

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΕΜΠ

ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

Ε. Δρυς,
Γ. Κουτσούμπας
Ν.Δ. Τράκας

ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2003
2η έκδοση

ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΕΣ ΓΙΑ ΤΟ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ

Πώς ξεκινάμε το λογισμικό για FORTRAN

1. Κάνουμε κλικ στο εικονίδιο της FORTRAN.
2. Επιλέγουμε: File> New
3. Συμπληρώνουμε στο πεδίο Project Name: *ASKISI_1*
Επιλέγουμε στο πεδίο Location το path που θα βρίσκονται τα αρχεία:
C:\ Documents & Settings\ Userstemfe\ My Documents
Επιλέγουμε: Fortran Window Application.
4. Finish
5. OK
6. Επιλέγουμε File> New
7. Συμπληρώνουμε στο πεδίο File Name: *ASKISI_1.for*
Επιλέγουμε: Fortran Fixed Format Source File.

Στο παράθυρο που άνοιξε μπορούμε να πληκτρολογήσουμε τον κώδικα.

Μετά την πληκτρολόγηση κάνουμε τις εξής 3 διαδικασίες:

1. Επιλέγουμε: Build>Compile askisi_1.f
Αν δεν υπάρχει λάθος στην ‘μεταγλώττιση’ (compilation), μπορείτε να προχωρήσετε στο επόμενο βήμα. Αν υπάρχει λάθος, θα εμφανιστεί στο κάτω μέρος της οθόνης διευκρινίζοντας το είδος του λάθους, ενώ αν κάνετε κλικ πάνω στη διευκρίνιση αυτή θα εμφανιστεί ένα βελάκι στη γραμμή του κώδικα όπου εμφανίζεται το λάθος.
2. Επιλέγουμε: Build>Build askisi_1.exe
3. Επιλέγουμε: Build>Execute askisi_1.exe

Πώς ξεκινάμε το λογισμικό για MATLAB

1. Κάνουμε κλικ στο εικονίδιο του MATLAB
2. Επιλέγουμε το φάκελλο όπου βρίσκονται τα αρχεία με τα δεδομένα που παρήχθησαν από το πρόγραμμα FORTRAN.
3. Διαβάζουμε το αρχείο από το MATLAB:
load data.dat -ascii
όπου *data.dat* είναι το όνομα του αρχείου που περιέχει τα δεδομένα.
4. Σχεδιάζουμε τα δεδομένα:
plot(data(:,1),data(:,2), 'r', 'MarkerSize', 1)*
όπου *data(:,1)* σημαίνει από το αρχείο *data* πάρε όλες τις γραμμές (:) από τη στήλη 1 των δεδομένων. Το *r** σημαίνει χρησιμοποίησε κόκκινο (*r*) χρώμα και σύμβολο αστερίσκο (*) για τη σχεδίαση. Στη θέση του *r* μπορείτε να βάλετε *g*, *b* κλπ. ενώ αντί * μπορείτε να διαλέξετε τελεία (.) ή συν (+). Τέλος, το *'MarkerSize', 1* υποδηλώνει το μέγεθος του συμβόλου που χρησιμοποιείται.
5. Κάθε φορά που εκτελείται η εντολή *plot* το προηγούμενο διάγραμμα χάνεται. Αν θέλετε να κάνετε πολλά *plot* στο ίδιο διάγραμμα χρησιμοποιείστε την εντολή *hold on* μετά το πρώτο *plot*.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Σχεδίαση Δυναμικών Γραμμών

Οι ηλεκτρικές δυναμικές γραμμές και οι ισοδυναμικές επιφάνειες είναι οι πιο συνηθισμένοι τρόποι παράστασης ενός ηλεκτροστατικού πεδίου. Οι δυναμικές γραμμές ορίζονται από δύο ιδιότητες: (1) Σε κάθε σημείο, η εφαπτομένη στη δυναμική γραμμή είναι παράλληλη με το διάνυσμα του ηλεκτρικού πεδίου στο σημείο αυτό και (2) Σε κάθε σημείο ο αριθμός των δυναμικών γραμμών (που διαπερνούν κάθετα μια μοναδιαία επιφάνεια) είναι ανάλογος με την ένταση του πεδίου στο σημείο αυτό. Η δεύτερη ιδιότητα μας λέει ότι όσο οι δυναμικές γραμμές γίνονται πιο πυκνές, τόσο το ηλεκτρικό πεδίο (και επομένως και η δύναμη που ασκείται σ' ένα φορτίο) γίνεται ισχυρότερο. Η πρώτη ιδιότητα μας προσφέρει μια εύκολη υπολογιστική μέθοδο για να σχεδιάζουμε τις δυναμικές γραμμές. Η κατανόηση και η περιγραφή φυσικών καταστάσεων και φαινομένων με βάση τις δυναμικές γραμμές είναι πολύ βασική και χρήσιμη διεργασία στον ηλεκτρισμό και το μαγνητισμό. Η απόκτηση πείρας στην αναγνώριση της μορφής των δυναμικών γραμμών για ορισμένες κατανομές φορτίων, βοηθάει στην καλλίτερη κατανόηση και χρήση των ηλεκτρικών πεδίων.

Οι ισοδυναμικές επιφάνειες είναι επιφάνειες στο χώρο πάνω στις οποίες τα φορτία μπορούν να μετακινούνται χωρίς την παραγωγή (ή κατανάλωση) έργου. Οι ισοδυναμικές επιφάνειες είναι παντού κάθετες στις ηλεκτροστατικές δυνάμεις ($\mathbf{F} \cdot d\mathbf{l}=0$). Επομένως, οι ισοδυναμικές επιφάνειες είναι παντού κάθετες στις δυναμικές γραμμές του πεδίου. Η διαγραφή μιας καμπύλης που βρίσκεται πάνω σε μία ισοδυναμική επιφάνεια επιτυγχάνεται αν κινούμαστε μονίμως κάθετα στην τοπική δυναμική γραμμή. Αυτή η ιδιότητα μας βοηθά στην σχεδίαση ισοδυναμικών καμπυλών με εύκολο υπολογιστικό τρόπο.

1.1 Βασικές Εξισώσεις

Οι παρακάτω εξισώσεις σχολιάζονται πληρέστερα σ' όλα τα βιβλία φυσικής. Εδώ αναφέρουμε όσες θα μας χρειασθούν σ' αυτό το κεφάλαιο.

1. Ο νόμος του Coulomb

$$\mathbf{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q q_1}{r^2} \hat{\mathbf{r}}$$

όπου \mathbf{F} είναι η δύναμη που ασκείται στο φορτίο q από το φορτίο q_1 και $\hat{\mathbf{r}}$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα από το φορτίο q_1 στο φορτίο q και r η μεταξύ τους απόσταση

2. Το αξίωμα της επαλληλίας

$$\mathbf{F}_{\text{ολική}} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_3 + \dots + \mathbf{F}_N = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i = \sum_{i=1}^N \frac{q q_i}{4\pi\epsilon_0 r_i^2} \hat{\mathbf{r}}_i$$

όπου $\mathbf{F}_{\text{ολική}}$ είναι η δύναμη που ασκείται στο φορτίο q από όλα τα άλλα φορτία q_1, \dots, q_N , r_i η απόσταση του q_i φορτίου από το q και $\hat{\mathbf{r}}_i$ το αντίστοιχο μοναδιαίο διάνυσμα (από το q_i στο q).

