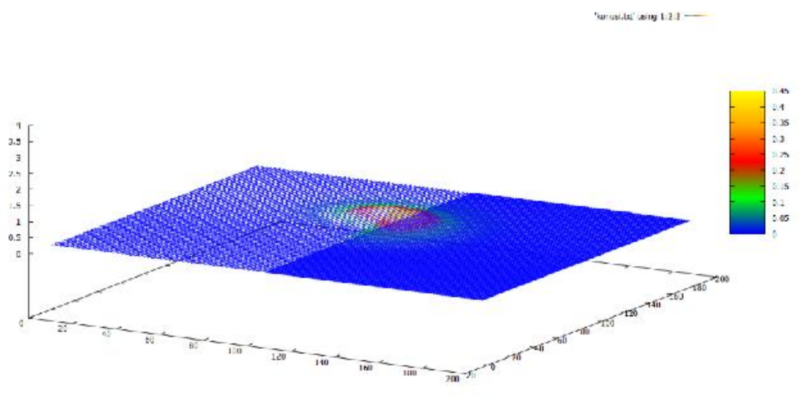






ორბადიანი ტესტი





დასკვნა

მადლობას მოგახსენებთ
ყურადღებისთვის

კვანტური მექანიკის რიცხვითი ანალიზის შესავალი 2

რამაზ ბოჭორიშვილი
ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

სეზონური სკოლა, სიღნაღი, **1-9** თებერვალი **2016**

გეგმა

1. ახალი მიდგომა: რიცხვითი და ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?
2. მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემები
3. ლაპლასიანი მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში
4. ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის
5. ცვლადთა განცალება მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში
6. მეთოდის ფორმულირება
7. დავალება

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- ანალიზური მეთოდების
- უპირატესობა:
-
-
-
-

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- ანალიზური მეთოდების
- უპირატესობა: ფორმულა იძლევა ყველა ამონახსნს და ყველა საკუთრივ რიცხვს
- ნაკლი:
-
-
-

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- ანალიზური მეთოდების
- უპირატესობა: ფორმულა იძლევა ყველა ამონახსნს და ყველა საკუთრივ რიცხვს
- ნაკლი: გამოყენება შეზღუდულია

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- **ანალიზური მეთოდების**
- უპირატესობა: ფორმულა იძლევა ყველა ამონახსნს და ყველა საკუთრივ რიცხვს
- ნაკლი: გამოყენება შეზღუდულია
- **რიცხვითი მეთოდების**
- უპირატესობა:
-

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- **ანალიზური მეთოდების**
- უპირატესობა: ფორმულა იძლევა ყველა ამონახსნს და ყველა საკუთრივ რიცხვს
- ნაკლი: გამოყენება შეზღუდულია
- **რიცხვითი მეთოდების**
- უპირატესობა: თუ ამოცანის ამონახსნი არსებობს, შეიძლება წინასწარ დასახელებული სიზუსტით პოვნა
- ნაკლი:

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- **ანალიზური მეთოდების**
- უპირატესობა: ფორმულა იძლევა ყველა ამონახსნს და ყველა საკუთრივ რიცხვს
- ნაკლი: გამოყენება შეზღუდულია
- **რიცხვითი მეთოდების**
- უპირატესობა: თუ ამოცანის ამონახსნი არსებობს, შეიძლება წინასწარ დასახელებული სიზუსტით პოვნა
- ნაკლი: დიდი რესურსი, სპეციალიზებული მეთოდების საჭიროება არარეგულარულ შემთხვევებში

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

- **ანალიზური მეთოდები:**
- ორთოგონალური კოორდინატები, ცვლადთა განცალება, ერთ განზომილებიანი შტურმ ლიუვილის ამოცანის ანალიზური ამონახსნი
- **რიცხვითი მეთოდები:**
- დისკრეტული გამოთვლითი არე, ბადის აგება ნებისმიერ განზომილებაში, ნებისმიერად მაღალი რიგის სიზუსტის რიცხვითი ალგორითმი, კონკრეტული საკუთრივი ფუნქციის და საკუთრივი რიცხვის პოვნა კომპიუტერის გამოყენებით

ანალიზური მეთოდების დაწყვილება?

o ალგორითმი:

1. ავაგოთ მოცემული ფორმისთვის ორთოგონალურ კოორდინატთა სისტემა რიცხვითი მეთოდის გამოყენებით
2. მოცემულ კოორდინატთა სისტემაში ანალიზური ამონახსნი, მაგალითად ცვლადთა განცალების გამოყენებით

მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემები

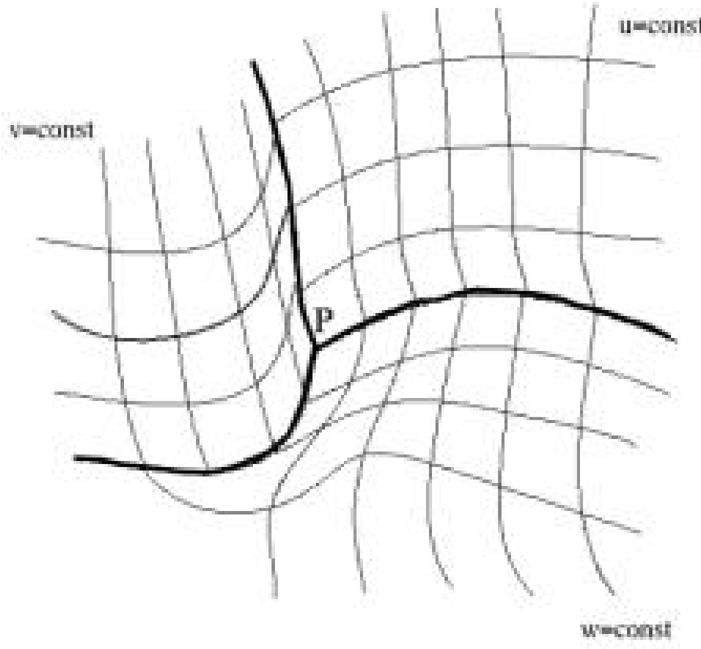
$$u = u(x, y, z)$$
$$v = v(x, y, z)$$
$$w = w(x, y, z)$$

$$x = x(u, v, w)$$
$$y = y(u, v, w)$$
$$z = z(u, v, w)$$

მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემები

$$u = u(x, y, z)$$
$$v = v(x, y, z)$$
$$w = w(x, y, z)$$

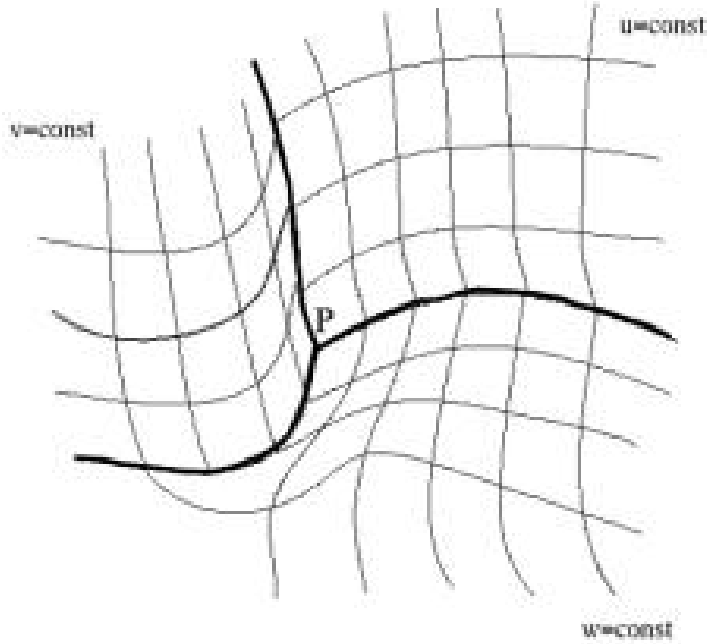
$$x = x(u, v, w)$$
$$y = y(u, v, w)$$
$$z = z(u, v, w)$$



მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემები

$$u = u(x, y, z)$$
$$v = v(x, y, z)$$
$$w = w(x, y, z)$$

$$x = x(u, v, w)$$
$$y = y(u, v, w)$$
$$z = z(u, v, w)$$

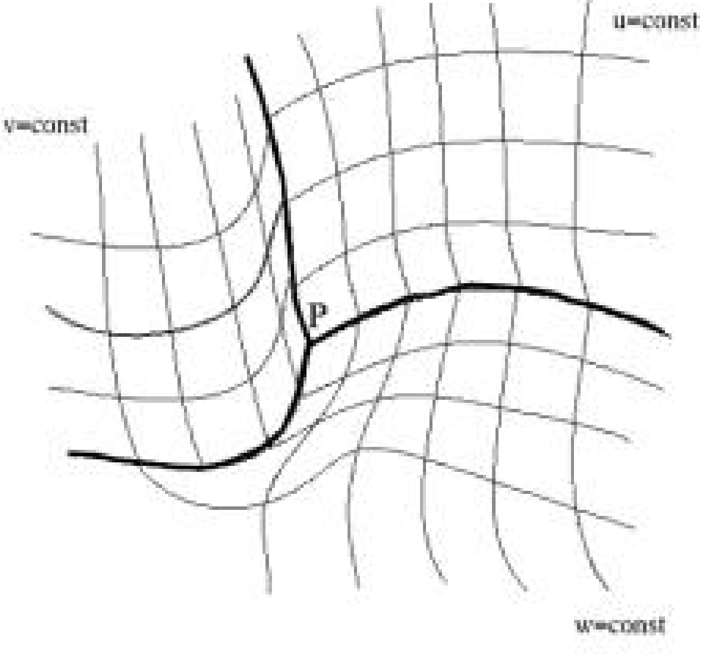


ორთოგონალურობა:
ასახვის გრადიენტების
სკალარული ნამრავლის
ნულთან ტოლობა

მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემები

$$u = u(x, y, z)$$
$$v = v(x, y, z)$$
$$w = w(x, y, z)$$

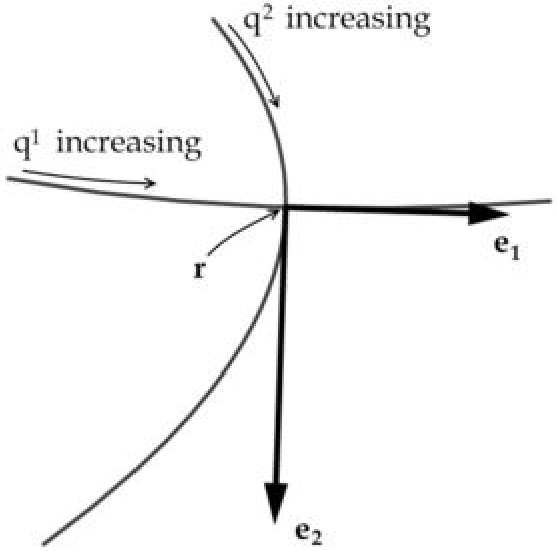
$$x = x(u, v, w)$$
$$y = y(u, v, w)$$
$$z = z(u, v, w)$$



