численные методы и математическое моделирование

Ю.Н. Прошин

кафедра теоретической физики

Казанского государственного университета

yurii.proshin@ksu.ru

2004-2011, Казань

Решение дифференциальных уравнений

Основные определения

$$\frac{dy}{dx} = f(y,x) \quad (1) \qquad y(x_0) = y_0 \quad (2)$$

где

y – зависимая переменная,

x – независимая переменная,

$f(y,x)$ – функция производной = правая часть,

x_0 - начальное значение независимой переменной,

y_0 - начальное значение зависимой переменной.

Основные определения

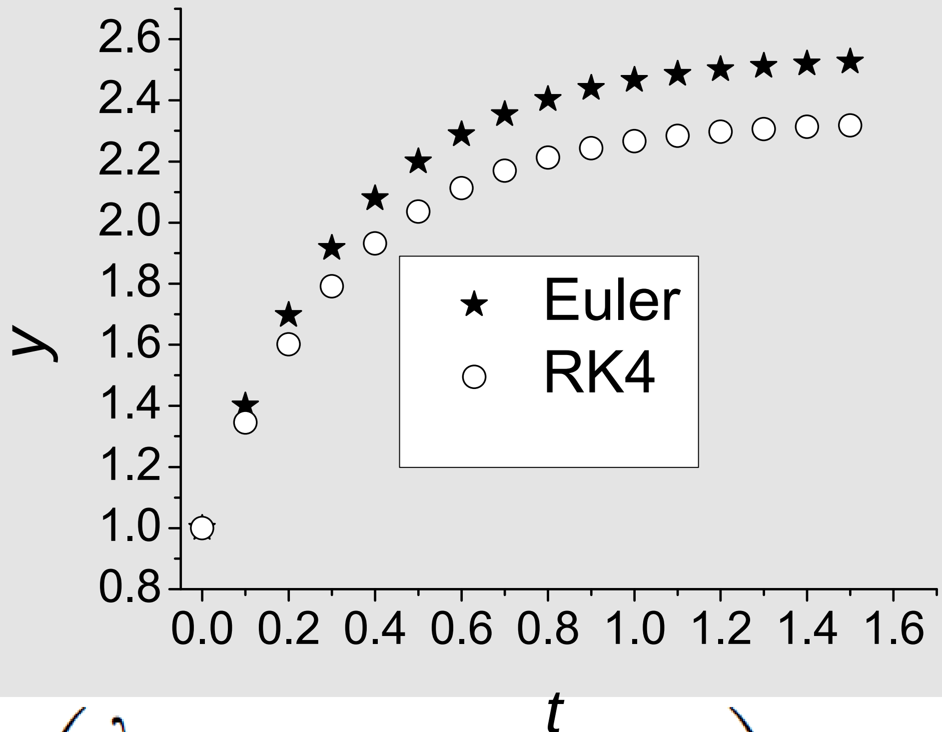
$$\frac{dy}{dt} = \lambda e^{-\alpha t} y \quad (3) \qquad y(t_0) = y_0 \quad (4)$$

Уравнение (3) – дифференциальное уравнение

- первого порядка
- линейное
- в обыкновенных производных
- с зависящими от нез. переменной коэффициентами

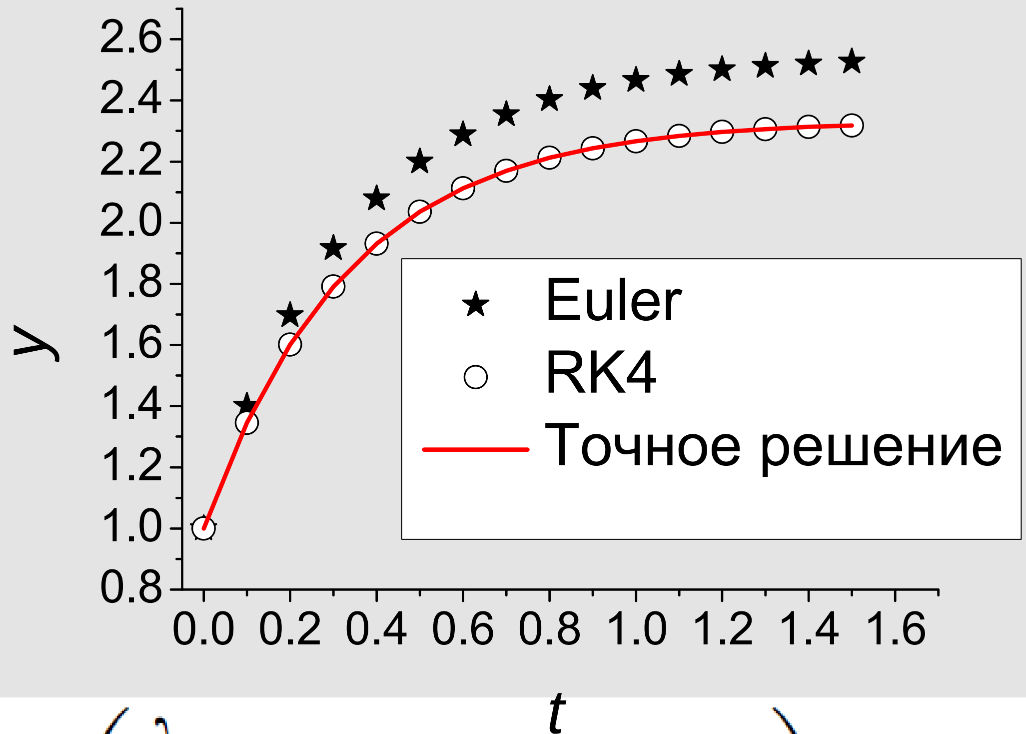
$$y(t) = y_0 \exp\left(\frac{\lambda}{\alpha}(1 - \exp(-\alpha t))\right), \qquad y(0) = y_0$$

Решения



$$y(t) = y_0 \exp\left(\frac{\lambda}{\alpha}(1 - \exp(-\alpha t))\right), \qquad y(0) = y_0$$

Решения



$$y(t) = y_0 \exp\left(\frac{\lambda}{\alpha}(1 - \exp(-\alpha t))\right), \qquad y(0) = y_0$$

Дифференциальные уравнения.