3. Ο ορισμός του ηλεκτρικού πεδίου που οφείλεται σε σημειακό φορτίο q

$$\mathbf{E}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r^2} \hat{\mathbf{r}}$$

όπου $\mathbf{E}(r)$ είναι ένα διανυσματικό πεδίο. Είναι δηλαδή μια συνάρτηση που οι τιμές της είναι διανύσματα και που αλλάζει από σημείο σε σημείο στο χώρο. Η δύναμη \mathbf{F} που ασκείται σε φορτίο q_0 που βρίσκεται στο σημείο r_0 δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{F} = \mathbf{E}(r_0) q_0$$

4. Οι δυναμικές γραμμές του ηλεκτροστατικού πεδίου ξεκινούν από θετικά φορτία και καταλήγουν σε αρνητικά φορτία ή στο άπειρο.
5. Όλα τα σημεία μιας ισοδυναμικής επιφάνειας έχουν το ίδιο ηλεκτροστατικό δυναμικό.
6. Οι ηλεκτροστατικές δυναμικές γραμμές είναι παντού κάθετες στις ισοδυναμικές επιφάνειες.

1.2 Υπολογισμός των Δυναμικών Γραμμών

Οι δυναμικές γραμμές μπορούν να υπολογιστούν αλγοριθμικά, δηλαδή με μια μέθοδο βήμα-προς-βήμα. Η διαδικασία αυτή χρησιμοποιεί την πρώτη από τις ιδιότητες που αναφέραμε παραπάνω: η εφαιπτομένη στη δυναμική γραμμή είναι πάντα παράλληλη με το διάνυσμα του ηλεκτρικού πεδίου. Ας περιοριστούμε

σε προβλήματα που είναι, ή μπορεί να αναχθούν, σε δύο διαστάσεις Σχ.(1.1). Θεωρήστε το ηλεκτρικό πεδίο στο τυχαίο σημείο (x, y) του επιπέδου, που προκαλείται από ομοεπίεδα σημειακά φορτία. Το συνολικό πεδίο \mathbf{E} βρίσκεται αν αθροίσουμε τους όρους $(q/4\pi\epsilon_0)(\hat{\mathbf{r}}/r^2)$ για όλα τα φορτία. Τώρα υποθέστε ότι μετακινείστε κατά ένα μικρό διάστημα Δs πάνω στη δυναμική γραμμή, από το σημείο (x, y) έως το σημείο $(x + \Delta x, y + \Delta y)$. Για μικρό βήμα Δs , το τρίγωνο που σχηματίζεται από τα Δx , Δy και Δs είναι όμοιο με το τρίγωνο που σχηματίζουν τα E_x , E_y και $\sqrt{E_x^2 + E_y^2}$. Επομένως, τα Δx και Δy δίνονται από τις σχέσεις

$$\Delta x = \Delta s \frac{E_x}{\sqrt{E_x^2 + E_y^2}}, \quad \Delta y = \Delta s \frac{E_y}{\sqrt{E_x^2 + E_y^2}}$$

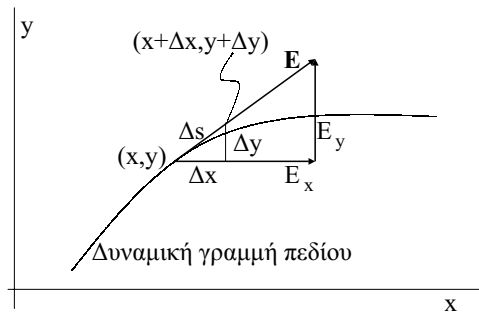
Το νέο σημείο της δυναμικής γραμμής είναι το $(x + \Delta x, y + \Delta y)$ και η διαδικασία αρχίζει ξανά. Μ' αυτό το τρόπο προχωρούμε πάνω στη δυναμική γραμμή βήμα-προς-βήμα.

Η διαδικασία για την ισοδυναμική γραμμή (δηλαδή την τομή της ισοδυναμικής επιφάνειας με το επίπεδο που βρίσκονται τα φορτία), είναι κι αυτή εύκολη. Επειδή οι ισοδυναμικές είναι κάθετες στις δυναμικές γραμμές ή στο πεδίο \mathbf{E} , σε κάθε βήμα η κίνηση πρέπει να είναι κάθετη στο ηλεκτρικό πεδίο. Γνωρίζουμε ότι το γινόμενο των κλίσεων δυο καθέτων ευθειών είναι -1 . Επομένως αν θέλουμε να ακολουθήσουμε μια ισοδυναμική γραμμή, θα πρέπει να μετακινηθούμε κατά Δx και Δy

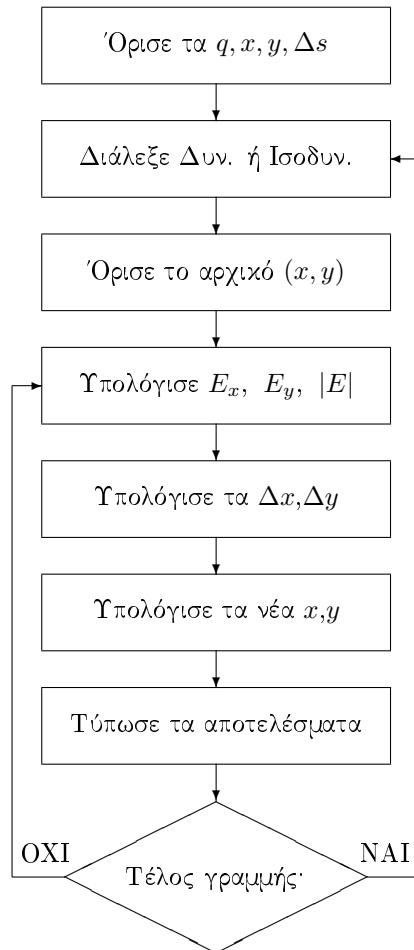
$$\Delta x = \Delta s \frac{E_y}{\sqrt{E_x^2 + E_y^2}} \quad \Delta y = \Delta s \frac{-E_x}{\sqrt{E_x^2 + E_y^2}}$$

παράλληλα με τους άξονες x και y . Η επιλογή του αρνητικού προσήμου στο Δy , και όχι στο Δx είναι τυχαία. Η διαφορά έγκειται στη φορά διαγραφής της ισοδυναμικής γραμμής.

Στο Σχ.(1.2) φαίνεται το λογικό διάγραμμα για τη διαδικασία υπολογισμού των δυναμικών και ισοδυναμικών γραμμών.



Σχήμα 1.1: Σε κάθε σημείο της δυναμικής γραμμής, τα τρίγωνα $(\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ και $E_x, E_y, |E|$ είναι όμοια.



Σχήμα 1.2: Διάγραμμα ροής για την σχεδίαση δυναμικών και ισοδυναμικών γραμμών. Μετά τον καθορισμό των αρχικών τιμών των παραμέτρων, ο υπολογισμός 'προχωρά' πάνω στην δυναμική ή ισοδυναμική γραμμή βήμα - προς - βήμα. Σε κάθε σημείο, η ένταση του πεδίου καθορίζει τις συντεταγμένες του επόμενου βήματος.