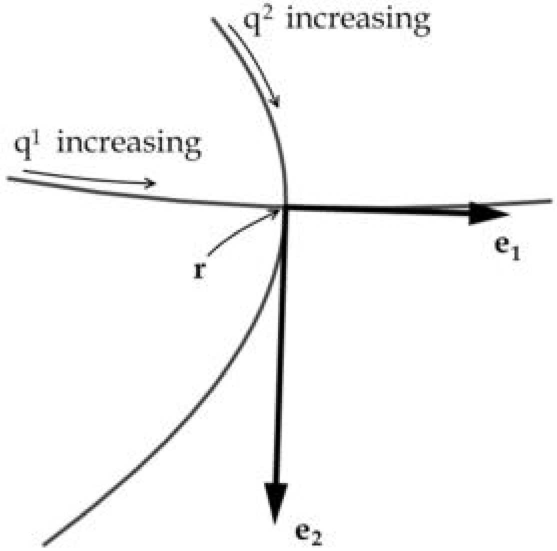
ორთოგონალურობა:
ასახვის გრადიენტების
სკალარული ნამრავლის
ნულთან ტოლობა

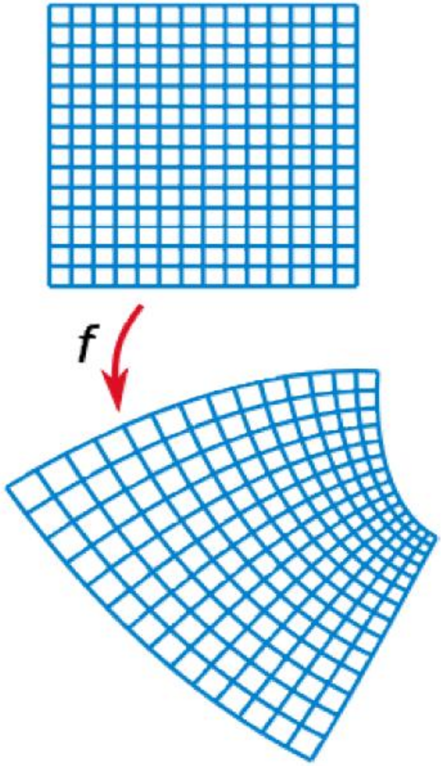
აღნიშვნები:
დეკარტულისთვის
x,y,z, ან შესაბამისი
ინდექსებით, ხოლო
მრუდწირულისთვის,
სხვადასხვა აღნიშვნები

ორთოგონალურობა



ორთოგონალურობა





ლაპლასიანი მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{h_u h_v h_w}\left[\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{h_v h_w}{h_u}\frac{\partial\varphi}{\partial u}\right) + \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{h_u h_w}{h_v}\frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) + \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{h_u h_v}{h_w}\frac{\partial\varphi}{\partial w}\right)\right]$$

ლაპლასიანი მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{h_u h_v h_w}\left[\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{h_v h_w}{h_u}\frac{\partial\varphi}{\partial u}\right) + \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{h_u h_w}{h_v}\frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) + \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{h_u h_v}{h_w}\frac{\partial\varphi}{\partial w}\right)\right]$$

$$h_u \equiv \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u}\right| \quad , \quad h_v \equiv \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\right| \quad , \quad h_w \equiv \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w}\right|$$

$$\mathrm{d}\mathbf{r} \equiv (\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \mathrm{d}z).$$

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = h_u \mathrm{d}u \mathbf{e}_u + h_v \mathrm{d}v \mathbf{e}_v + h_w \mathrm{d}w \mathbf{e}_w$$

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u}\mathrm{d}u + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\mathrm{d}v + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w}\mathrm{d}w$$

ლაპლასიანი მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში

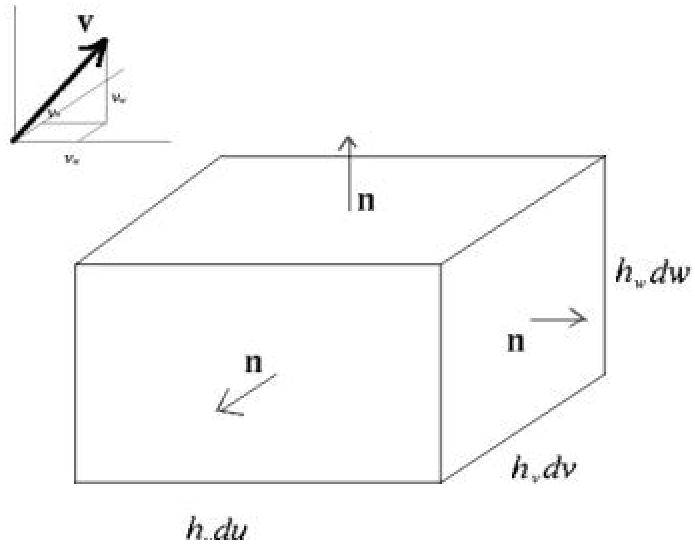
$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{h_u h_v h_w}\left[\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{h_v h_w}{h_u}\frac{\partial\varphi}{\partial u}\right) + \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{h_u h_w}{h_v}\frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) + \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{h_u h_v}{h_w}\frac{\partial\varphi}{\partial w}\right)\right]$$

$$h_u \equiv \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u}\right| \quad , \quad h_v \equiv \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\right| \quad , \quad h_w \equiv \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w}\right|$$

$$\mathrm{d}\mathbf{r} \equiv (\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \mathrm{d}z).$$

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = h_u \mathrm{d}u \mathbf{e}_u + h_v \mathrm{d}v \mathbf{e}_v + h_w \mathrm{d}w \mathbf{e}_w$$

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u}\mathrm{d}u + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\mathrm{d}v + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w}\mathrm{d}w$$



ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის

პრინციპი:

1. სითბოს გავრცელება
2. სტაციონალური სითბოგამტარებლობის განტოლება
3. მრუდწირული კოორდინატები - ამონახსნის დონის წირები

ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის

$$r_{xx} + r_{yy} = 0$$

$$s_{xx} + s_{yy} = 0$$

$$x_r = \frac{\partial x}{\partial r}, \quad x_{rr} = \frac{\partial^2 x}{\partial r^2} x_s = \frac{\partial x}{\partial s}, \quad x_{ss} = \frac{\partial^2 x}{\partial s^2}$$

$$(x_s^2 + y_s^2)x_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)x_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)x_{ss} = 0$$
$$(x_s^2 + y_s^2)y_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)y_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)y_{ss} = 0 \quad .$$

ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის

$$r_{xx} + r_{yy} = 0$$

$$s_{xx} + s_{yy} = 0$$

$$r_{xx} + r_{yy} = P$$

$$s_{xx} + s_{yy} = Q$$

$$x_r = \frac{\partial x}{\partial r}, \quad x_{rr} = \frac{\partial^2 x}{\partial r^2} x_s = \frac{\partial x}{\partial s}, \quad x_{ss} = \frac{\partial^2 x}{\partial s^2}$$

$$(x_s^2 + y_s^2)x_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)x_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)x_{ss} = 0$$
$$(x_s^2 + y_s^2)y_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)y_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)y_{ss} = 0$$

ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის

$$r_{xx} + r_{yy} = 0$$

$$s_{xx} + s_{yy} = 0$$

$$x_r = \frac{\partial x}{\partial r}, \quad x_{rr} = \frac{\partial^2 x}{\partial r^2} x_s = \frac{\partial x}{\partial s}, \quad x_{ss} = \frac{\partial^2 x}{\partial s^2}$$

$$(x_s^2 + y_s^2)x_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)x_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)x_{ss} = 0$$

$$(x_s^2 + y_s^2)y_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)y_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)y_{ss} = 0$$

$$r_{xx} + r_{yy} = P$$

$$s_{xx} + s_{yy} = Q$$

Alternatively the functions (P,Q) can be scaled

$$(r_x^2 + r_y^2)P \text{ and } (s_x^2 + s_y^2)Q.$$

ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის

$$r_{xx} + r_{yy} = 0$$

$$s_{xx} + s_{yy} = 0$$

$$x_r = \frac{\partial x}{\partial r}, \quad x_{rr} = \frac{\partial^2 x}{\partial r^2} x_s = \frac{\partial x}{\partial s}, \quad x_{ss} = \frac{\partial^2 x}{\partial s^2}$$

$$(x_s^2 + y_s^2)x_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)x_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)x_{ss} = 0$$
$$(x_s^2 + y_s^2)y_{rr} - 2(x_r x_s + y_r y_s)y_{rs} + (x_r^2 + y_r^2)y_{ss} = 0 \quad .$$

$$r_{xx} + r_{yy} = P$$

$$s_{xx} + s_{yy} = Q$$

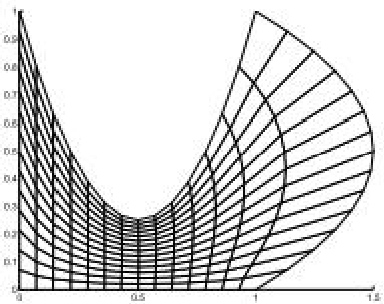
Alternatively the functions (P, Q) can be scaled