- Общий случай

$$\frac{d\vec{\mathbf{y}}}{d\vec{\mathbf{x}}} = \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{y}}, \vec{\mathbf{x}}, a, b, c, ..., \alpha, \beta, \gamma, ...)$$

$$\vec{\mathbf{y}}(\vec{\mathbf{x}}_0) = \vec{\mathbf{y}}_0$$

- Роль дифф. уравнений в физике (рост, убывание, стремление к равновесию,…, механика, молекулярная физика, квантовая механика, электродинамика, ….).

- **Примеры**

Танцы звезд

- Задача многих тел.

Уравнения Ньютона или Гамильтона.

$$m_i \frac{d^2\vec{\mathbf{r}}_i}{dt^2} = m_i\ddot{\vec{\mathbf{r}}}_i = \sum_{j=1}^{N} \vec{\mathbf{F}}_{ij} = -\gamma \sum_{j=1}^{N} \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} \vec{\mathbf{r}}_{ij}, \quad i = 1, \ldots, N$$

$$\begin{cases} \dot{p}_j = -\dfrac{\partial H}{\partial q_j} \\ \dot{q}_j = \dfrac{\partial H}{\partial p_j} \end{cases}, \quad j = 1, \ldots, n$$

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m_i} - \gamma \sum_{\substack{i,k=1 \\ i \neq k}}^{N} \frac{m_i m_k}{r_{ik}}$$

Танцы звезд

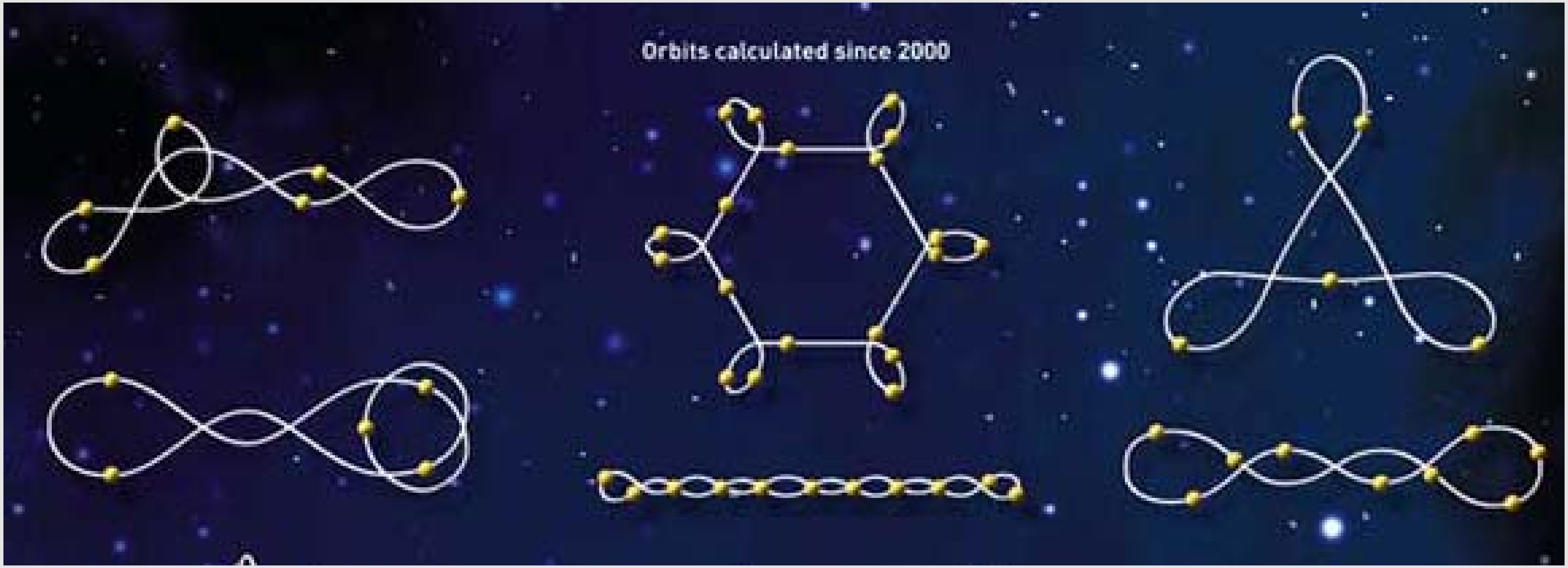
• Задача многих тел. (3 тела).

Уравнения Ньютона или Гамильтона

Танцы звезд

- Задача многих тел. (3 тела и чуть больше).