Παρακάτω φαίνεται ο κώδικας σε γλώσσα FORTRAN που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για σχεδίαση δυναμικών ή ισοδυναμικών γραμμών.

```

C      *****
PROGRAM ELECTRIC_FIELDS
C      *****
C      *****1ο ΤΜΗΜΑ *****
      IMPLICIT NONE
      INTEGER I,N,KCHECK,P,ICON,L
      PARAMETER (P=20)
      REAL X(P),Y(P),Q(P),X0IN,Y0IN,X0,Y0,RCHECK,EX,EY,DL,DLIN,
*DX,DY
      OPEN(UNIT=10,FILE="ELEC_LINE.DAT")
C      *****2ο ΤΜΗΜΑ *****
      PRINT *, "NUMBER OF CHARGES (MAX=20)"
      READ(5,*)N

      DO I=1,N
        PRINT *,I," CHARGE"
        PRINT *, "GIVE THE CHARGE AND ITS POSITION (Q,X,Y)"
        READ(5,*)Q(I),X(I),Y(I)
      END DO

666  PRINT *, "LINE OF FORCE (1) OR EQUIPOTENTIAL LINE (2)"
      READ(5,*)L
      PRINT *, "CHOOSE THE STARTING POINT (X,Y)"
      READ(5,*)X0IN,Y0IN
C      *****3ο ΤΜΗΜΑ *****
      X0=X0IN
      Y0=Y0IN
      DX=0.0
      DY=0.0
      DL=0.05
      EX=0.0
      EY=0.0
C      *****4ο ΤΜΗΜΑ *****
      DO I=1,N
        RCHECK=((X0-X(I))**2+(Y0-Y(I))**2)**(0.5)

        IF (RCHECK.LT.DL) THEN
          PRINT *, "TOO NEAR TO A CHARGE"
          GOTO 666
        END IF

      END DO

```

```

C *****5ο ΤΜΗΜΑ*****
KCHECK=1
DO WHILE (KCHECK.EQ.1)

WRITE(10,*)X0,Y0
C PRINT *,X0,Y0
CALL STRENGTH(X0,Y0,N,X,Y,Q,EX,EY,DX,DY)

IF (L.EQ.1) THEN
  DX=DL*EX/((EX**2+EY**2)**(0.5))
  X0=X0+DX
  DY=DL*EY/((EX**2+EY**2)**(0.5))
  Y0=Y0+DY
ELSE IF (L.EQ.2) THEN
  DX=DL*EY/((EX**2+EY**2)**(0.5))
  X0=X0+DX
  DY=-DL*EX/((EX**2+EY**2)**(0.5))
  Y0=Y0+DY
ELSE
END IF

IF ((ABS(X0).GT.20.0).OR.(ABS(Y0).GT.20.0)) KCHECK=0

IF (L.EQ.1) THEN
  DO I=1,N
    RCHECK=((X0-X(I))**2+(Y0-Y(I))**2)**(0.5)

    IF (RCHECK.LT.DL) THEN
      KCHECK=0
C PRINT *,I,X0,Y0,RCHECK
    END IF

  END DO
ELSE
  DLIN=ABS(X0-X0IN)+ABS(Y0-Y0IN)
  IF (DLIN.LT.0.9*DL) KCHECK=0
ENDIF

END DO

```



```

*****6ο ΤΜΗΜΑ*****
667 PRINT *, "NEW STARTING POINT (YES=1, NO=2)"
    READ(5,*)ICON
    IF (ICON.EQ.1) GOTO 666

    CLOSE(10)
    END
C *****
C *****7ο ΤΜΗΜΑ*****
SUBROUTINE STRENGTH(X0,Y0,N,X,Y,Q,EX,EY,DX,DY)
IMPLICIT NONE
INTEGER I,N,P
PARAMETER(P=20)
REAL X0,Y0,X(P),Y(P),Q(P),EX,EY,R,DX,DY

EX=0.0
EY=0.0

DO I=1,N
    R=((X0+DX/2.0-X(I))**2+(Y0+DY/2.0-Y(I))**2)**(0.5)

    EX=EX+Q(I)*(X0+DX/2.0-X(I))/R**3
    EY=EY+Q(I)*(Y0+DY/2.0-Y(I))/R**3

END DO

RETURN
END

```

Ας προσπαθήσουμε, επειδή είναι ο πρώτος κώδικας που παρουσιάζεται, να δώσουμε μια όσο το δυνατό λεπτομερή επεξήγηση.

Το 1ο τμήμα περιέχει όλους τους ορισμούς των μεταβλητών που θα χρησιμοποιηθούν. Η εντολή:

```
IMPLICIT NONE
```

είναι πολύ βοηθητική γιατί απαγορεύει την εμφάνιση στον κώδικα, οποιαδήποτε μεταβλητής που δεν έχει οριστεί στην αρχή με τις εντολές INTEGER και REAL και έτσι αποφεύγονται λάθη που προέρχονται από κακή πληκτρολόγηση μεταβλητών. Οι πραγματικές μεταβλητές Q , X και Y , που καθορίζουν τα φορτία και τις θέσεις τους, είναι πίνακες, οπότε πρέπει να ορίσουμε την (μέγιστη) διάστασή τους. Με την εντολή:

```
PARAMETER (P=20)
```

μπορούμε να ορίσουμε αυτή τη μέγιστη διάσταση. Τέλος με την εντολή:

```
OPEN(UNIT=10,FILE="ELEC_LINE.DAT");
```

‘ανοίγουμε’ ένα αρχείο (με το όνομα ELEC_LINE.DAT) όπου θα ‘γράφουμε’ τα αποτελέσματά μας.

Στο 2ο τμήμα δίνουμε στο πρόγραμμα τα αρχικά δεδομένα: τα φορτία και τις θέσεις τους. Στην εντολή:

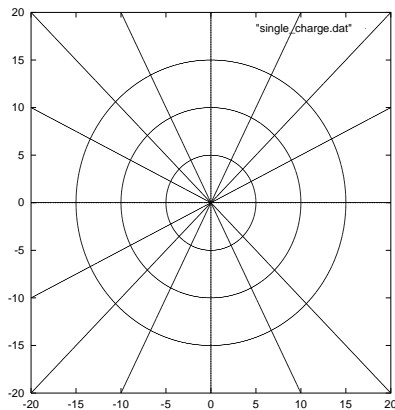
```
READ(5,*)Q(I),X(I),Y(I)
```

το ‘5’ υποδηλώνει ότι τα δεδομένα εισάγονται από το πληκτρολόγιο και ο ‘*’ ότι ο τρόπος που δίνονται (δεκαδική μορφή, εκθετική μορφή κ.λπ.) είναι τελείως γενικός. Ακολούθως, το πρόγραμμα ρωτά αν θέλουμε να υπολογίσει μία δυναμική γραμμή ή μια ισοδυναμική γραμμή (επιλέγοντας τη τιμή της μεταβλητής L). Τέλος, δηλώνουμε τις συντεταγμένες του σημείου από το οποίο θέλουμε να ξεκινήσει η γραμμή: X0IN,Y0IN.

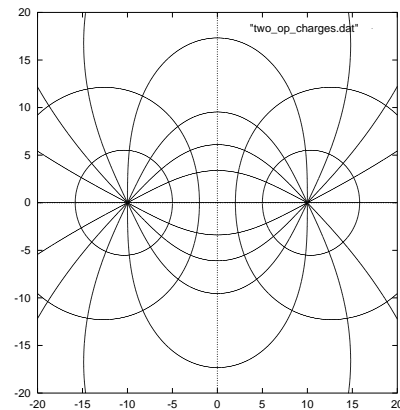
Στο 3ο τμήμα γίνονται οι αρχικοποιήσεις των τιμών: τα X0,Y0 θα αποτελούν τις συντεταγμένες του εκάστοτε νέου σημείου που βρίσκουμε (τα X0IN,Y0IN τα χρειαζόμαστε για διάφορους ελέγχους κατά τη διάρκεια της διαδικασίας). Το DL είναι το μήκος του βήματος που επιλέγουμε και DX,DY είναι οι προβολές της μετακίνησής μας.