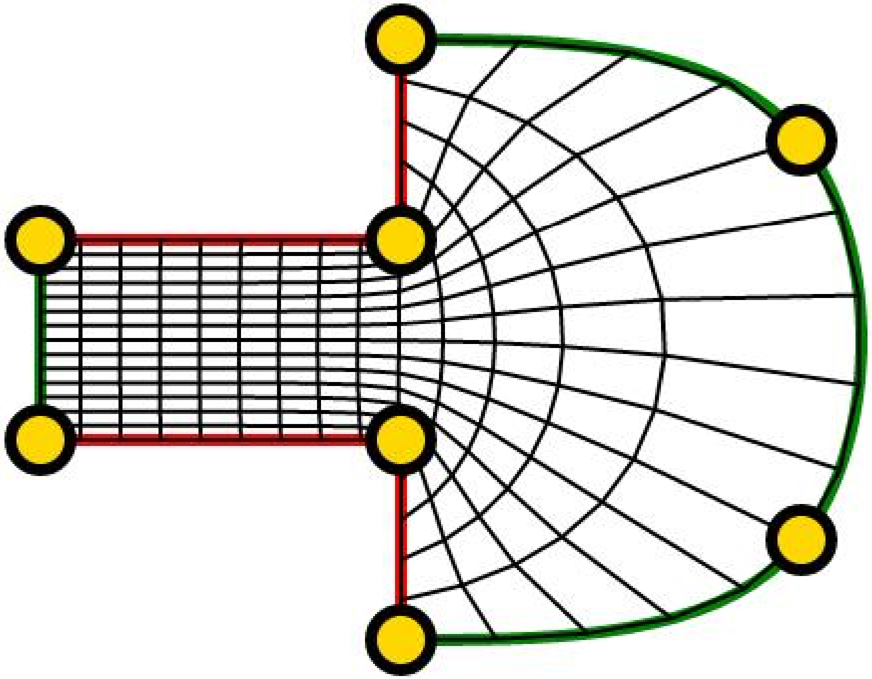
$$(r_x^2 + r_y^2)P \text{ and } (s_x^2 + s_y^2)Q.$$

The maximum principle is now lost,

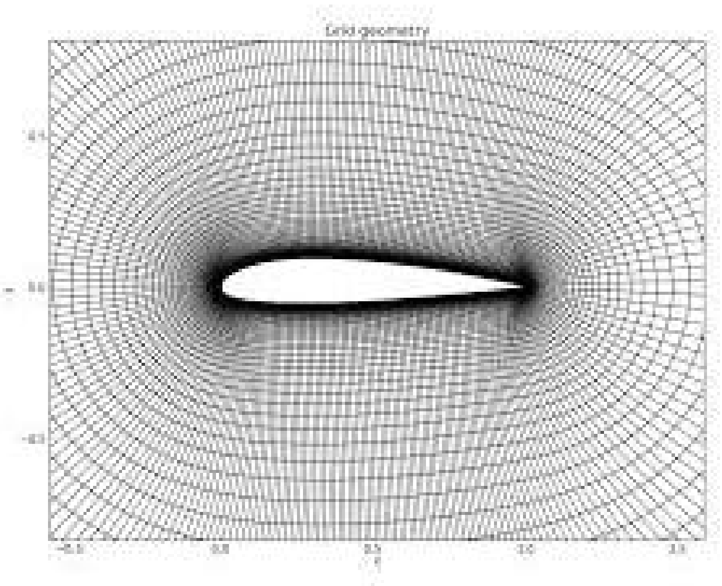
რისკი: დახვეული საკოორდინატო წირები

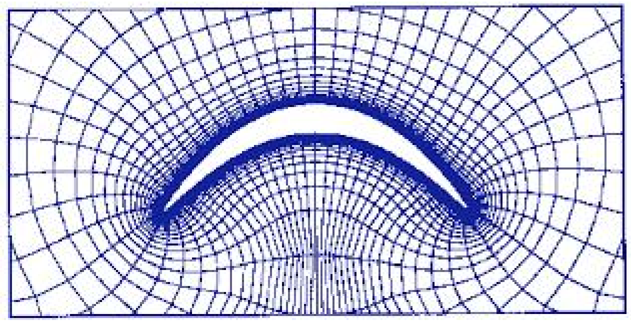
ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის



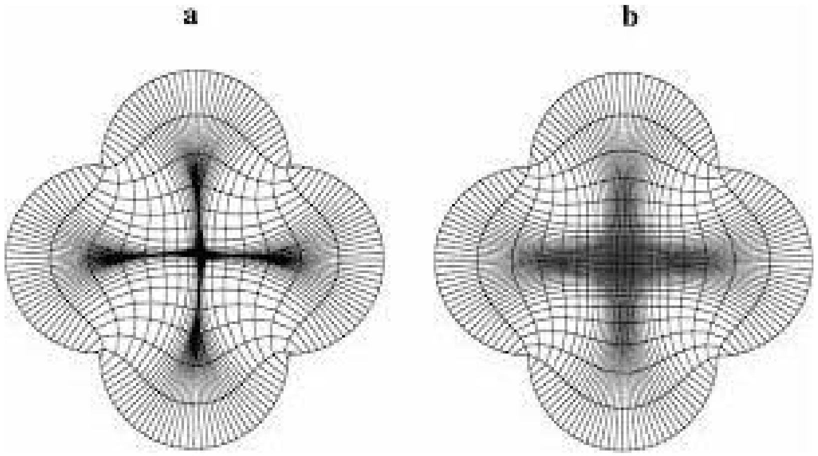


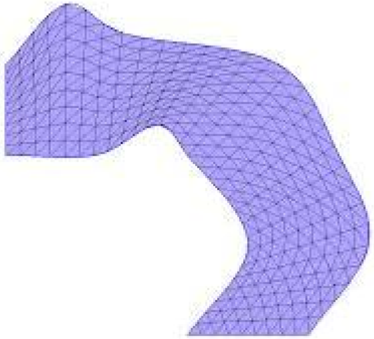
ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის

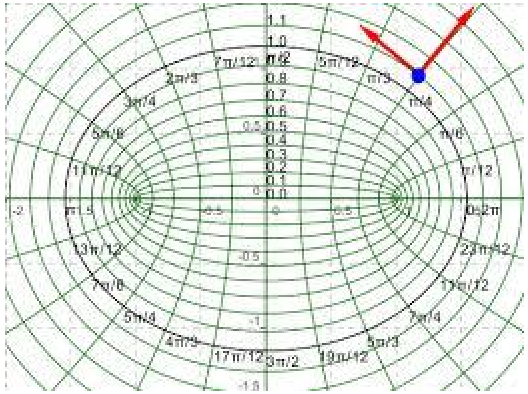




ელიფსური მეთოდები ორთოგონალური მრუდწირული კოორდინატთა სისტემისთვის







ცვლადთა განცალება მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{h_u h_v h_w}\left[\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{h_v h_w}{h_u}\frac{\partial\varphi}{\partial u}\right) + \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{h_u h_w}{h_v}\frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) + \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{h_u h_v}{h_w}\frac{\partial\varphi}{\partial w}\right)\right]$$

ცვლადთა განცალება მრუდწირულ კოორდინატთა სისტემაში

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{h_u h_v h_w}\left[\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{h_v h_w}{h_u}\frac{\partial\varphi}{\partial u}\right) + \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{h_u h_w}{h_v}\frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) + \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{h_u h_v}{h_w}\frac{\partial\varphi}{\partial w}\right)\right]$$

რა მოვუხერხოთ?

მეთოდის ფორმულირება

იხ. დაფა

შტურმ ლიუვილის ამოცანა

Definition 4. The SL differential equation on a finite interval $[a, b]$ with homogeneous mixed boundary conditions, that is,

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right] y + q(x)y &= \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a,b] \\ c_a y(a) + d_a y'(a) &= 0 \\ c_b y(b) + d_b y'(b) &= 0 \end{aligned}$$

with $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in [a, b]$ is called as *regular Sturm-Liouville system* (or problem).

Example 5. Quantum particle in a 1D box: The Schrodinger equation and boundary conditions are given by

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x) &= E\psi(x) \qquad x \in [0, L] \\ \psi(0) &= 0 \\ \psi(L) &= 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2} \\ \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \end{aligned}$$

რეგულარული ამოცანის თვისებები

1. The eigenvalues are real, countable, ordered and there is a smallest eigenvalue. Thus, we can write them as $\lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$. However, there is no largest eigenvalue and $n \to \infty$, $\lambda_n \to \infty$.

2. For each eigenvalue λ_n there exists an eigenfunction ϕ_n with $n-1$ zeros on (a, b).

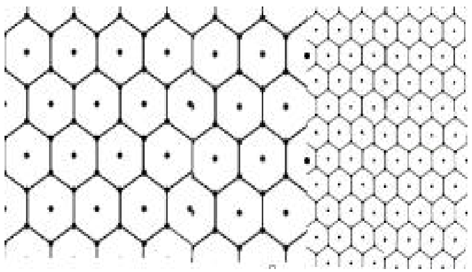
3. Eigenfunctions corresponding to different eigenvalues are orthogonal with respect to the weight function, $\sigma(x)$. Defining the inner product of $f(x)$ and $g(x)$ as

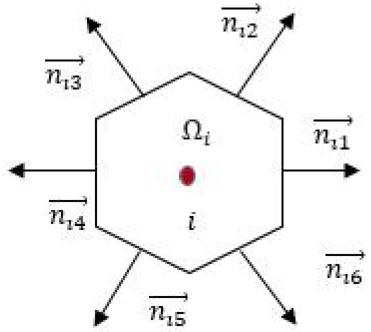
$$< f, g >= \int_a^b f(x)g(x)\sigma(x)\,dx, \tag{6.11}$$

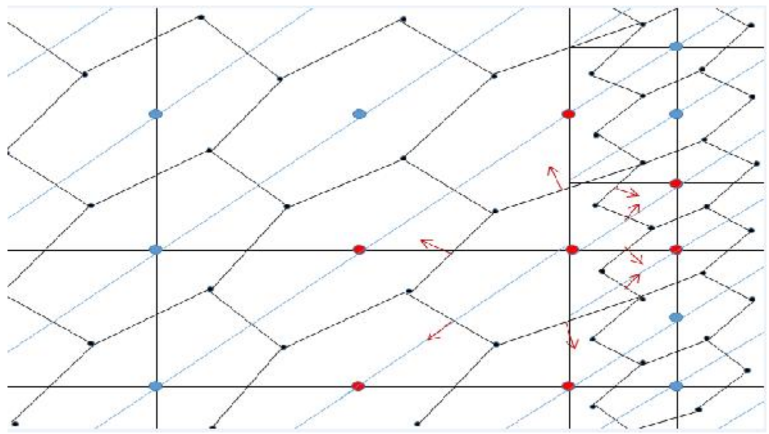
then the orthogonality of the eigenfunctios can be written in the form

$$< \phi_n, \phi_m >=< \phi_n, \phi_n > \delta_{nm}, \quad n, m = 1, 2, \ldots. \tag{6.12}$$