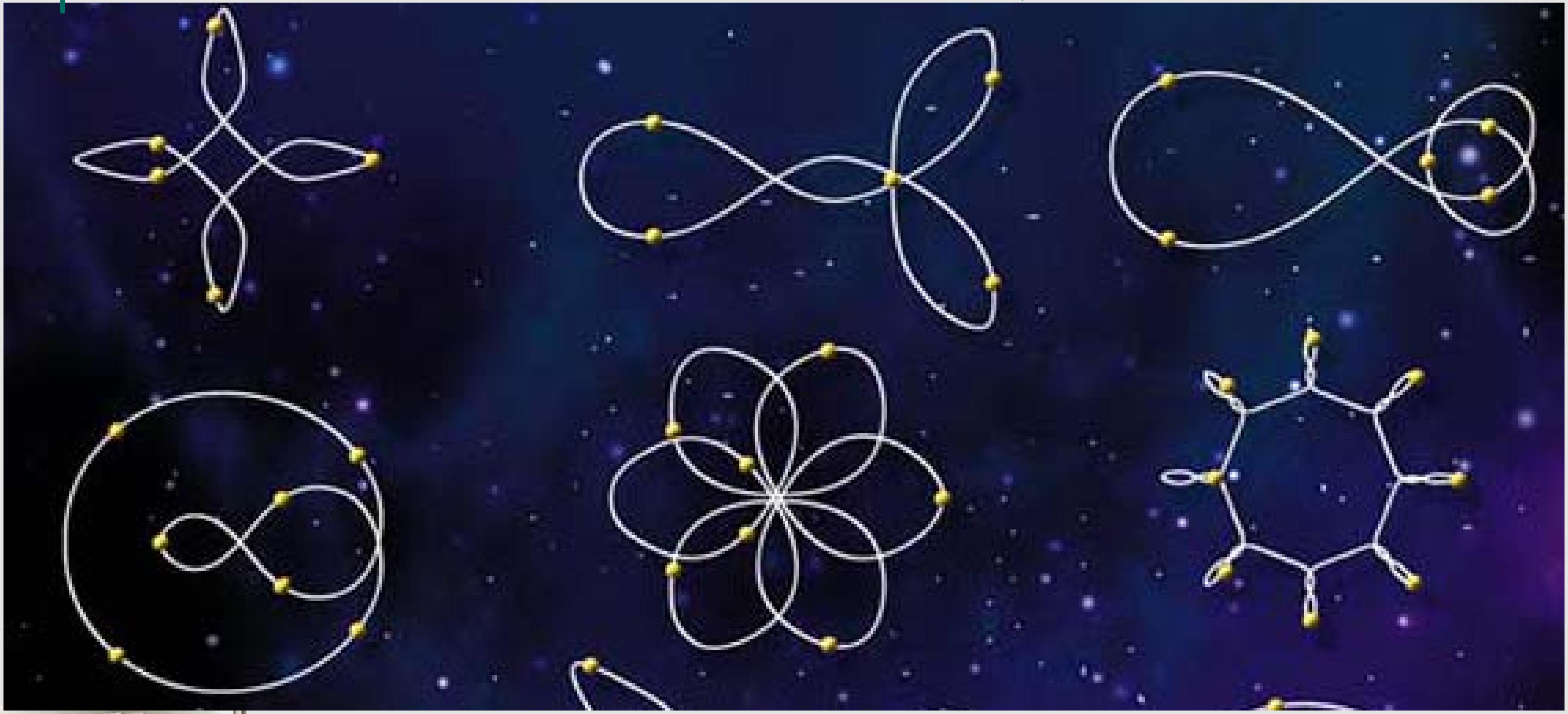
Уравнения Ньютона или Гамильтона.



Танцы звезд

• Задача многих тел. (3 тела и чуть больше).

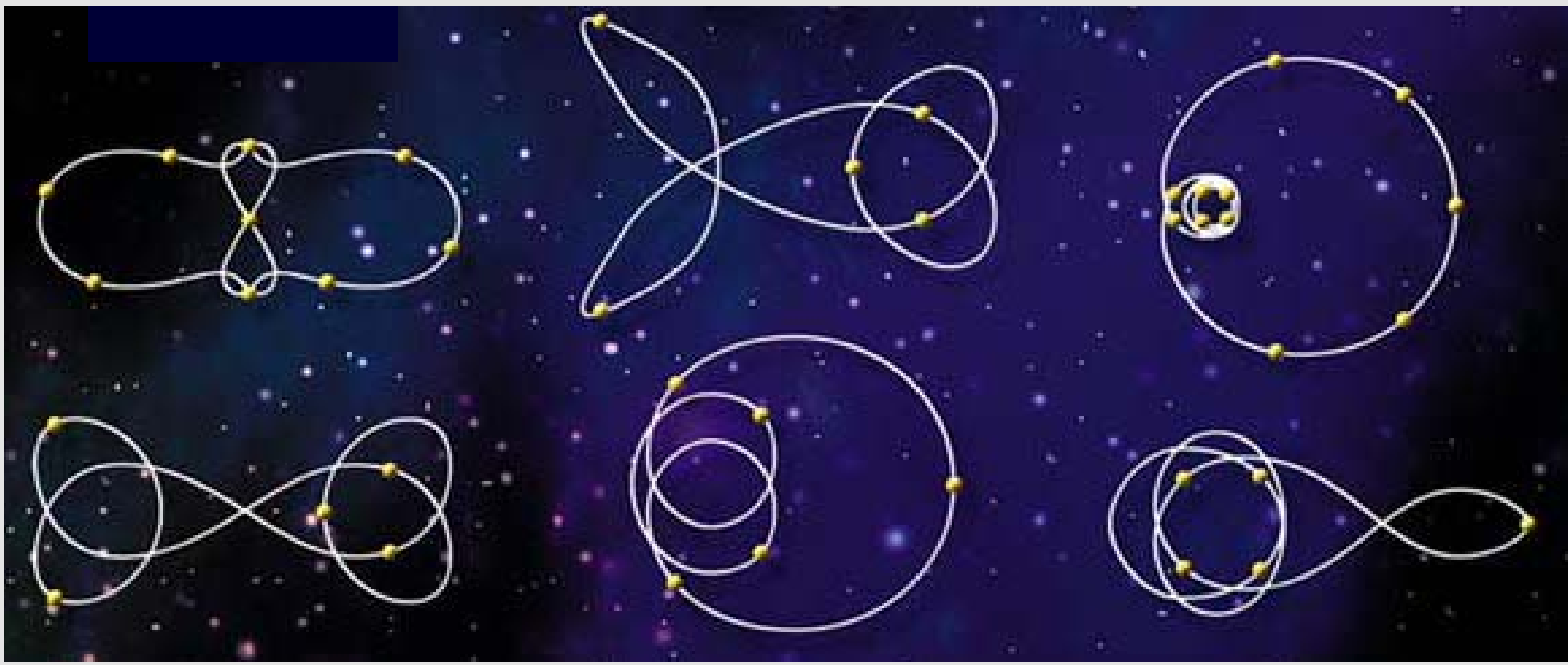
Уравнения Ньютона или Гамильтона.