Στο 4ο τμήμα ελέγχουμε κατά πόσο το αρχικό σημείο που επιλέξαμε είναι πολύ κοντά (μικρότερο από DL) σε κάποιο από τα φορτία του προβλήματός μας.

Το 5ο τμήμα είναι το κυρίως πρόγραμμα. Σ’ αυτό καλείται η υπορουτίνα STRENGTH όπου με εισαγωγή των συντεταγμένων του σημείου που βρισκόμαστε (X0,Y0), των φορτίων και των θέσεών τους (Q,X,Y) λαμβάνουμε ως έξοδο τις τοπικές συντεταγμένες του διανύσματος του πεδίου (τα DX,DY χρειάζονται για την καλύτερη προσέγγιση αυτής της αλγοριθμικής διαδικασίας, βλ. το σχολιασμό της υπορουτίνας). Με δεδομένα πια τα τοπικά EX,EY υπολογίζουμε τα νέα DX,DY καθώς και το νέο σημείο της γραμμής (διακρίνοντας την περίπτωση δυναμικής ή ισοδυναμικής γραμμής). Μετά αρχίζουν οι έλεγχοι διακοπής αυτής της διαδικασίας: (1) αν το X0 ή το Y0 ‘βγούν’ εκτός της περιοχής που ενδιαφερόμαστε (η γραμμή απομακρύνεται), (2) αν το νέο σημείο μας X0,Y0 είναι πολύ κοντά σε κάποιο φορτίο (για την περίπτωση δυναμικής γραμμής) και (3) αν το νέο σημείο μας είναι πολύ κοντά (ουσιαστικά συμπίπτει) με το αρχικό μας σημείο (για την περίπτωση ισοδυναμικής γραμμής). Αν όλοι οι έλεγχοι ξεπεραστούν θετικά αρχίζει ο υπολογισμός του επόμενου σημείου της γραμμής (αφού αποθηκευτεί το νέο σημείο στο αρχείο που ήδη έχει ανοιχτεί), ειδάλλως, το 6ο τμήμα του προγράμματος μας ζητά αν θέλουμε να ξεκινήσουμε ένα νέο υπολογισμό ή να τερματίσουμε όλη τη διαδικασία. Τέλος ‘κλείνουμε’ το αρχείο των αποτελεσμάτων μας.



α)



β)

Σχήμα 1.3: Δυναμικές και ισοδυναμικές γραμμές για α) σημειακό φορτίο και β) δύο αντίθετα σημειακά φορτία

Στην υπορουτίνα υπολογίζουμε την απόσταση R του σημείου που βρισκόμαστε $(X0,Y0)$ από κάθε φορτίο, υπολογίζουμε τη συνεισφορά του φορτίου αυτού στο EX και EY και αθροίζουμε για όλα τα φορτία. Ακολουθούμε το λεγόμενο τρόπο του 'μισού βήματος' όπου η θέση του σημείου που βρισκόμαστε είναι $X0+DX/2.0,Y0+DY/2.0$, δηλαδή αυξάνουμε τις τιμές των συντεταγμένων κατά το ήμισυ των αντιστοίχων συνιστωσών του προηγούμενου βήματος. Μία απλή εξήγηση είναι ότι είναι ακριβέστερο να βρισκόμαστε στο μέσον του διαστήματος που μετακινούμαστε παρά στην άκρη του.

Ας δούμε τώρα μερικά απλά παραδείγματα για να ελέγξουμε τη μέθοδό μας. Στην περίπτωση ενός σημειακού φορτίου οι δυναμικές γραμμές είναι ακτινικές και οι ισοδυναμικές κύκλοι. Στο Σχ.(1.3α) βλέπουμε τη σχεδίαση που παίρνουμε χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του προγράμματος. Στο Σχ.(1.3β) βλέπουμε τις δυναμικές και τις ισοδυναμικές γραμμές για δύο αντίθετα φορτία.

Η μέθοδος εφαρμόζεται για απεριόριστο αριθμό σημειακών φορτίων και μπορεί εύκολα να γενικευτεί και για συνεχείς κατανομές.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

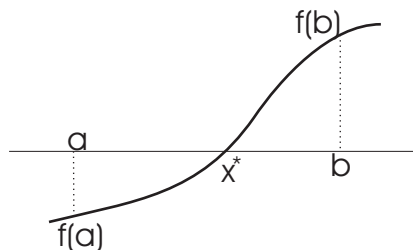
Εύρεση Ριζών μιας Εξίσωσης

Ξεκινάμε με το πιο συνηθισμένο αριθμητικό πρόβλημα, δηλαδή πώς βρίσκουμε τις ρίζες μιας εξίσωσης.

Είναι γνωστό ότι ο αναλυτικός υπολογισμός των ριζών μιας αυθαίρετης δεδομένης εξίσωσης είναι γενικά αδύνατος. Για την περίπτωση των πολυωνυμικών εξισώσεων (που και θεωρούνται οι πιο ‘απλές’ περιπτώσεις), πέρασαν πράγματι πολλοί αιώνες (Αναγέννηση) προτού προχωρήσουμε από τις γνωστές λύσεις της δευτεροβάθμιας σ’ αυτές της τριτοβάθμιας και τεταρτοβάθμιας εξίσωσης. Για πολυωνυμικές εξισώσεις βαθμού μεγαλύτερου του τετάρτου, χρειάστηκε να φτάσουμε έως τον 18ο με 19ο αιώνα για να κατανοήσουμε (με τις έρευνες των Lagrange, Abel και Galois) ότι είναι αδύνατο να εκφράσουμε τις λύσεις μιας γενικής πολυωνυμικής εξίσωσης, βαθμού ανώτερου του τετάρτου, με τη βοήθεια πεπερασμένου αριθμού τετραγωνικών, κυβικών ή ανώτερης τάξης ριζών ρητών εκφράσεων των συντελεστών του πολυωνύμου¹. Φυσικά υπάρχουν κλάσεις πολυωνύμων, βαθμού μεγαλύτερου του τετάρτου, των οποίων οι λύσεις μπορούν να εκφραστούν με αυτό τον τρόπο. Για παράδειγμα: η εξίσωση $a_6x^6 + a_5x^5 + a_4x^4 + 2a_5x^3 + a_4x^2 + a_5x + a_6 = 0$ μπορεί να παραγοντοποιηθεί σε γινόμενο του παράγοντα $x^2 + 1$ επί ένα πολυώνυμο τετάρτου βαθμού. Αλλά, φυσικά είναι μια ειδική περίπτωση πολυωνυμικής εξίσωσης εκτου βαθμού και όχι η γενική μορφή της.