ექვსკუთხა ბადე







დავალება

მადლობას მოგახსენებთ
ყურადღებისთვის

კვანტური მექანიკის რიცხვითი ანალიზის შესავალი 3

<u>რამაზ ბოჭორიშვილი</u>

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

სეზონური სკოლა, სიღნაღი, **1-9** თებერვალი **2016**

გეგმა

1. პუასონის განტოლება
2. როგორ გამოვთვალოთ ფუნქციის წარმოებული
3. ლაქსის ექვივალენტობის თეორემა
4. სასრულ სხვაობიანი სქემები
5. სასრულ ელემენტთა მეთოდი
6. სასრულ მოცულობათა მეთოდი
7. დავალება

პუასონის განტოლება

$$-u_{xx}(x,y) - u_{yy}(x,y) = f(x,y), \qquad (x,y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1),$$

$$u(x,y) = g(x,y) \qquad \text{for} \quad x \in \partial\Omega$$

პუასონის განტოლება

$$-u_{xx}(x,y) - u_{yy}(x,y) = f(x,y), \qquad (x,y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1),$$

$$u(x,y) = g(x,y) \qquad \text{for} \quad x \in \partial\Omega$$

$$-\Delta u = f \ \text{ in } \Omega, \quad u = g \text{ on } \Gamma = \partial\Omega,$$

x \in R^n, საზოგადოდ არე გლუვი საზღვრის მქონე და მრუდწირულია

ფუნქციის წარმოებულის გამოთვლა

- ფუნქციათა კლასი, რომლის წარმოებულის წარმოდგენა ანალიზურად შეზღუდულია
-

ფუნქციის წარმოებულის გამოთვლა

- ფუნქციათა კლასი, რომლის წარმოებულის წარმოდგენა ანალიზურად შეზღუდულია
- თუ პასუხად მხოლოდ რიცხვი გვაინტერესებს მაშინ ხომ არ ჯობს ეს საქმე კომპიუტერს გადავაბაროთ?

ფუნქციის წარმოებულის გამოთვლა

- ფუნქციათა კლასი, რომლის წარმოებულის წარმოდგენა ანალიზურად შეზღუდულია
- თუ პასუხად მხოლოდ რიცხვი გვაინტერესებს მაშინ ხომ არ ჯობს ეს საქმე კომპიუტერს გადავაბაროთ? თუ კი უნდა ვიცოდეთ როგორ.

სასრული სხვაობები

ტეილორის ფორმულა

$$u(x+h) = u(x) + h\, u'(x) + \frac{h^2}{2!} u''(x) + \frac{h^3}{3!} u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

სასრული სხვაობები

ტეილორის ფორმულა

$$u(x+h) = u(x) + h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

$$u(x-h) = u(x) - h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) - \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

სასრული სხვაობები

ტეილორის ფორმულა

$$u(x+h) = u(x) + h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u(x-h) = u(x) - h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) - \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

სასრული სხვაობები

ტეილორის ფორმულა

$$u(x+h) = u(x) + h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u(x-h) = u(x) - h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) - \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

სასრული სხვაობები

ტეილორის ფორმულა

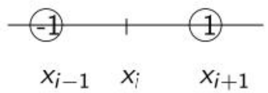
$$u(x+h) = u(x) + h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h)-u(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u(x-h) = u(x) - h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) - \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$u'(x) = \frac{u(x)-u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$



შაბლონი

სასრული სხვაობები

ტეილორის ფორმულა

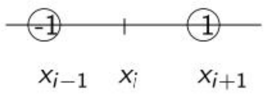
$$u(x+h) = u(x) + h\, u'(x) + \frac{h^2}{2!} u''(x) + \frac{h^3}{3!} u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u(x-h) = u(x) - h\, u'(x) + \frac{h^2}{2!} u''(x) - \frac{h^3}{3!} u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$



შაბლონი

$$u''(x) \approx \frac{1}{h}\left[\frac{u(x+h) - u(x)}{h} - \frac{u(x) - u(x-h)}{h}\right]$$

სასრული სხვაობები

რომელი რიგის პოლინომებისთვის არის ეს ფორმულები ზუსტი?

ტეილორის ფორმულა

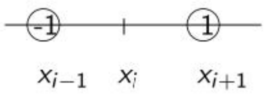
$$u(x+h) = u(x) + h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h)-u(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u(x-h) = u(x) - h\,u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) - \frac{h^3}{3!}u'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$u'(x) = \frac{u(x)-u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

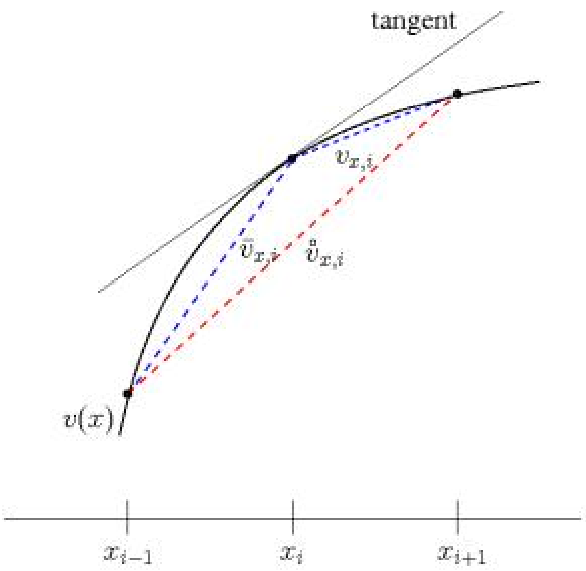


შაბლონი

$$u''(x) \approx \frac{1}{h}\left[\frac{u(x+h)-u(x)}{h} - \frac{u(x)-u(x-h)}{h}\right]$$

სასრული სხვაობები

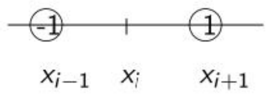
რომელი რიგის პოლინომებისთვის არის ეს ფორმულები ზუსტი?



$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$



შაბლონი

სხვა მიდგომები

- ინტერპოლება, საინტერპოლაციო ფორმულის გაწარმოება
- კომპაქტური გაწარმოების ფორმულები

ლაქსის ეკვივალენტობის თეორემა

აპროქსიმაცია + მდგრადობა = კრებადობა

ლაქსის ეკვივალენტობის თეორემა

აპროქსიმაცია + მდგრადობა = კრებადობა

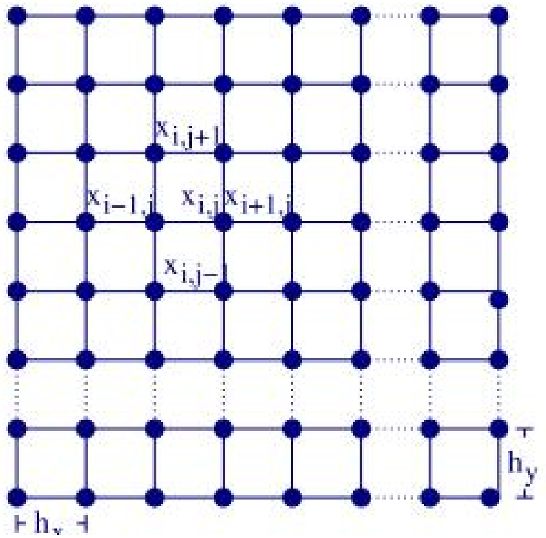
?

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$\Omega_h := \{(ih, jh) \colon i, j = 1, \ldots, n-1\}$

$h = \frac{1}{n}$:

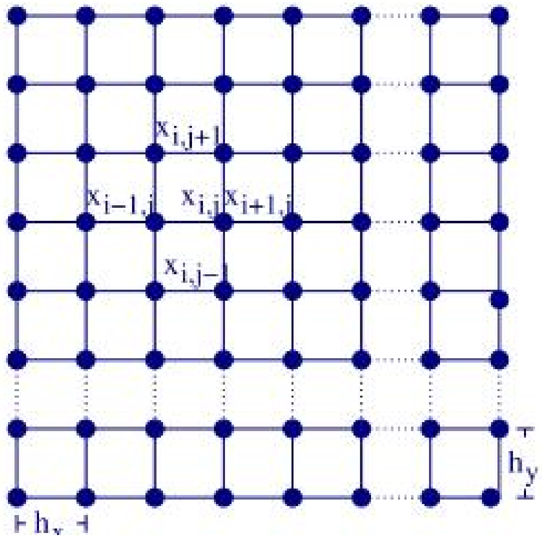
$u_{i,j} \approx u(x_{i,j})$.



პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$\Omega_h := \{(ih, jh) \colon i, j = 1, \ldots, n-1\}$$

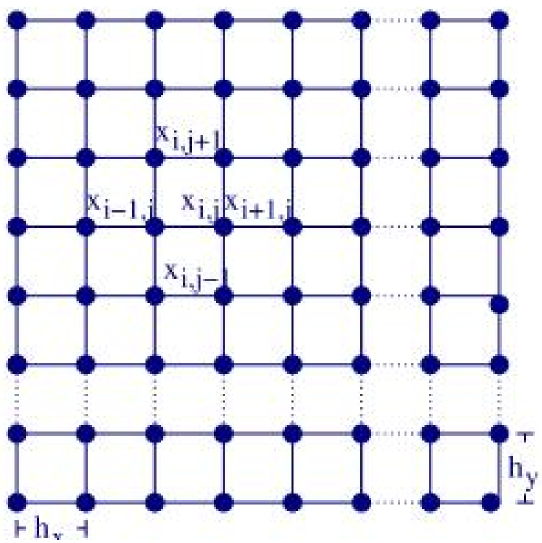
$$h = \frac{1}{n}\colon \qquad u_{i,j} \approx u(x_{i,j}).$$



$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_k) \approx \begin{cases} \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_k)}{h_x} \\ \dfrac{u(x_k) - u(x_{k-1})}{h_x} \\ \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_{k-1})}{2h_x} \end{cases}$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$\Omega_h := \{(ih, jh) : i, j = 1, \ldots, n-1\}$$



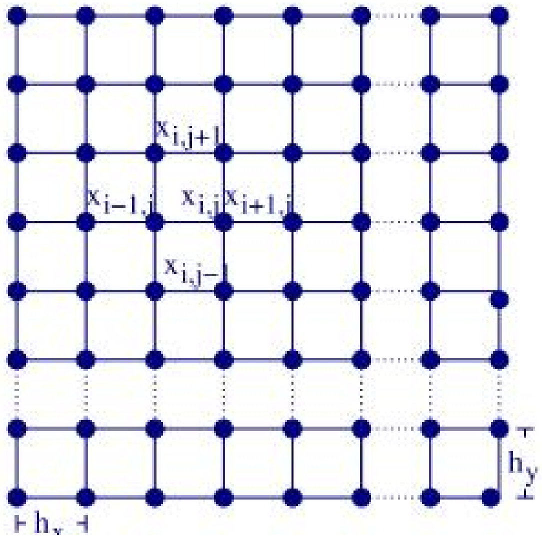
$h = \frac{1}{n}$: $\qquad u_{i,j} \approx u(x_{i,j})$.

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_k) \approx \begin{cases} \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_k)}{h_x} \\ \dfrac{u(x_k) - u(x_{k-1})}{h_x} \\ \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_{k-1})}{2h_x} \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_k) \approx \frac{u(x_{k+1}) - 2u(x_k) + u(x_{k-1})}{h_x^2}$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$\Omega_h := \{(ih, jh) \colon i, j = 1, \dots, n-1\}$$



$h = \frac{1}{n}$: $\quad u_{i,j} \approx u(x_{i,j})$.

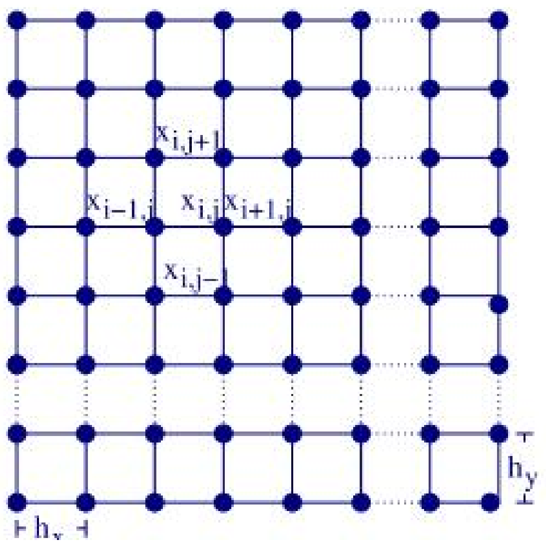
$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_k) \approx \begin{cases} \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_k)}{h_x} \\ \dfrac{u(x_k) - u(x_{k-1})}{h_x} \\ \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_{k-1})}{2h_x} \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_k) \approx \frac{u(x_{k+1}) - 2u(x_k) + u(x_{k-1})}{h_x^2}$$

$$(u_{xx} + u_{yy})(x_{i,j}) \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2}$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$\Omega_h := \{(ih, jh) : i, j = 1, \ldots, n-1\}$$



$$h = \tfrac{1}{n}: \qquad u_{i,j} \approx u(x_{i,j}).$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_k) \approx \begin{cases} \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_k)}{h_x} \\ \dfrac{u(x_k) - u(x_{k-1})}{h_x} \\ \dfrac{u(x_{k+1}) - u(x_{k-1})}{2h_x} \end{cases} \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_k) \approx \frac{u(x_{k+1}) - 2u(x_k) + u(x_{k-1})}{h_x^2}$$

$$(u_{xx} + u_{yy})(x_{i,j}) \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2}$$

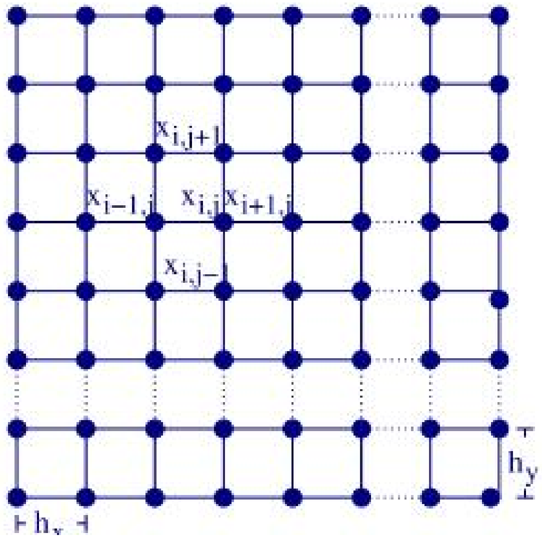
$$-\frac{1}{h^2}\left(u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j}\right) = f(x_{i,j})$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

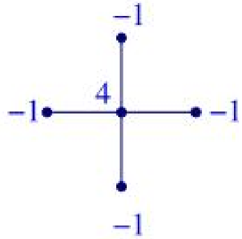
$\Omega_h := \{(ih, jh) \colon i, j = 1, \ldots, n-1\}$

$h = \frac{1}{n}$:

$u_{i,j} \approx u(x_{i,j})$.



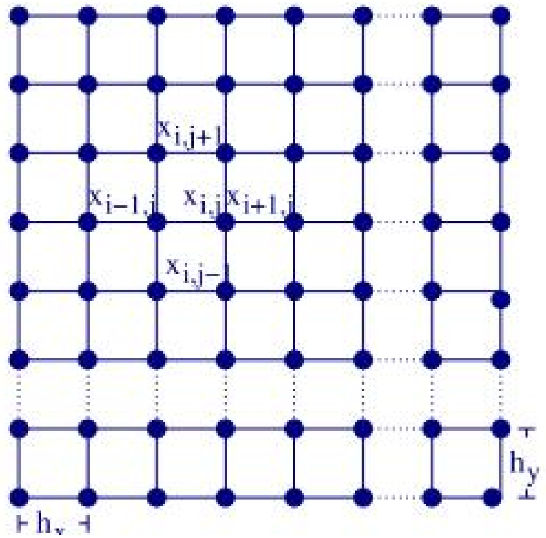
$$\begin{bmatrix} & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & \end{bmatrix}$$



$$-\frac{1}{h^2}\left(u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j}\right) = f(x_{i,j})$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$\Omega_h := \{(ih, jh) \colon i, j = 1, \ldots, n-1\}$$

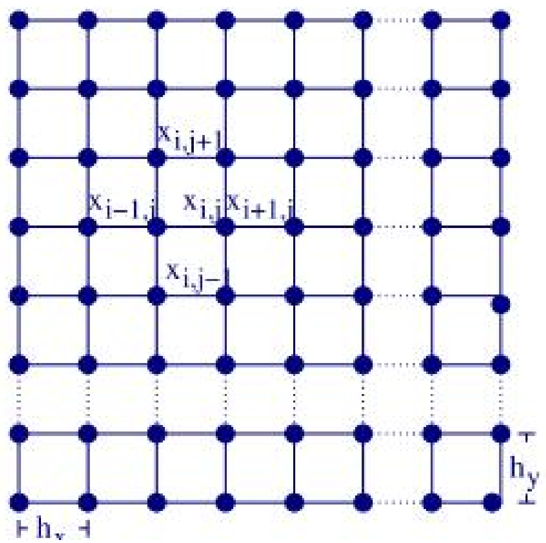


$$u_{0,j} = u_{n,j} = u_{i,0} = u_{i,n} = 0 \quad \text{for} \quad i, j = 0, \ldots, n$$

$$-\frac{(u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j})}{h^2} = f(x_{i,j}) \quad \text{for} \quad i, j = 1, \ldots, n-1$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$\Omega_h := \{(ih, jh) \colon i, j = 1, \ldots, n-1\}$$



$$u_{0,j} = u_{n,j} = u_{i,0} = u_{i,n} = 0 \quad \text{for} \quad i, j = 0, \ldots, n$$

$$-\frac{(u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j})}{h^2} = f(x_{i,j}) \quad \text{for} \quad i, j = 1, \ldots, n-1$$

$$A_h u_h = f_h,$$

$$u_h := (u_{1,1}, \ldots, u_{1,n}, u_{2,1}, \ldots u_{n-2,n-1}, u_{n-1,1}, \ldots, u_{n-1,n-1})^T,$$

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 4 & -1 & & -1 & & & \\ -1 & \ddots & \ddots & & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots & \\ -1 & & \ddots & \ddots & \ddots & & -1 \\ & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & & -1 & 4 \end{pmatrix} \qquad A_h = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} B_h & -I & 0 & \cdots & 0 \\ -I & B_h & -I & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -I & B_h & -I \\ 0 & \cdots & 0 & -I & B_h \end{pmatrix}$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

$$u_{0,j} = u_{n,j} = u_{i,0} = u_{i,n} = 0 \quad \text{for} \quad i,j = 0,\dots,n$$

$$-\frac{(u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j})}{h^2} = f(x_{i,j}) \quad \text{for} \quad i,j = 1,\dots,n-1$$

$$A_h u_h = f_h,$$

$$u_h := (u_{1,1},\dots,u_{1,n}, u_{2,1},\dots u_{n-2,n-1}, u_{n-1,1},\dots,u_{n-1,n-1})^T,$$

$$B_h = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 4 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 4 & -1 & & -1 & & & & \\ -1 & \ddots & \ddots & & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots & & \\ -1 & & \ddots & \ddots & \ddots & & -1 \\ & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

$$A_h = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} B_h & -I & 0 & \cdots & 0 \\ -I & B_h & -I & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -I & B_h & -I \\ 0 & \cdots & 0 & -I & B_h \end{pmatrix}$$