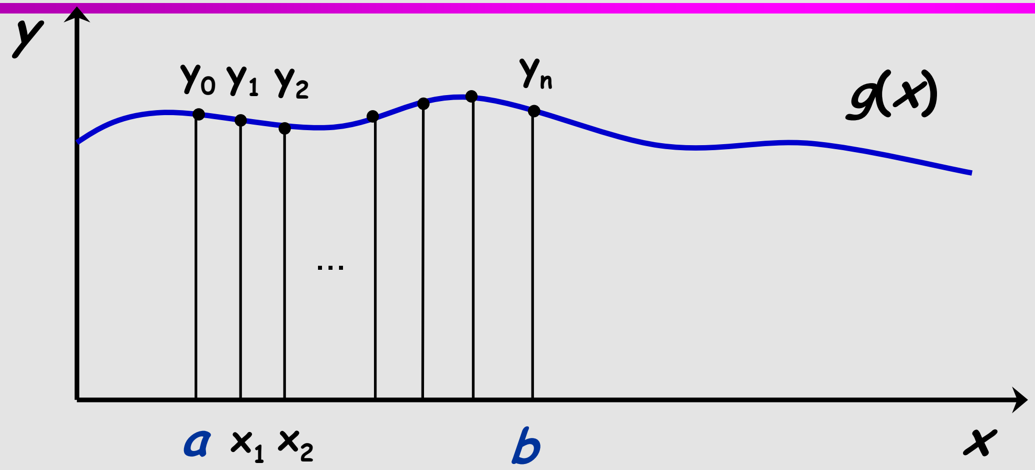
Танцы звезд

• Задача многих тел. (3 тела и чуть больше).

Уравнения Ньютона или Гамильтона.



Сеточные функции



- Пусть задана непрерывная функция $g(x)$ на участке $[a,b]$.
- Введем дискретный набор точек x_i, **сетку**.
- Точки $\{x_0, x_1, x_2, \ldots x_n\}$ – **узлы сетки**
- Сетка с одинаковым расстоянием между произвольной парой соседних точек – **равномерная сетка**.
- $y_i = g(x_i)$ – **сеточная функция, задаваемая в виде таблицы.**

Разности

- **Можно ввести аналог производной для сеточной функции**

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} dx \quad \to \quad \Delta y_i = y_{i+1} - y_i$$ **- правая разность**

- **Также задается**

$$\nabla y_i = y_i - y_{i-1}$$ **- левая разность**

$$\delta y_i = \frac{1}{2}(\Delta y_i + \nabla y_i) = \frac{1}{2}(y_{i+1} - y_{i-1})$$ **- центральная разность**

- **В общем случае**

$$\Delta^m y_i = \Delta(\Delta^{m-1} y_i)$$

Разности

Полезные выражения

- **Производные второго порядка**

$$\boxed{\Delta^2 y_i = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i} \qquad \boxed{\Delta\nabla y_i = y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}} \qquad \boxed{\Delta\nabla y_i = \Delta^2 y_{i-1}}$$

- **Дифференцирование произведения**

$$\boxed{\Delta(y_i v_i) = y_i \Delta v_i + v_{i+1}\Delta y_i = y_{i+1}\Delta v_i + v_i \Delta y_i}$$

$$\boxed{\nabla(y_i v_i) = y_i \nabla v_i + v_{i-1}\nabla y_i = y_{i-1}\nabla v_i + v_i \nabla y_i}$$

- **Суммирование по частям**

$$\boxed{\sum_{i=0}^{N-1} y_i \Delta v_i = -\sum_{i=1}^{N-1} v_i \Delta y_i + y_{N-1} v_N - y_0 v_1 = -\sum_{i=0}^{N} v_i \Delta y_i + y_N v_N - y_0 v_0}$$

Разностные уравнения

- Линейное разностное уравнение m-го порядка

$$a_0(i)y_i + a_1(i)y_{i+1} + a_2(i)y_{i+2} + \ldots + a_m(i)y_{i+m} = f(i)$$

или

$$\alpha_0(i)y_i + \alpha_1(i)\Delta y_i + \alpha_2(i)\Delta y_i^2 + \ldots + \alpha_m(i)\Delta y_i^m = f(i)$$

- Например

$$a_0(i)y_i + a_1(i)y_{i+1} = f(i)$$ - уравнение первого порядка

Решение $$y_{i+1} = \varphi(i) + \beta(i)y_i$$

Если задано граничное условие y_0=const,
все остальные значения находятся последовательно

Разностные уравнения

Граничные условия

- Аналогично дифференциальным уравнениям чтобы найти частное решение требуется задать граничные условия.
  - уравнение первого порядка – один параметр
  - уравнение второго порядка – два параметра и т.д.