Για πιο περίπλοκες περιπτώσεις δεν υπάρχουν γενικές εκφράσεις που δίνουν τις ρίζες. Αλλά υπάρχει και άλλο ένα σημείο, που αποτελεί και το λόγο

¹Το εκπληκτικό είναι ότι αυτό το αποτέλεσμα παρουσιάστηκε ως ειδική περίπτωση μιας εκτεταμένης μελέτης που αναφερόταν στις συμμετρίες μεταξύ ομάδων αντικειμένων κάτω από μετάθεση. Στην περίπτωση μας, τα αντικείμενα είναι οι συντελεστές των πολυωνύμων. Αυτή ακριβώς η μελέτη μπορεί να θεωρηθεί ως το πιστοποιητικό γέννησης της θεωρίας των ομάδων, κλάδος που έμελλε να παίξει σημαντικότατο ρόλο στα μαθηματικά, τη φυσική, τη χημεία και τη βιολογία.



Σχήμα 2.1: Το θεώρημα της ενδιάμεσης τιμής: μια συνεχής συνάρτηση σ' ένα διάστημα, της οποίας οι τιμές στα άκρα έχουν διαφορετικό πρόσημο, πρέπει να μηδενίζεται σε κάποιο σημείο του διαστήματος.

ύπαρξης αυτής της μελέτης: Δυστυχώς, όσο ωραίες και αν είναι οι γενικές λύσεις των πολυωνυμικών εξισώσεων 3ου και 4ου βαθμού, προσαρμόζονται πολύ δύσκολα σε αριθμητικούς υπολογισμούς. Αυτό που θέλουμε να πούμε είναι ότι ο αριθμητικός υπολογισμός αυτών των εκφράσεων είναι τόσο επιρρεπής σε αριθμητικά σφάλματα, ώστε προτιμώνται οι μέθοδοι εύρεσης ριζών που θα παρουσιαστούν σ' αυτό το κεφάλαιο. Επιπλέον, οι μέθοδοι αυτές είναι γενικές και εφαρμόζονται τόσο σε απλές όσο και σε δύσκολες περιπτώσεις.

Το πρόβλημα μας λοιπόν μπορεί να τεθεί με τον ακόλουθο γενικό τρόπο: Αναζητούμε τις ρίζες της εξίσωσης:

$$f(x) = 0 \quad (2.1)$$

όπου $x \in \mathbb{R}^n$ και $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Ενδιαφερόμαστε για την περίπτωση $n = 1$, αλλά είναι φανερό ότι η περίπτωση $n = 2$ ενδέχεται να εμφανισθεί στην περίπτωση *μγαδικών* λύσεων πραγματικών πολυωνυμικών εξισώσεων.

2.1 Οι Ρίζες είναι Πραγματικές και Απλές

Για τις περιπτώσεις αυτές, δηλαδή πραγματικών ριζών, τα πράγματα - στη θεωρία - είναι μάλλον απλά: γνωρίζουμε ότι αν η συνάρτηση είναι συνεχής στο διάστημα $[a, b]$ και επιπλέον $f(a)f(b) < 0$, υπάρχει τουλάχιστον ένα σημείο x^* για το οποίο ισχύει $f(x^*) = 0$ (βλ. το Σχ.(2.1)). Αν, αντιθέτως, η συνάρτηση δεν αλλάζει πρόσημο σε κανένα διάστημα, τότε οι λύσεις είναι *μγαδικές* και τα πράγματα δυσκολεύουν.

Η αξία αυτού του θεωρήματος έγκειται στο ότι μας βεβαιώνει για την ύπαρξη λύσης με πολύ μικρό αντάλλαγμα: τη γνώση της τιμής της συνάρτησης. Επίσης είναι η αφετηρία μιας προσεγγιστικής μεθόδου εύρεσης της ρίζας καθώς και ελέγχου της ακρίβειας της μεθόδου αυτής. Η στρατηγική λοιπόν είναι η ακόλουθη: κάθε φορά που βρίσκουμε κάποιο διάστημα το οποίο περιέχει τουλάχιστον μία ρίζα, προσπαθούμε να το μειώσουμε έως ότου το μέγεθός

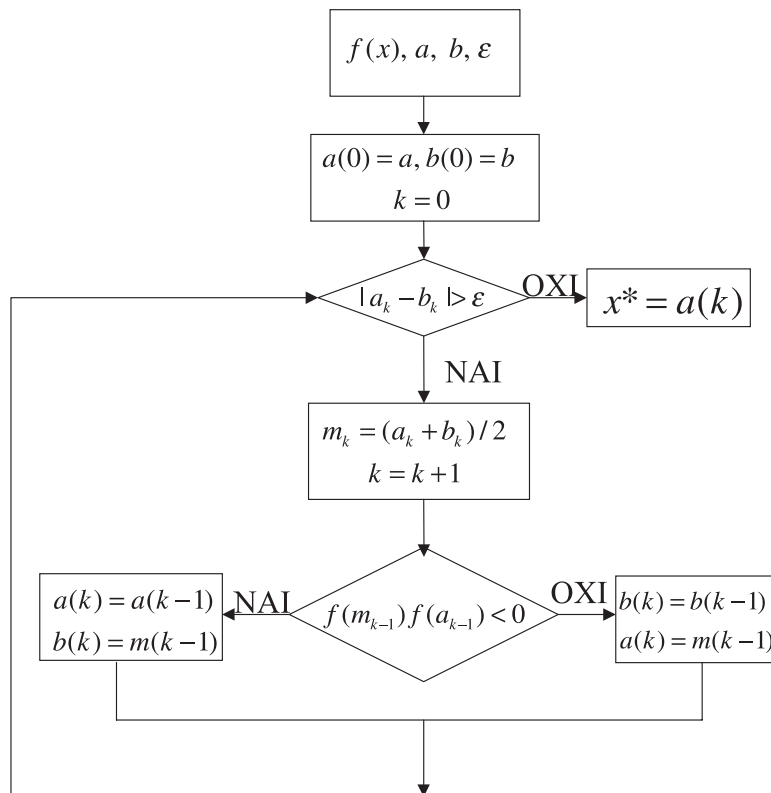
του γίνει συγκρίσιμο με την αριθμητική ακρίβεια, δηλαδή ως το σημείο που δεν μπορούμε να ξεχωρίσουμε το ένα άκρο του διαστήματος από το άλλο.

2.2 Η Μέθοδος της Διχοτόμησης

Ο αλγόριθμος μια τέτοιας διαδικασίας μπορεί να πάρει τη μορφή που φαίνεται στο Σχ.(2.2).

Η σταθερά ϵ είναι η επιθυμητή ακρίβεια του αριθμητικού υπολογισμού. Η ακρίβεια ενός τυπικού υπολογιστή (δηλαδή η μικρότερη δυνατή τιμή που μπορεί να έχει η επιθυμητή ακρίβεια), είναι της τάξης του 10^{-8} για απλή ακρίβεια (single precision), και 10^{-16} για διπλή ακρίβεια (double precision). Βλέπουμε ότι σε κάθε βήμα του αλγορίθμου, το διάστημα διαιρείται δια 2, γι' αυτό και η μέθοδος ονομάζεται μέθοδος διχοτόμησης.

Ας δούμε τώρα ένα σημαντικό σημείο. Με δεδομένη την ακρίβεια ϵ , πόσα βήματα θα πρέπει να κάνουμε; Η απλότητα του αλγορίθμου μας λέει αμέσως



Σχήμα 2.2: Λογικό διάγραμμα για την εύρεση των ριζών εξίσωσης με τη μέθοδο της διχοτόμησης. Η ζητούμενη λύση είναι η x^* . Θεωρούμε ότι $f(a_0) \neq 0$ και $f(b_0) \neq 0$.