პუასონის განტოლების დისკრეტიზაცია

წრფივ ალგებრულ განტოლებათა სისტემა
ბლოკური სტრუქტურის მატრიცით

ამოხსნის მეთოდები:
პირდაპირი და იტერაციული

$$u_{0,j} = u_{n,j} = u_{i,0} = u_{i,n} = 0 \quad \text{for} \quad i, j = 0, \ldots, n$$

$$-\frac{(u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j})}{h^2} = f(x_{i,j}) \quad \text{for} \quad i, j = 1, \ldots, n-1$$

$$A_h u_h = f_h,$$

$$u_h := (u_{1,1}, \ldots, u_{1,n}, u_{2,1}, \ldots u_{n-2,n-1}, u_{n-1,1}, \ldots, u_{n-1,n-1})^T,$$

$$B_h = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 4 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 4 & -1 & & -1 & & & \\ -1 & \ddots & \ddots & & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots & \\ -1 & & \ddots & \ddots & \ddots & & -1 \\ & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

$$A_h = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} B_h & -I & 0 & \cdots & 0 \\ -I & B_h & -I & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -I & B_h & -I \\ 0 & \cdots & 0 & -I & B_h \end{pmatrix}$$

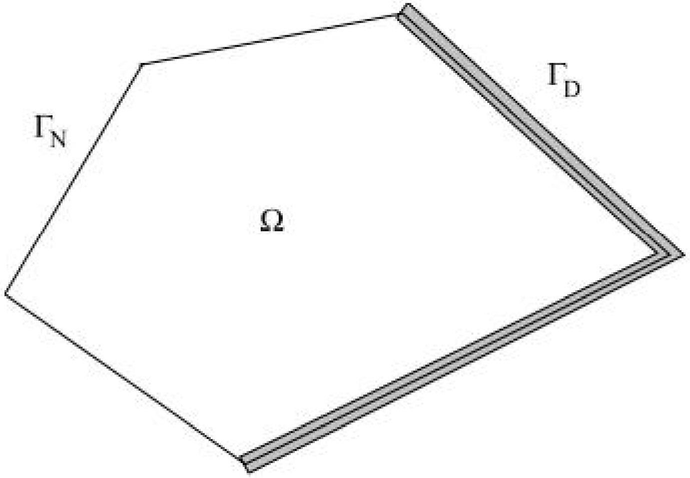
სასრულ ელემენტთა მეთოდი

A gentle introduction to the Finite Element Method

Francisco–Javier Sayas

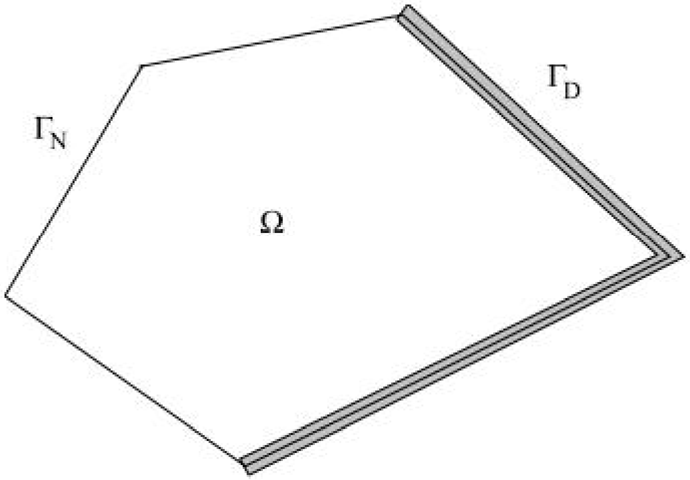
2008

სასრულ ელემენტთა მეთოდი



$$\begin{cases} -\Delta u + c\,u = f, & \text{in } \Omega, \\ u = g_0, & \text{on } \Gamma_D, \\ \partial_n u = g_1, & \text{on } \Gamma_N. \end{cases}$$

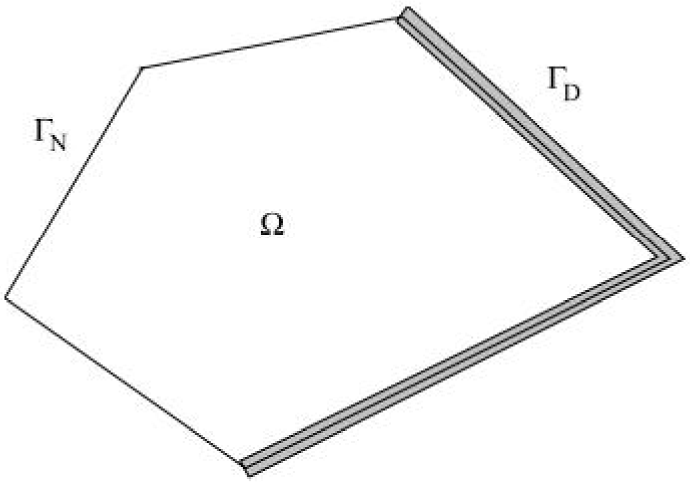
სასრული ელემენტთა მეთოდი



$$\begin{cases} -\Delta u + c\,u = f, & \text{in } \Omega, \\ u = g_0, & \text{on } \Gamma_D, \\ \partial_n u = g_1, & \text{on } \Gamma_N. \end{cases}$$

$$\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\,v = \int_\Omega f\,v + \int_{\Gamma_N} g_1\,v + \int_{\Gamma_D} (\partial_n u)\,v.$$

სასრულ ელემენტთა მეთოდი

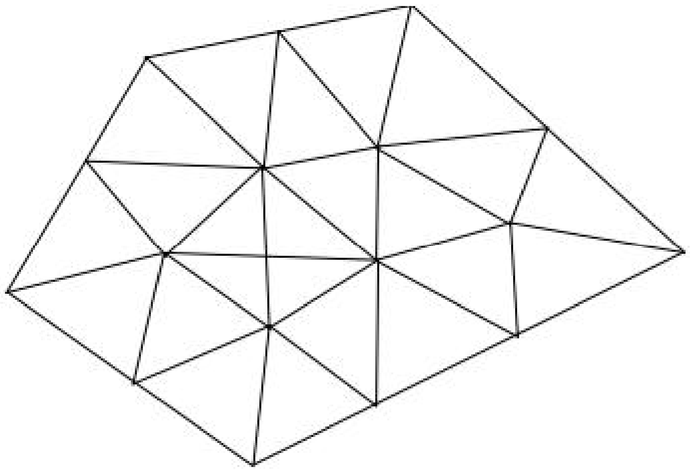


$$\begin{cases} -\Delta u + c\,u = f, & \text{in } \Omega, \\ u = g_0, & \text{on } \Gamma_D, \\ \partial_n u = g_1, & \text{on } \Gamma_N. \end{cases}$$

$$\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\,v = \int_\Omega f\,v + \int_{\Gamma_N} g_1\,v + \int_{\Gamma_D} (\partial_n u)\,v.$$

$$\begin{cases} \text{find } u \text{ such that} \\ u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D, \\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\,v = \int_\Omega f\,v + \int_{\Gamma_N} g_1\,v, \qquad \text{for all } v, \text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D. \end{cases}$$

სასრული ელემენტთა მეთოდი

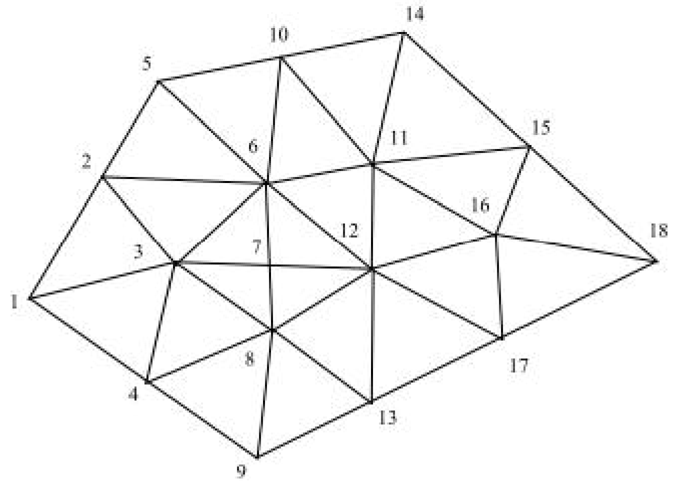


$$\begin{cases} -\Delta u + c\, u = f, & \text{in } \Omega, \\ u = g_0, & \text{on } \Gamma_D, \\ \partial_n u = g_1, & \text{on } \Gamma_N. \end{cases}$$

$$\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\, v = \int_\Omega f\, v + \int_{\Gamma_N} g_1\, v + \int_{\Gamma_D} (\partial_n u)\, v.$$

$$\begin{cases} \text{find } u \text{ such that} \\ u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D, \\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\, v = \int_\Omega f\, v + \int_{\Gamma_N} g_1\, v, \qquad \text{for all } v, \text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D. \end{cases}$$

სასრულ ელემენტთა მეთოდი

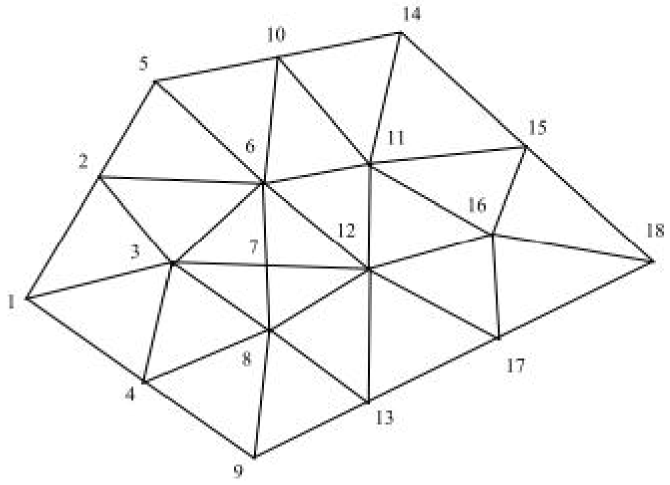


$$
\begin{cases}
-\Delta u + c\, u = f, & \text{in } \Omega, \\
u = g_0, & \text{on } \Gamma_D, \\
\partial_n u = g_1, & \text{on } \Gamma_N.
\end{cases}
$$

$$u_h = \sum_{j=1}^{N} u_j\, \varphi_j$$

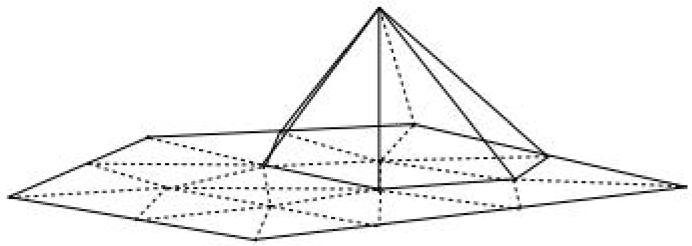
$$
\begin{cases}
\text{find } u \text{ such that} \\
u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D, \\
\displaystyle\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\, v = \int_\Omega f\, v + \int_{\Gamma_N} g_1\, v, \qquad \text{for all } v, \text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D.
\end{cases}
$$