- Согласно заданным условиям уравнения второго порядка можно классифицировать как
  - Задача Коши. Заданы граничные условия в двух соседних точках.
  - Краевая задача. Заданные точки не являются соседними.

- Граничные условия могут быть первого, второго и третьего рода.

Уравнения первого порядка

Метод Эйлера

- Пусть задана система уравнений

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_1(x), y_1(x), \ldots y_1(x)), \qquad i = 1, \ldots, n, \qquad a \le x \le b, \qquad y_i(a) = \alpha_i$$

(здесь y_i – разные функции)

- Решение будет искаться в виде

$$y_i(x_{k+1}) = y_i(x_k) + h \cdot f_i(x_k, y_1(x_k), y_2(x_k), \ldots y_n(x_k)),$$

где *h* – шаг сетки

- Ошибка дискретизации ~*h*

Методы Рунге-Кутта

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \sum_{i=1}^{q} p_i k_i(h)$$

- общая формула, где

$$k_1(h) = h \cdot f\left(x; y\right);$$

$$k_2(h) = h \cdot f\left(x + \alpha_2 h; y + \beta_{21} k_1\right);$$

$$k_3(h) = h \cdot f\left(x + \alpha_3 h; y + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2\right);$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$k_n(h) = h \cdot f\left(x + \alpha_3 h; y + \beta_{n1} k_1 + \beta_{n2} k_2 + \beta_{n3} k_3 + \ldots\right);$$

$$\alpha_2 \ldots \alpha_q \quad p_1 \ldots p_q \quad \beta_{ij} \quad 0 < j < i \le q$$

- константы

Методы Рунге-Кутта

Выбор параметров

Введем функцию погрешности метода

$$\varphi_i(h) = y(x+h) - y(x) - p_1k_1(h) - p_2k_2(h) - \ldots - p_ik_i(h);$$

Будем искать коэффициенты из условия чтобы

$$\varphi'(0) = \varphi''(0) = \ldots = \varphi^{(s)}(0) = 0, \quad \varphi^{(s+1)}(0) \neq 0$$

тогда

$$\varphi\ (h) = \sum_{i=1}^{s} \frac{\varphi^{(s)}(0)}{s!} h^s + \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!} h^{s+1} = \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!} h^{s+1}$$

Уравнения первого порядка

Методы Рунге-Кутта

- **Метод Рунге-Кутта второго порядка (Метод Хьюна) ε ~ h²**

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \frac{h}{2} \cdot \left(f(x_k, y(x_k)) + f\left(x_{k+1}, y(x_k) + h \cdot f(x_k, y(x_k))\right)\right),$$

- **Метод Рунге-Кутта-Фельберга ε ~ h⁵**

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \frac{1}{9}k_0 + \frac{9}{20}k_2 + \frac{16}{45}k_3 + \frac{1}{12}k_4$$

$$k_0 = h \cdot f\left(x_i; y_i\right);$$

$$k_1 = h \cdot f\left(x_i + \frac{2}{9}h; y_i + \frac{2}{9}k_0 \right);$$

$$k_2 = h \cdot f\left(x_i + \frac{1}{3}h; y_i + \frac{1}{12}k_0 + \frac{1}{4}k_1 \right);$$

$$k_3 = h \cdot f\left(x_i + \frac{3}{4}h; y_i + \frac{69}{128}k_0 - \frac{143}{128}k_1 + \frac{135}{64}k_2 \right);$$

$$k_4 = h \cdot f\left(x_i + h; y_i - \frac{17}{12}k_0 + \frac{27}{4}k_1 - \frac{27}{5}k_2 + \frac{16}{15}k_3 \right);$$

Линейные уравнения второго порядка

- **Например уравнение дрифт-диффузии**

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\frac{\partial J}{\partial x}=0$$

$$J=q\mu_n nE+\mu_n k_B T\frac{\partial n}{\partial x}$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial n}{\partial t}-D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}-q\mu_n E\frac{\partial n}{\partial x}-q\mu_n n\frac{\partial E}{\partial x}=0$$

это уравнение в частных производных. Можно решать стационарное уравнение, приравняв нулю производную по времени.

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}+A\frac{\partial n}{\partial x}+Bn=0$$

$$\frac{n(x_{i+1})-2n(x_i)+n(x_{i-1})}{h^2}+A_i\frac{n(x_{i+1})-n(x_{i-1})}{2h}+B_i n(x_i)=0$$

Линейные уравнения второго порядка

2D уравнение Пуассона

$$\boxed{\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}=-f(x_1,x_2)}$$

- уравнение в частных производных

Функция *u* определена на всей границе – задача Дирихле $\boxed{u\,|_B=\mu(x_1,x_2)}$

Разностное уравнение

$$\boxed{\frac{y(i_1-1,i_2)-2y(i_1,i_2)+y(i_1+1,i_2)}{h_1^2}+\frac{y(i_1,i_2-1)-2y(i_1,i_2)+y(i_1,i_2+1)}{h_2^2}=-f(i_1,i_2)}$$

Линейные уравнения второго порядка

Метод прогонки

- Разностное уравнение $\boxed{a_i y_{i-1} - c_i y_i + b_i y_{i+1} = -f_i}$

с граничными условиями $\boxed{y_0 = \eta_1 y_1 + \mu_1, \quad y_N = \eta_2 y_{N-1} + \mu_2}$

можно представить в виде матричного уравнения

$$\begin{pmatrix} 1 & -\eta_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & -c_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -c_{N-2} & b_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{N-1} & -c_{N-1} & b_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\eta_2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ -f_1 \\ -f_2 \\ \dots \\ -f_{N-2} \\ -f_{N-1} \\ \mu_2 \end{pmatrix}$$