ότι:

$$\epsilon = \frac{b_0 - a_0}{2^{k_{min}}} \rightarrow \ln(2^{k_{min}}) = \ln \frac{b_0 - a_0}{\epsilon} \rightarrow k_{min} = \frac{\ln \left| \frac{b_0 - a_0}{\epsilon} \right|}{\ln 2} \quad (2.2)$$

Για την καλύτερη κατανόηση, ας αναφερθούμε σε ένα συγκεκριμένο παράδειγμα.

Υποθέτουμε ότι έχουμε ένα υλικό σημείο μάζας m , συνδεδεμένο μ' ένα οριζόντιο ιδανικό ελατήριο σταθεράς K . Το υλικό σημείο μετακινείται κατά x από τη θέση ισορροπίας του. Η δυναμική του ενέργεια είναι $V = (1/2)Kx^2$. Αν E είναι η ολική του ενέργεια, τότε η μέγιστη απομάκρυνσή του θα δίνεται από τη ρίζα της εξίσωσης $E = V(x)$. Ένα απλό γράφημα μας βεβαιώνει ότι υπάρχουν 2 σημεία που επαληθεύουν αυτήν την εξίσωση, για οποιαδήποτε τιμή της ολικής ενέργειας. Η κίνηση είναι περιοδική και φραγμένη και οι λύσεις της εξίσωσης είναι ανεξάρτητες της μάζας του υλικού σημείου. Αν διαλέξουμε $K = 2 \text{ J/m}^2$ και $E = 0.7 \text{ J}$, καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$E = \frac{1}{2}Kx^2 \Rightarrow x^2 = \frac{2E}{K} \Rightarrow x^2 = 0.7 \quad (2.3)$$

Για $x > 0$, μπορούμε εύκολα να δούμε ότι $0.64 = 0.8^2 < 0.7 < 0.81 = 0.9^2$, που μας οδηγεί στο διάστημα $[0.8, 0.9]$ ως αρχικό διάστημα με ακρίβεια πρώτου δεκαδικού ψηφίου. Δηλαδή ήδη ξέρουμε ότι $0.8 < x^* = 0.8\dots < 0.9$. Η Εξ.(2.2) μας λέει ότι τρεις επιπλέον επαναλήψεις είναι αρκετές για να υπολογίσουμε το επόμενο ψηφίο στην προσέγγισή μας, και ότι με 5 επαναλήψεις η ακρίβεια μας θα είναι 10^{-4} . Δηλαδή θα γνωρίζουμε 3 ψηφία μετά την υποδιαστολή. Πιο συγκεκριμένα, βρίσκουμε $a_1 = 0.8$, $b_1 = 0.85$, $a_2 = 0.825$, $b_2 = 0.85$, $a_3 = 0.825$, $b_3 = 0.8375$, $a_4 = 0.83125$, $b_4 = 0.8375$ και επομένως είμαστε σίγουροι ότι $x^* = 0.83\dots$

Ας προχωρήσουμε σε μια όχι τόσο τετριμμένη περίπτωση, παίρνοντας ένα πραγματικό ελατήριο που παρουσιάζει και μη γραμμικές αποκρίσεις, κάτι που εμφανίζεται όταν η απομάκρυνση του υλικού σημείου δεν μπορεί να θεωρείται 'μικρή' και η γραμμική απόκριση δεν είναι αρκετή για να περιγράψει το φαινόμενο. Μπορούμε να πάρουμε λοιπόν τη δυναμική ενέργεια $V[x] = (1/2)Kx^2 + ax^3$ με $a < 0$. Η μορφή αυτή μας βοηθά να καταλάβουμε τι γίνεται όταν το ελατήριο σπάει - και η μάζα ελευθερώνεται - οπότε και η ενέργεια E ξεπερνά μια κρίσιμη τιμή E_{cr} . Τότε η εξίσωση γίνεται:

$$ax^3 + (1/2)Kx^2 - E = 0 \quad (2.4)$$

Ας πάρουμε την προηγούμενη τιμή για την ενέργεια $E = 0.7 \text{ J}$ και για τη σταθερά $K = 2 \text{ J/m}^2$ και ας προσπαθήσουμε να καταλάβουμε τι ακριβώς γίνεται για ένα μικρό a ($a \simeq 0.1$ για παράδειγμα). Μπορούμε να θεωρήσουμε τον κυβικό όρο ως μια διαταραχή της Εξ.(2.3), αλλά είναι μια ιδιαίτερη διαταραχή εφόσον για $a = 0$ η εξίσωση έχει μόνο 2 λύσεις, ενώ για $a \neq 0$, όσο μικρό και

αν είναι, η Εξ. (2.4) έχει 3 πραγματικές λύσεις για $E < E_{cr}$, 2 πραγματικές (εκ των οποίων μια διπλή) για $E = E_{cr}$ και μια πραγματική για $E > E_{cr}$.

Η εξίσωση παίρνει λοιπόν τη μορφή:

$$0.7 = x^2 - 0.1x^3 = x^2(1 - (1/10)x) \equiv g(x) \quad (2.5)$$

και είναι εύκολο να καταλάβουμε ότι οι ρίζες βρίσκονται στα παρακάτω διαστήματα: $x_1 \in (-1, 0)$, $x_2 \in (0, 1)$, $x_3 \in (9, 10)$, δηλαδή $x_1 = -0. \dots$, $x_2 = 0. \dots$ και $x_3 = 9. \dots$, εφόσον $(g(-1) - 0.7) (g(0) - 0.7) < 0$ κλπ.

Τέλος, όπως είδαμε στην Εξ.(2.2)

$$\epsilon = \frac{b_0 - a_0}{2^{k_{min}}}$$

και εφόσον τα διαστήματά μας έχουν εύρος μονάδα,

$$\begin{aligned} k_{min} = 4 &\rightarrow \epsilon = 1/16 \sim 0.6 \\ 5 &\rightarrow 1/32 \sim 0.3 \\ 6 &\rightarrow 1/64 \sim 0.02 \end{aligned}$$

δηλαδή με 6 επαναλήψεις το σφάλμα μας επιτρέπει να βρούμε δυο ψηφία μετά την υποδιαστολή.

