# Peremérték feladat 1D-ben

2002. március 13.

A fizika számos fontos differenciál egyenlete

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = S(x) \tag{1}$$

alakú, ahol $k^2(x)$ valós függvény. Ha $S(x) \neq 0$ inhomogén egyenletet kapunk. Pl a gömbszimmetrikus $\rho(r)$ töltéseloszlástól származó tér potenciájára vonatkozó Poisson egyenlet:

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

Abban az esetben, ha $S(x) = 0$ homogén egyenletet kapunk, amelynek a megoldása periódikus, ha $k^2(x)$ pozitív és exponenciálisan növő vagy csökkenő, ha $k^2(x)$ negatív. Erre az esetre példa a az egydimenziós potenciáltérbrn mozgó részecske időtől független Schrödinger egyenlete

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} + 2[\varepsilon - v(x)] = 0. \tag{2}$$

Az ilyen típusú egyenletek numrikusan megoldhatók a korábban tárgyalt algoritmusok segítségével a kezdeti feltételek ismeretében  Bizonyos esetekben mégis speciális megoldási módszereket kell alkalmaznunk. Ilyen eset, amikor a kezdeti feltételek helyett az ún. peremértékek állnak rendelkezésunkre. Ez most azt jelenti, hogy $y$ és deriváltjának valamely pontban felvett értéke helyett az $y$ értékét ismerjük valamely tartomány határain (esetünkben 2 pontban). Ennél is bonyolultabbaz a differnciál egyenlet ami valójában egy sajátérték probléma (mint pl. az iménti Schrödinger egyenlet) és meg kell találni az egyenletben szereplő paraméternek azt az értékét amelyre létezik fizikailag értelmes, a peremfeltételeket kielégítő megoldás

## Numerov algoritmus

A (1) alakú músodrendű differenciálegyenlet megoldására létezik egy egyszerű de igen hatékony módszer, a Numerov vagy Cowling módszer. Induljunk ki a második deriváltra felírt 3 pontos közelítő formulából

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{12} y_n'''' + O\left(h^4\right)$$

a jobb oldalt úgy kapjuk, hogy $y_{n+1},\ y_{n-1}$ helyére beírjuk a megfelelő $y_n$ körüli Taylor sort. Az $y_n''''$ helyére a differenciál egyenletből

$$y_n'''' = \frac{d^2}{dx^2}\left(-k^2y + S\right) = -\frac{\left(k^2y\right)_{n+1} - 2\left(k^2y\right)_n + \left(k^2y\right)_{n-1}}{h^2} + \frac{S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}}{h^2} + O\left(h^2\right)$$

amit visszaírva az előző egyenletbe némi átrendezés után

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right) y_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5h^2}{12}k_n^2\right) y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right) y_{n-1} = \frac{h^2}{12}\left(S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}\right) + O\left(h^6\right).$$

Ebből $y_{n+1}$ vagy $y_{n-1}$ kifejezhető és így $O\left(h^6\right)$ hibájú (előre vagy hátra haladó) integrálási módszert kaptunk a differenciálegyenletünkre, ami erre a differenciál egyenlet típusra pontosabb és kevesebb számolást igényel mint a 4-ed redű Runge-Kutta módszer.

# Megoldási módszerek

Most csak a (2) tipusú differenciál egyenlet megoldásával foglalkozunk. Két különbőző módszer létezik a kétpontos peremérték feladat meoldására.

Az első a **shooting** (lövöldözős) módszer Választunk valamilyen a peremfeltételekkel konzisztens értéket az egyenletben szereplő paraméterre. Ezután kiindulunk a tartomány valamelyik határáról és szokásos integráló módszerekkel vagy pl a Numerov eljárással integráljuk az egyenletet a tartomány másik határáig. A megoldásunk valószínűleg nem fogja kielégíteni az ott kiszabott határfeltételt. Új paraméter értéket választunk és elölről kezdjük az eljárást. Mindezt addig ismételjük amíg a megoldásunk másik határon is kielégíti a peremfeltételt. Természetesen a különböző paraméter értékekre a másik határfeltételtől számolt eltérésekből megjósolhatjuk, hogy milyen paraméter érték esetén lesz a másik határfeltételtől való eltérés nulla. Jelölje $\Delta(\varepsilon)$ az adott paraméter értékre számolt eltérést a másik határon felvett kezdeti feltételtől. A célunk $\Delta(\varepsilon) = 0$ egyenlet megoldásainak megtalálása, ami a szokásos gyokkereső módszerekkel elvégezhető (pl. szelő módszer).

A shooting (lövöldözős) módszer másik változata annyiban tér el, hogy mindkét határról integrálunk a tartomány belső pontjáig, ahol is összeillesztjük a két megoldást. A megfelelő paraméter értéket úgy kapjuk, hogy megköveteljük, hogy a kiválsztott belső pontban a két megoldás simán illeszkedjen.

A **relaxációs módszer**ben a differenciál egyenletet véges differencia egyenlettel helyettesítjük egy beosztást választva a kiszemelt tartományon. A megoldást is ezeken az osztáspontokban fogjuk meghatározni úgy hogy a problémát lineáris egyenletrendszerré konvertáljuk. A módszerhez szükség van egy jól választott kezdeti függvényre, amit szintén az osztáspontokon kell megadni. Ebben a módszerben éppen ennek a megadása jelenti a fő nehézséget. Ezzel a módszerrel részletesen nem foglalkozunk.