Метод прогонки

Алгоритм

- **Выберем соотношение** $$y_i = \alpha_{i+1} y_{i+1} + \beta_{i+1}$$

  где коэффициенты определены как

$$\alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \alpha_i}; \quad \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + f_i}{c_i - a_i \alpha_i};$$

  с граничными условиями $$\alpha_1 = \eta_1; \quad \beta_1 = \mu_1;$$

- **За один проход -> можно рассчитать все коэффициенты α_i β_i.**

Метод прогонки

Алгоритм

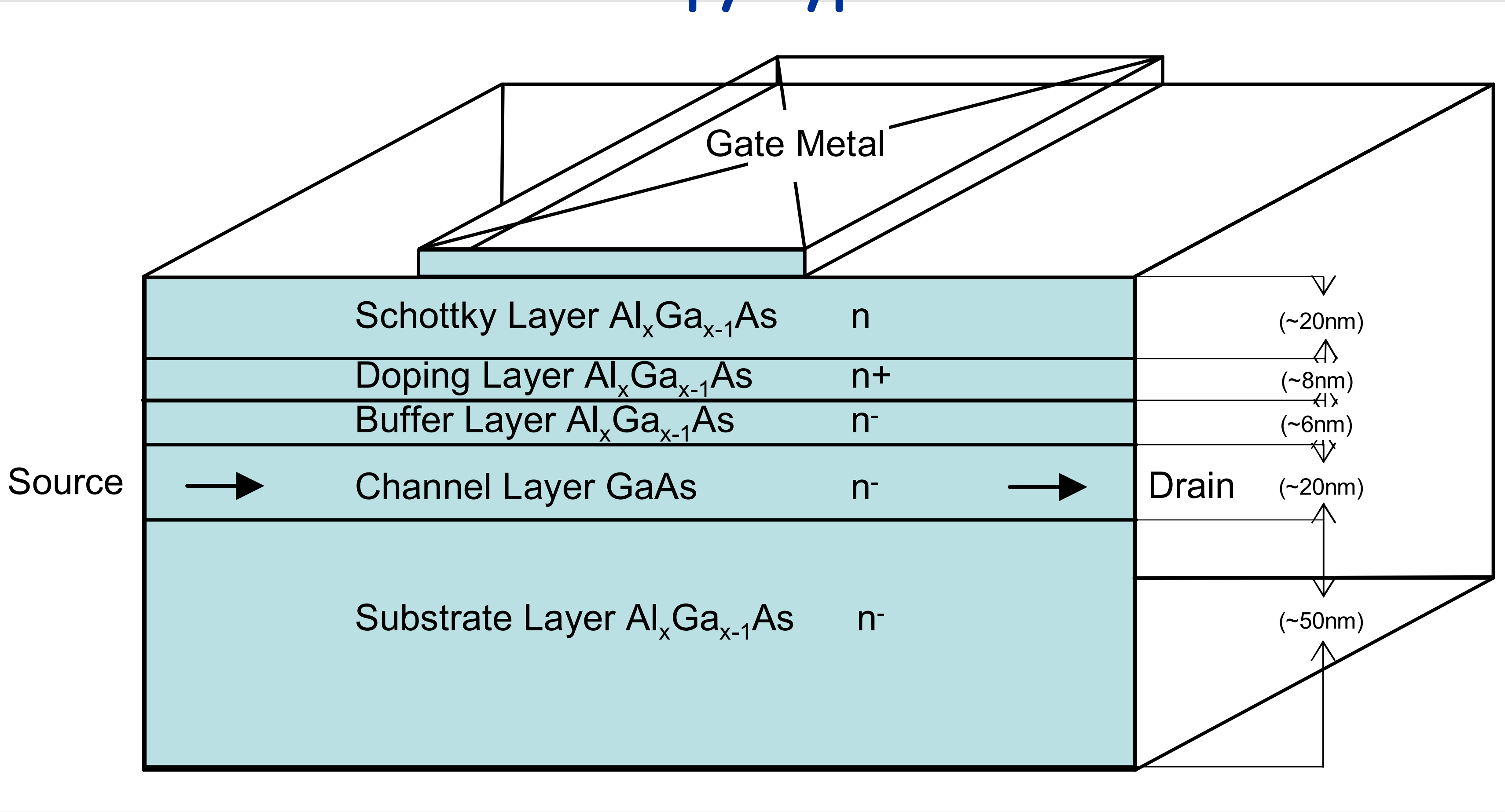
- **Теперь идем <- и считаем** $$y_i = \alpha_{i+1} y_{i+1} + \beta_{i+1}$$

где y_N находится из граничных условий

$$y_N = \frac{\mu_2 + \eta_2 \beta_N}{1 - \alpha_N \eta_2}$$

Пример

Структура



Пример

Задача

Рассчитать константы спин-орбитального взаимодействия в полупроводниковой гетероструктуре с металлическим затвором, как функции напряжения на затворе.

Спин-орбитальное взаимодействие

$$H_{\mathrm{SO}} = \frac{\hbar}{(2m_0c)^2}\nabla V(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\mathbf{p}})$$ - общий вид

$$H_{\mathrm{D}} = \gamma(k_z^i)\cdot\left(k_y\sigma_y - k_x\sigma_x\right)$$ - формула специфичная для III-V полупроводниковых гетероструктур