2.3 Η Μέθοδος Newton-Raphson

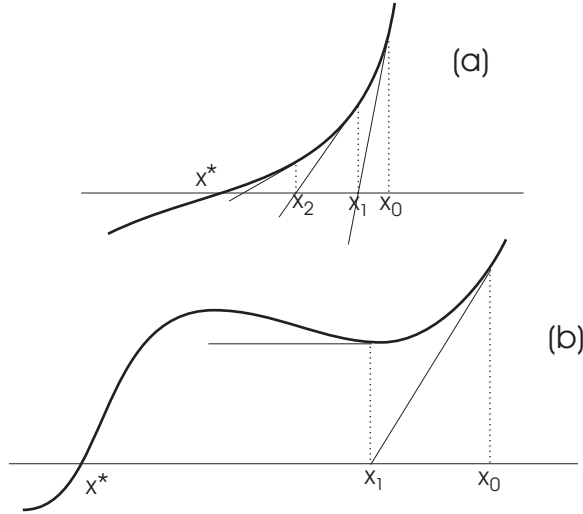
Μετά από αυτή την πρακτική άσκηση μπορούμε να συνοψίσουμε λέγοντας ότι κατέχουμε μια σίγουρη μέθοδο, και να προχωρήσουμε παρακάτω ρωτώντας αν είναι δυνατόν να αυξήσουμε τις επιδόσεις της, δηλαδή να επιταχύνουμε τη σύγκλιση της προς μια ρίζα. Τέτοια μέθοδος, η οποία χρησιμοποιείται συχνά, είναι η λεγόμενη Newton-Raphson. Το πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ακριβώς ότι συγκλίνει γρηγορότερα από τη μέθοδο της διχοτόμησης και ότι μπορεί να γενικευτεί για περισσότερες διαστάσεις. Το μειονέκτημά της είναι ότι δεν δίνει καμιά εγγύηση για τη σύγκλιση προς τη ρίζα. Δηλαδή, αν αρχίσουμε 'κοντά' στη ρίζα η μέθοδος δουλεύει άψογα, αλλά αν είμαστε 'μακριά' αποκλίνει θεαματικά. Φυσικά, οι έννοιες 'μακριά' και 'κοντά' εξαρτώνται από την ίδια την εξίσωση που επιλύουμε! Επομένως, η διαίσθηση παίζει σοβαρό ρόλο και ο υπολογισμός μερικών τιμών της συνάρτησης μπορεί να δώσει πολύτιμες πληροφορίες.

Για να γίνουμε σαφείς, θα περιγράψουμε τη μέθοδο χρησιμοποιώντας το Σχ.(2.3α). Εύκολα φαίνεται ότι:

$$0 \equiv f'(x_0)x_1 + (f(x_0) - f'(x_0)x_0) \rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}, \quad (2.6)$$

σχέση που μπορεί να γενικευτεί στην:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.7)$$



Σχήμα 2.3: Η επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson. Το σημείο x_0 είναι το σημείο έναρξης, το οποίο πρέπει να είναι κοντά στη ρίζα.

Μπορούμε να δούμε ήδη μια πηγή ανησυχίας: αν η παράγωγος μηδενίζεται σε κάποιο σημείο, η μέθοδος τερματίζεται (Σχ.(2.3β)). Αλλά ακόμα πιο προβληματική είναι η περίπτωση όπου η παράγωγος στο x_k είναι περίπου μηδέν, δηλαδή $f'(x_k) \approx 0$. Τότε το σφάλμα δεν ελέγχεται πλέον, χωρίς μάλιστα να έχουμε κάποιο συγκεκριμένο 'μήνυμα σφάλματος'.

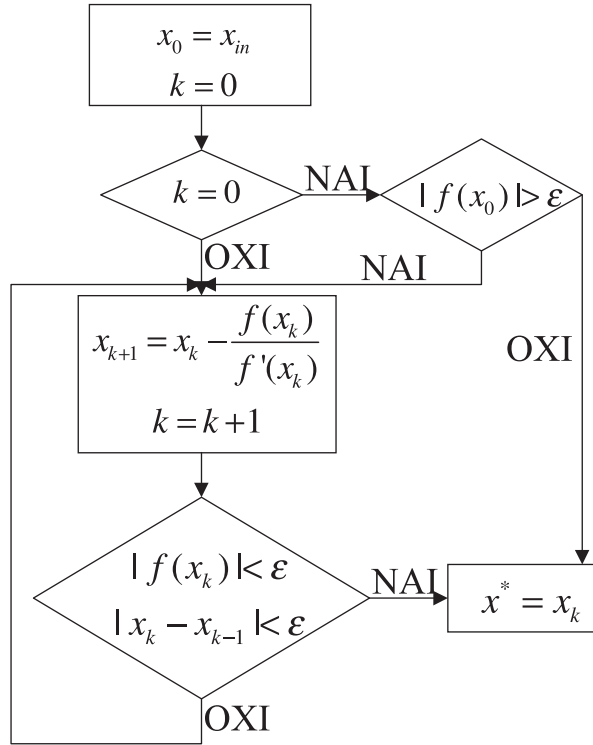
Αλλά υπάρχει και άλλο ένα πρόβλημα το οποίο σχετίζεται με τη σύγκλιση του αλγορίθμου: τίποτα δε μας βεβαιώνει, ακόμα και αν $f'(x) \neq 0$, ότι η ακολουθία $\{x_k\}$ συγκλίνει σε κάποιο όριο και ότι αυτό το όριο είναι μια λύση της εξίσωσή μας. Παρόλ' αυτά, ο αλγόριθμος των Newton-Raphson χρησιμοποιείται στις μέρες μας τόσο για την δυνατότητα του στην εύρεση ριζών όσο και για τις ιδιότητες των ακολουθιών που παράγει.

Επομένως, μετά την αναφορά όλων των μειονεκτημάτων της μεθόδου, ας περιγράψουμε και την άλλη όψη του νομίσματος: την ταχύτητα σύγκλισης όταν αυτή επιτυγχάνεται. Αν x^* είναι η ρίζα, ας συμβολίσουμε με ϵ_k το $x_k - x^*$. Χρησιμοποιούμε τώρα τη θεμελιώδη υπόθεση της μεθόδου: το ότι είμαστε αρκετά κοντά στη ρίζα και μπορούμε να αναπτύξουμε μια οριακή προσέγγιση. Από την Εξ.(2.7) παίρνουμε:

$$\epsilon_{k+1} = \epsilon_k - \frac{f(x^* + \epsilon_k)}{f'(x^* + \epsilon_k)} = \frac{\epsilon_k f'(x^* + \epsilon_k) - f(x^* + \epsilon_k)}{f'(x^* + \epsilon_k)} \quad (2.8)$$

και από τα αναπτύγματα Taylor των $f(x)$ και $f'(x)$ περί το $x = x^*$ έχουμε:

$$\begin{aligned} f(x^* + \epsilon_k) &= 0 + \epsilon_k f'(x^*) + (1/2)\epsilon_k^2 f''(x^*) + \mathcal{O}(\epsilon_k^3) \\ f'(x^* + \epsilon_k) &= f'(x^*) + \epsilon_k f''(x^*) + (1/2)\epsilon_k^2 f'''(x^*) + \mathcal{O}(\epsilon_k^3) \end{aligned}$$



Σχήμα 2.4: Λογικό διάγραμμα για την εύρεση των ριζών εξίσωσης με τη μέθοδο Newton-Raphson. Η ζητούμενη λύση είναι η x^* .

Αντικαθιστώντας τις τελευταίες στην Εξ.(2.8) βρίσκουμε:

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{k+1} &= \frac{(1/2)\epsilon_k^2 f''(x^*) + \mathcal{O}(\epsilon_k^3)}{f'(x^*) + \epsilon_k f''(x^*) + (1/2)\epsilon_k^2 f'''(x^*) + \mathcal{O}(\epsilon_k^3)} = \\
 &= \epsilon_k^2 \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \frac{1 + \mathcal{O}(\epsilon_k)}{1 + \mathcal{O}(\epsilon_k)} = \epsilon_k^2 \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} (1 + \mathcal{O}(\epsilon_k)) \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

δηλαδή $\epsilon_{k+1} \sim \epsilon_k^2$. Μπορούμε να συγκρίνουμε αυτό το σφάλμα με το αντίστοιχο της μεθόδου της διχοτόμησης, όπου είχαμε βρει ότι (βλ. Εξ.(2.2)) $\epsilon_{k+1} = (1/2)\epsilon_k$, και να δούμε άμεσα ότι η νέα μέθοδος είναι πιο αποτελεσματική: μπορούμε να κερδίσουμε έως και 2 ψηφία ανά επανάληψη της διαδικασίας! Βέβαια η προϋπόθεση είναι να είμαστε κοντά στη ρίζα - έτσι ώστε η οριακή διαδικασία να έχει νόημα - και επίσης ο παράγοντας $f''(x^*)/(2f'(x^*))$ να είναι μικρός (της τάξης της μονάδας). Βέβαια, η δεύτερη συνθήκη μπορεί να ελεγχθεί μόνο εκ των υστέρων, ενώ η πρώτη επαφίεται στη φυσική διάισθηση που μπορεί να αντληθεί, κατά ένα μέρος, από τον αριθμητικό υπολογισμό τιμών της συνάρτησης. Στο Σχ.(2.4) φαίνεται ο αλγόριθμος που αντιστοιχεί στη μέθοδο Newton-Raphson.