სასრულ ელემენტთა მეთოდი



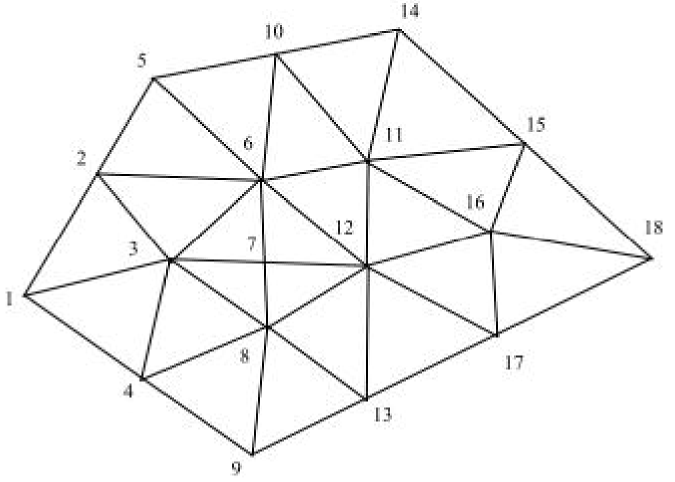
$$\begin{cases} -\Delta u + c\,u = f, & \text{in } \Omega, \\ u = g_0, & \text{on } \Gamma_D, \\ \partial_n u = g_1, & \text{on } \Gamma_N. \end{cases}$$

$$u_h = \sum_{j=1}^{N} u_j\,\varphi_j$$



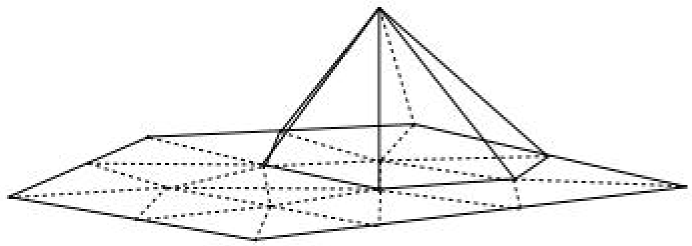
$$\begin{cases} \text{find } u \text{ such that} \\ u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D, \\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\,v = \int_\Omega f\,v + \int_{\Gamma_N} g_1\,v, \qquad \text{for all } v, \text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D. \end{cases}$$

სასრული ელემენტთა მეთოდი



$$
\left[\begin{array}{l}
\text{find } u_h \in V_h, \text{ such that} \\
u_h(\mathbf{p}) = g_0(\mathbf{p}), \qquad \text{for all Dirichlet node } \mathbf{p}, \\
\displaystyle\int_\Omega \nabla u_h \cdot \nabla v_h + c \int_\Omega u_h\, v_h = \int_\Omega f\, v_h + \int_{\Gamma_N} g_1\, v_h, \qquad \forall v_h \in V_h^{\Gamma_D}.
\end{array}\right.
$$

$$u_h = \sum_{j=1}^{N} u_j\, \varphi_j$$



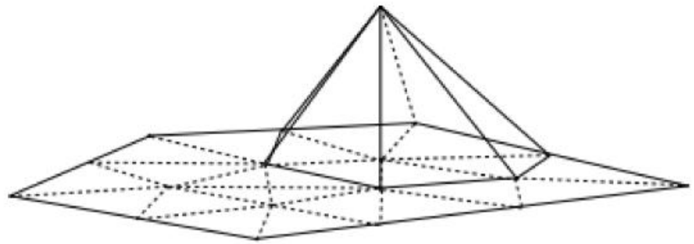
$$
\left[\begin{array}{l}
\text{find } u \text{ such that} \\
u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D, \\
\displaystyle\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v + c \int_\Omega u\, v = \int_\Omega f\, v + \int_{\Gamma_N} g_1\, v, \qquad \text{for all } v, \text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D.
\end{array}\right.
$$

სასრული ელემენტთა მეთოდი

$$\sum_{j\in \mathrm{Ind}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)u_j = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i$$
$$-\sum_{j\in \mathrm{Dir}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)g_0(\mathbf{p}_j).$$

$$\left[\begin{array}{l}\text{find } u_h \in V_h,\text{ such that}\\ u_h(\mathbf{p}) = g_0(\mathbf{p}), \qquad \text{for all Dirichlet node } \mathbf{p},\\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u_h\cdot\nabla v_h + c\int_\Omega u_h\,v_h = \int_\Omega f\,v_h + \int_{\Gamma_N} g_1\,v_h, \qquad \forall v_h \in V_h^{\Gamma_D}.\end{array}\right.$$

$$u_h = \sum_{j=1}^{N} u_j\,\varphi_j$$



$$\left[\begin{array}{l}\text{find } u \text{ such that}\\ u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D,\\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v + c\int_\Omega u\,v = \int_\Omega f\,v + \int_{\Gamma_N} g_1\,v, \qquad \text{for all } v,\text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D.\end{array}\right.$$

სასრულ ელემენტთა მეთოდი

$$\sum_{j\in\mathrm{Ind}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)u_j = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i$$

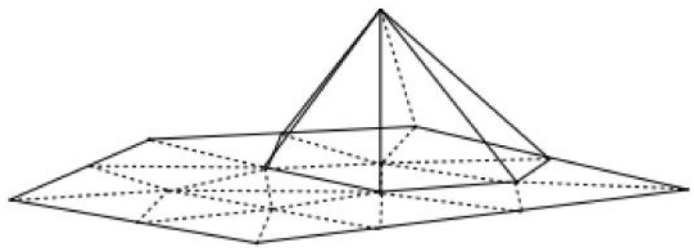
$$-\sum_{j\in\mathrm{Dir}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)g_0(\mathbf{p}_j).$$

$$\left[\begin{array}{l}\text{find } u_h \in V_h, \text{ such that}\\ u_h(\mathbf{p}) = g_0(\mathbf{p}), \qquad \text{for all Dirichlet node } \mathbf{p},\\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u_h\cdot\nabla v_h + c\int_\Omega u_h\,v_h = \int_\Omega f\,v_h + \int_{\Gamma_N} g_1\,v_h, \qquad \forall v_h \in V_h^{\Gamma_D}.\end{array}\right.$$

$$W_{ij} = \int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i \qquad\qquad M_{ij} = \int_\Omega \varphi_j\,\varphi_i.$$

$$b_i = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i,$$

$$u_h = \sum_{j=1}^N u_j\,\varphi_j$$



$$\left[\begin{array}{l}\text{find } u \text{ such that}\\ u = g_0, \qquad \text{on } \Gamma_D,\\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v + c\int_\Omega u\,v = \int_\Omega f\,v + \int_{\Gamma_N} g_1\,v, \qquad \text{for all } v, \text{ such that } v = 0 \text{ on } \Gamma_D.\end{array}\right.$$

სასრული ელემენტთა მეთოდი

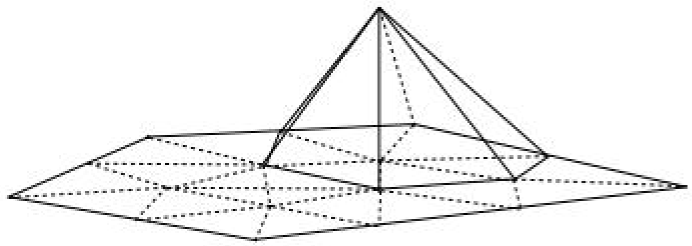
$$\sum_{j\in\text{Ind}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)u_j = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i$$
$$-\sum_{j\in\text{Dir}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)g_0(\mathbf{p}_j).$$

$$\left[\begin{array}{l}\text{find } u_h\in V_h, \text{ such that}\\ u_h(\mathbf{p}) = g_0(\mathbf{p}), \qquad \text{for all Dirichlet node } \mathbf{p},\\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u_h\cdot\nabla v_h + c\int_\Omega u_h\,v_h = \int_\Omega f\,v_h + \int_{\Gamma_N} g_1\,v_h, \qquad \forall v_h\in V_h^{\Gamma_D}.\end{array}\right.$$

$$W_{ij} = \int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i \qquad M_{ij} = \int_\Omega \varphi_j\,\varphi_i.$$

$$b_i = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i,$$

$$u_h = \sum_{j=1}^N u_j\,\varphi_j$$



$$\sum_{j\in\text{Ind}}\Big(W_{ij} + c\,M_{ij}\Big)u_j = b_i - \sum_{j\in\text{Dir}}\Big(W_{ij}+c\,M_{ij}\Big)g_0(\mathbf{p}_j),$$

სასრული ელემენტთა მეთოდი

$$\sum_{j\in\mathrm{Ind}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)u_j = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i - \sum_{j\in\mathrm{Dir}}\left(\int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i + c\int_\Omega \varphi_j\varphi_j\right)g_0(\mathbf{p}_j).$$