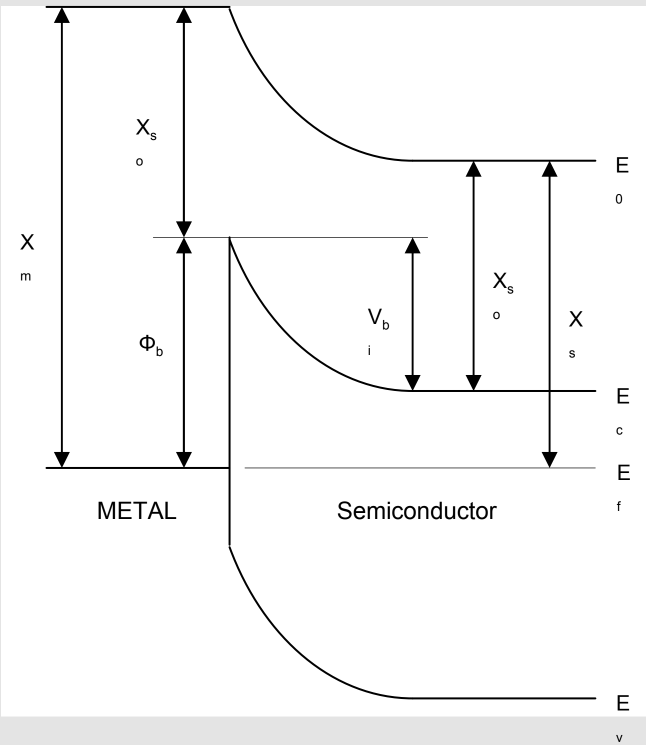
$$\gamma(k_z^i) = \beta\left\langle k_z^{i\,2}\right\rangle$$ - константа спин-орбитального взаимодействия

Параметр β определяется зонной структурой полупроводника

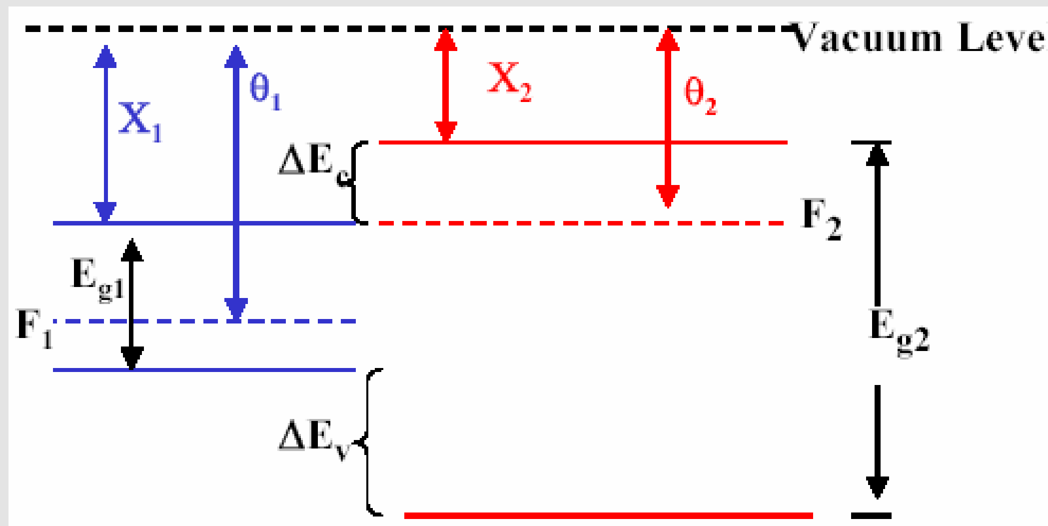
Задача сводится к нахождению волновых функций электронов локализованных в квантовой яме

Band structure

Металл/полупроводник



Полупроводник/полупроводник



Уравнения

Уравнение дрифт-диффузии:

$$n'' + \frac{qE}{k_B T} n' + \frac{qE'}{k_B T} n = 0$$

$$J_n = q\mu_n nE + \mu_n k_B T \nabla n$$

Уравнение Пуассона:

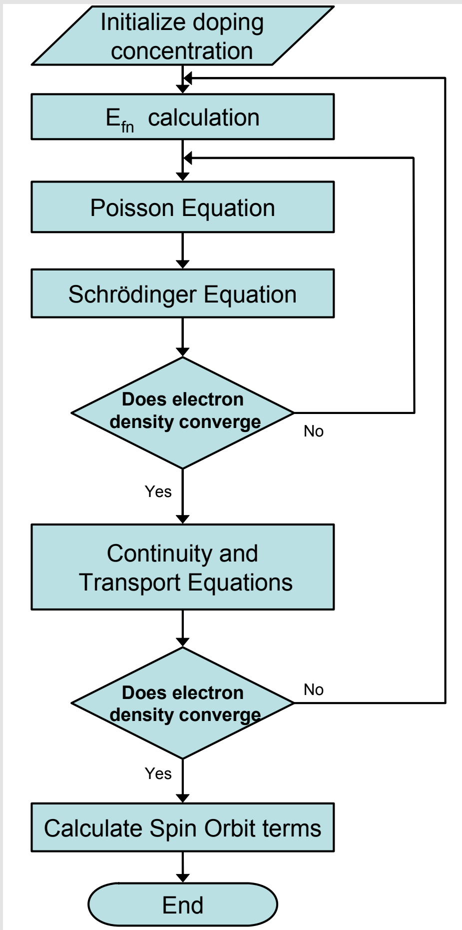
$$\nabla \cdot \left(\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi \right) = -e(p - n + N_d - N_a)$$

,

Уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*} \nabla \Psi_k \right) + (V - E_k)\psi_k = 0$$

Алгоритм



Микроскопическая

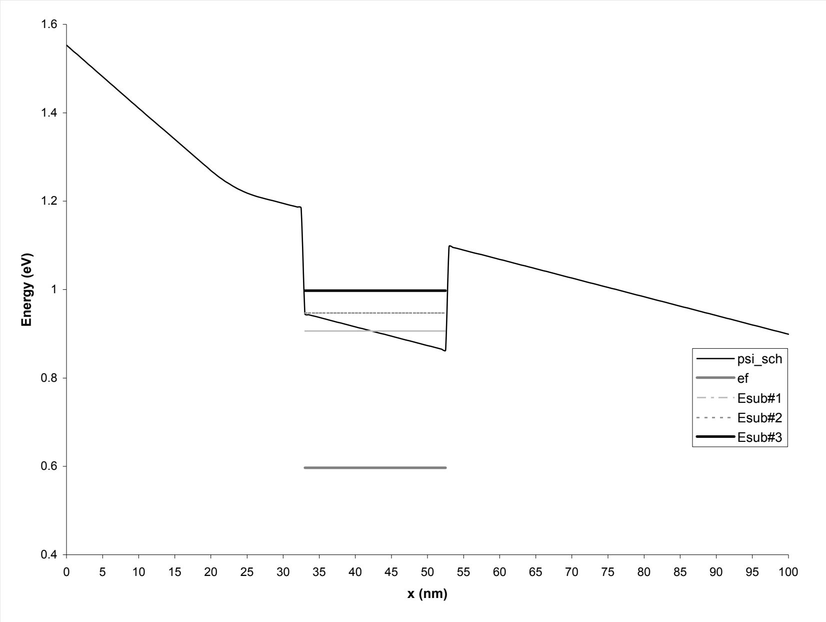
модель

Макроскопическая

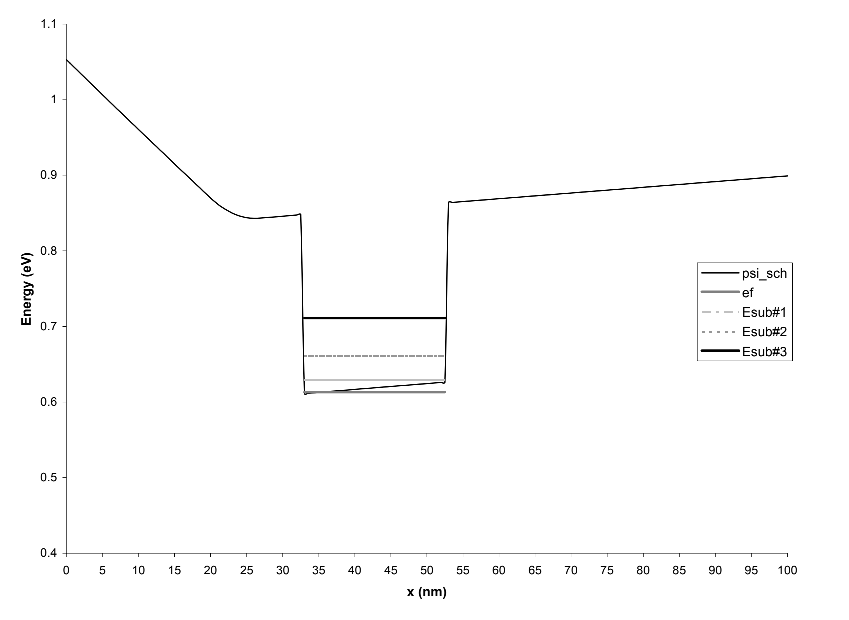
модель

Результаты

V_g = 0 V

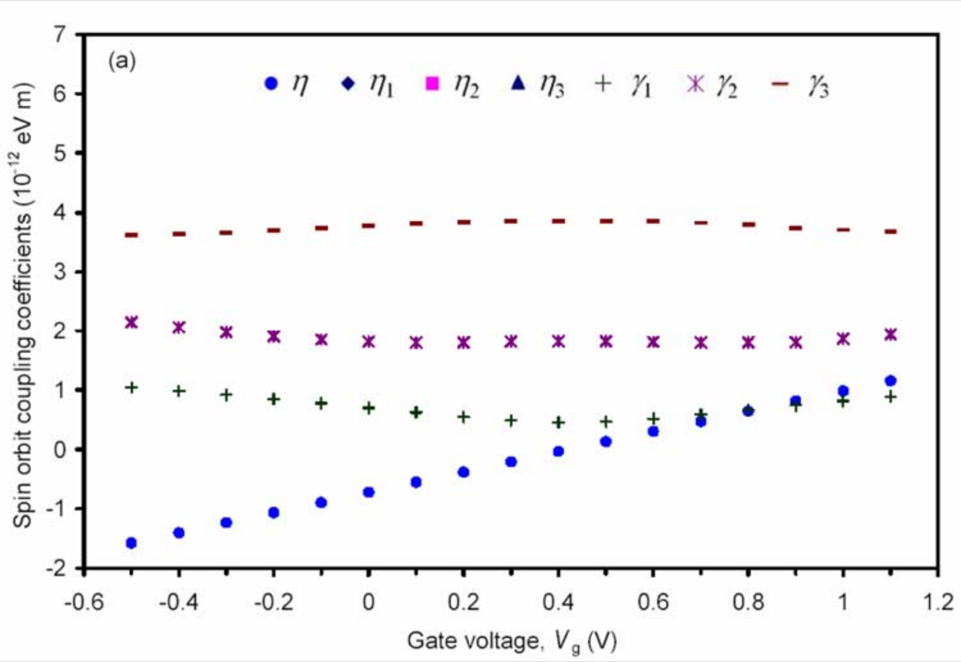


V_g = 0.5 V



Результаты

Константы С-О взаимодействия



Литература

- Д. Поттер, Вычислительные методы в физике.
- Н. Н. Калиткин, Численные методы.
- Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков, Численные методы.
- Р.П. Федоренко, Введение в вычислительную физику

Литература

- Самарский А.А., Введение в численные методы.
- Ортега Дж., Пул У., Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений.

The End