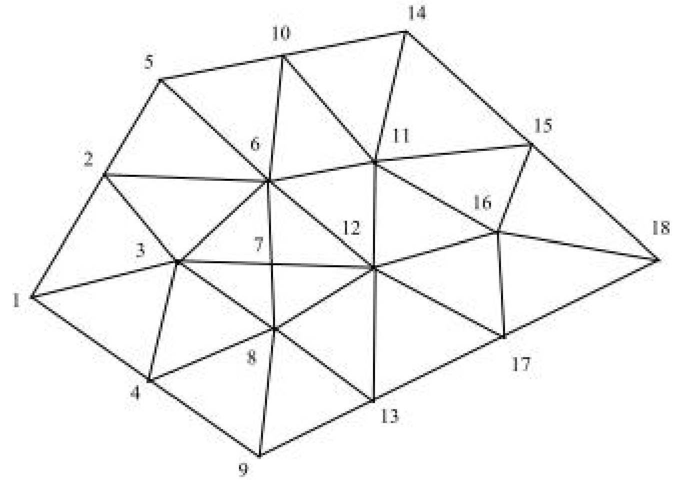
$$\left[\begin{array}{l} \text{find } u_h\in V_h, \text{ such that} \\ u_h(\mathbf{p}) = g_0(\mathbf{p}), \qquad \text{for all Dirichlet node } \mathbf{p}, \\ \displaystyle\int_\Omega \nabla u_h\cdot\nabla v_h + c\int_\Omega u_h\,v_h = \int_\Omega f\,v_h + \int_{\Gamma_N} g_1\,v_h, \qquad \forall v_h\in V_h^{\Gamma_D}. \end{array}\right.$$

$$W_{ij} = \int_\Omega \nabla\varphi_j\cdot\nabla\varphi_i \qquad M_{ij} = \int_\Omega \varphi_j\,\varphi_i.$$

$$b_i = \int_\Omega f\,\varphi_i + \int_{\Gamma_N} g_1\,\varphi_i,$$

$$u_h = \sum_{j=1}^{N} u_j\,\varphi_j$$

$$\sum_{j\in\mathrm{Ind}}\Big(W_{ij} + c\,M_{ij}\Big)u_j = b_i - \sum_{j\in\mathrm{Dir}}\Big(W_{ij} + c\,M_{ij}\Big)g_0(\mathbf{p}_j),$$



სასრული მოცულობათა მეთოდი

Finite Volume Methods

Robert Eymard[1], Thierry Gallouët[2] and Raphaèle Herbin[3]

January 2003. This manuscript is an update of the preprint
n0 97-19 du LATP, UMR 6632, Marseille, September 1997
which appeared in Handbook of Numerical Analysis,
P.G. Ciarlet, J.L. Lions eds, vol 7, pp 713-1020

სასრულ მოცულობათა მეთოდი

Finite Volume Methods

Robert Eymard[1], Thierry Gallouët[2] and Raphaèle Herbin[3]

January 2003. This manuscript is an update of the preprint
n0 97-19 du LATP, UMR 6632, Marseille, September 1997
which appeared in Handbook of Numerical Analysis,
P.G. Ciarlet, J.L. Lions eds, vol 7, pp 713-1020

სასრულ მოცულობათა მეთოდი

Finite Volume Methods

Robert Eymard[1], Thierry Gallouët[2] and Raphaèle Herbin[3]

January 2003. This manuscript is an update of the preprint
n0 97-19 du LATP, UMR 6632, Marseille, September 1997
which appeared in Handbook of Numerical Analysis,
P.G. Ciarlet, J.L. Lions eds, vol 7, pp 713-1020

1. სასრულ ელემნტთა ბადე
2. სასრულ სხავობათა სიმარტივე
3. არაგლუვი მონაცემების და წყვეტილი კოეფიციენტების შემთხვევაში

დავალება

- მიიყვანეთ თითოეული მეთოდი წრფივ ალგებრულ განტოლებათა სისტემამდე
- ამოხსენით სტანდარტული პროგრამის გამოყენებით
- შეადარეთ შედეგები

მადლობას მოგახსენებთ
ყურადღებისთვის

კვანტური მექანიკის რიცხვითი ანალიზის შესავალი 4

<u>რამაზ ბოჭორიშვილი</u>

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

სეზონური სკოლა, სიღნაღი, **1-9** თებერვალი **2016**

გეგმა

1. შრედინგერის განტოლება
2. მატრიცული მეთოდი
3. ნუმეროვის მეთოდი
4. სროლის მეთოდი
5. კოეფიციენტთა აპროქსიმაციის მეთოდი
6. პირველი რიგის კერძო წარმოებულებიან სისტემაზე დაყვანის მეთოდი
7. დავალება

შრედინგერის განტოლება

$$-\frac{\hbar}{2m}y''(x) + (V(x) - E)y(x) = 0, \qquad a_0y(a) + b_0y'(a) = 0, \quad a_1y(b) + b_1y'(b) = 0$$

$$y''(x) = (V(x) - E)y(x).$$

Definition 4. The SL differential equation on a finite interval $[a, b]$ with homogeneous mixed boundary conditions, that is,

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{d}{dx}\right]y + q(x)y &= \lambda\omega(x)y, \qquad x \in [a, b] \\ c_ay(a) + d_ay'(a) &= 0 \\ c_by(b) + d_by'(b) &= 0 \end{aligned}$$

with $p(x) > 0$ and $\omega(x) > 0$ for $x \in [a, b]$ is called as *regular Sturm-Liouville system* (or problem).

მატრიცის მეთოდი

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x);\ a \le x \le b,$$

მატრიცის მეთოდი

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x);\ a \le x \le b,$$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2)$$

მატრიცის მეთოდი

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x); \; a \le x \le b,$$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2)$$

$$\frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2) + k_i y_i = F_i.$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x); \; a \leq x \leq b,$$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

$$\frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2) + k_i y_i = F_i.$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2)$$

$$y(x+h) = y(x) + hy^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2!}y^{(2)}(x) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x) + \cdots$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x); \; a \le x \le b,$$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

$$\frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2) + k_i y_i = F_i.$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2)$$

$$y(x+h) = y(x) + hy^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2!}y^{(2)}(x) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x) + \cdots$$

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + h^2 y^{(2)}(x) + \frac{h^4}{12}y^{(4)}(x) + O(h^6).$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x); \; a \le x \le b,$$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

$$\frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2) + k_i y_i = F_i.$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2)$$

$$y(x+h) = y(x) + hy^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2!}y^{(2)}(x) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x) + \cdots$$

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + h^2y^{(2)}(x) + \frac{h^4}{12}y^{(4)}(x) + O(h^6).$$

$$(1 + \tfrac{h^2}{12}\tfrac{d^2}{dx^2})$$

$$y^{(2)}(x) = \frac{y(x+h) + y(x-h) - 2y(x)}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x) + O(h^4).$$

$$h^2y^{(2)}(x) + \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x) + k(x)y(x) + \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left(k(x)y(x)\right) \approx 0.$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = F(x); \; a \le x \le b,$$

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2)$$

$$\frac{y_{i+1} + y_{i-1} - 2y_i}{h^2} + O(h^2) + k_i y_i = F_i.$$

$$\boxed{y_{i+1} = \frac{2\left(1 - \frac{5}{12}h^2 k_i y_i\right) - \left(1 + \frac{1}{12}h^2 k_{i-1} y_{i-1}\right)}{1 + \frac{h^2}{12}k_{i+1}} + \frac{h^2}{12}\left(F_{i+1} + F_{i-1} - 2F_i\right) + O(h^6).}$$

$$y(x+h) = y(x) + hy^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2!}y^{(2)}(x) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}y^{(4)}(x) + \cdots$$

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\right)$$

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + h^2 y^{(2)}(x) + \frac{h^4}{12}y^{(4)}(x) + O(h^6).$$

$$y^{(2)}(x) = \frac{y(x+h) + y(x-h) - 2y(x)}{h^2} - \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x) + O(h^4).$$

$$h^2 y^{(2)}(x) + \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x) + k(x)y(x) + \frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left(k(x)y(x)\right) \approx 0.$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$-y'' + q(x)y = Ey,$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$-y'' + q(x)y = Ey,$$

$$y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} = \frac{h^2}{12}\left[(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 10(q(x_i) - E)y_i + (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$-y'' + q(x)y = Ey,$$

$$y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} = \frac{h^2}{12}\left[(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 10(q(x_i) - E)y_i + (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

$$\frac{-y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1}}{h^2} + (q(x_i) - E)y_i =$$
$$\frac{1}{12}\left[-(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 2(q(x_i) - E)y_i - (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$-y'' + q(x)y = Ey,$$

$$y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} = \frac{h^2}{12}\left[(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 10(q(x_i) - E)y_i + (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

$$\frac{-y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1}}{h^2} + (q(x_i) - E)y_i =$$
$$\frac{1}{12}\left[-(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 2(q(x_i) - E)y_i - (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

$$\mathbf{A}Y = E\mathbf{B}Y \qquad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h^2}\mathbf{M} + \mathbf{BQ}, \quad \mathbf{B} = \mathbf{I} - \frac{1}{12}\mathbf{M}$$

ნუმეროვის მეთოდი, 1933

$$-y'' + q(x)y = Ey,$$

$$y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} = \frac{h^2}{12}\left[(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 10(q(x_i) - E)y_i + (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

$$\frac{-y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1}}{h^2} + (q(x_i) - E)y_i =$$
$$\frac{1}{12}\left[-(q(x_{i-1}) - E)y_{i-1} + 2(q(x_i) - E)y_i - (q(x_{i+1}) - E)y_{i+1}\right],$$

$$\mathbf{A}Y = E\mathbf{B}Y \qquad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} q(x_1) & & & \\ & q(x_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & q(x_{n-1}) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h^2}\mathbf{M} + \mathbf{B}\mathbf{Q}, \quad \mathbf{B} = \mathbf{I} - \frac{1}{12}\mathbf{M}$$

სროლის მეთოდი

პრინციპი:
სასაზღვრო ამოცანის დაყვანა, კოშის ამოცანაზე,
პირობების დამთხვევის უზრუნველყოფა ენერგიის შერჩევის ხარჯზე

კოეფიციენტთა აპროქსიმაციის მეთოდი

- კოეფიციენტის აპროქსიმაცია ისე, რომ შესაძლებელი გახდეს ანალიზური მეთოდების გამოყენება უბან-უბან
-

პირველი რიგის ჰიპერბოლურ სისტემაზე დაყვანის მეთოდი

- ჩვეულებრივი დიფერენციალური განტოლების ამოსახსნელად კერძოწარმოებულებიანი განტოლების ამოხსნა

დავალება

[redacted]

მადლობას მოგახსენებთ
ყურადღებისთვის