2.4 Μιγαδικές Ρίζες

Τι γίνεται τώρα όταν οι ρίζες είναι μιγαδικές; Καμιά από τις μεθόδους δεν φαίνεται να μας βοηθά. Αλλά η μέθοδος Newton-Raphson γενικεύεται με τον ακόλουθο τρόπο. Γράφοντας:

$$f(x + \epsilon) \approx f(x) + \epsilon f'(x)$$

και αν υποθέσουμε ότι $f(x + \epsilon) \approx 0$, παίρνουμε:

$$\epsilon = -\frac{f(x)}{f'(x)}$$

και μια καινούργια προσέγγιση για τη ρίζα θα είναι:

$$x_{\text{νέο}} = x_{\text{παλιό}} + \epsilon$$

(συγκρίνετε με την Εξ.(2.7)). Αυτή η αλγεβρική αναπαράσταση της μεθόδου επιτρέπει την εύκολη γενίκευσή της για την περίπτωση εύρεσης ριζών συνάρτησης πολλών πραγματικών μεταβλητών. Ένα παράδειγμα θα διαφωτίσει το θέμα.

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να βρούμε τις (μιγαδικές) ρίζες της εξίσωσης $f(x) = x^2 + x + 1$, η οποία είναι και η χαρακτηριστική εξίσωση της διαφορικής εξίσωσης:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \Gamma \frac{dx}{dt} + Kx = 0$$

που περιγράφει την κίνηση ενός αρμονικού ταλαντωτή με απόσβεση (για παράδειγμα, κίνηση μιας μάζας συνδεδεμένης με ελατήριο μέσα σε ρευστό για $\Gamma = 1$, $K = 1$ και $m = 1$). Γράφοντας $z = \lambda_R + i\lambda_I$, η εξίσωση $f(z) = 0$ είναι ισοδύναμη με:

$$(\lambda_R^2 - \lambda_I^2 + \lambda_R + 1) + i(2\lambda_R\lambda_I + \lambda_I) = 0$$

Από κατασκευής, $\lambda_R, \lambda_I \in \mathbb{R}$ και γνωρίζουμε πως η τελευταία εξίσωση υποδηλώνει ότι τόσο το πραγματικό όσο και το μιγαδικό τμήμα πρέπει να είναι μηδέν, δηλαδή:

$$f(z) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} f_R(\lambda_R, \lambda_I) = 0 \\ \text{και} \\ f_I(\lambda_R, \lambda_I) = 0 \end{cases}$$

όπου $f_R(\lambda_R, \lambda_I) \equiv \lambda_R^2 - \lambda_I^2 + \lambda_R + 1$ και $f_I(\lambda_R, \lambda_I) \equiv 2\lambda_R\lambda_I + \lambda_I$.

Εφαρμόζοντας λοιπόν τα παραπάνω, αναζητούμε τις βελτιώσεις $\delta\lambda_R$ και $\delta\lambda_I$ αναπτύσσοντας:

$$\begin{aligned} f_R(\lambda_R + \delta\lambda_R, \lambda_I + \delta\lambda_I) &= f_R(\lambda_R, \lambda_I) + \delta\lambda_R \left. \frac{\partial f_R}{\partial \lambda_R} \right|_{\lambda_R, \lambda_I} + \delta\lambda_I \left. \frac{\partial f_R}{\partial \lambda_I} \right|_{\lambda_R, \lambda_I} \\ f_I(\lambda_R + \delta\lambda_R, \lambda_I + \delta\lambda_I) &= f_I(\lambda_R, \lambda_I) + \delta\lambda_R \left. \frac{\partial f_I}{\partial \lambda_R} \right|_{\lambda_R, \lambda_I} + \delta\lambda_I \left. \frac{\partial f_I}{\partial \lambda_I} \right|_{\lambda_R, \lambda_I} \end{aligned}$$

Μηδενίζοντας το αριστερό μέλος των παραπάνω εξισώσεων, καταλήγουμε σε ένα γραμμικό σύστημα δυο εξισώσεων με δυο αγνώστους, $\delta\lambda_R$ και $\delta\lambda_I$. Μπορούμε να λύσουμε το σύστημα αυτό εύκολα, γράφοντάς το σε μορφή πινάκων:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -f_R(\lambda_R, \lambda_I) \\ -f_I(\lambda_R, \lambda_I) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f_R}{\partial \lambda_R} & \frac{\partial f_R}{\partial \lambda_I} \\ \frac{\partial f_I}{\partial \lambda_R} & \frac{\partial f_I}{\partial \lambda_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\lambda_R \\ \delta\lambda_I \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2\lambda_R + 1 & -2\lambda_I \\ 2\lambda_I & 2\lambda_R + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\lambda_R \\ \delta\lambda_I \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Είναι εύκολο να υπολογίσουμε τον αντίστροφο ενός 2×2 πίνακα. Ελέγχοντας την αλήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$\frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

οδηγούμαστε στην εξής λύση για τα $\delta\lambda_R$ και $\delta\lambda_I$:

$$\begin{pmatrix} \delta\lambda_R \\ \delta\lambda_I \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\lambda_R + 1)^2 + 4\lambda_I^2} \begin{pmatrix} 2\lambda_R + 1 & +2\lambda_I \\ -2\lambda_I & 2\lambda_R + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_I^2 - \lambda_R^2 - \lambda_R - 1 \\ -2\lambda_R\lambda_I - \lambda_I \end{pmatrix}$$

Προσθέτοντας το παραπάνω διάνυσμα στο (λ_R, λ_I) παίρνουμε την πραγματική και φανταστική τιμή της νέας προσέγγισης της λύσης. Συνεχίζουμε με αυτόν τον τρόπο έως ότου προκύψει:

- $\sqrt{(\delta\lambda_R)^2 + (\delta\lambda_I)^2} < \epsilon$
- $|f_R(\lambda_R, \lambda_I)| < \epsilon$
- $|f_I(\lambda_R, \lambda_I)| < \epsilon$

Απαιτούνται και οι τρεις συνθήκες. Όπως ακριβώς και για την περίπτωση πραγματικών ριζών, η διόρθωση καθώς και οι τιμές των συναρτήσεων (οι οποίες στο σημείο που ψάχνουμε πρέπει να μηδενίζονται), θα πρέπει να είναι μικρότερες από την ακρίβεια με την οποία εργαζόμαστε.

Πώς όμως αποφασίζουμε για το σημείο εκκίνησης; Βλέπουμε εύκολα ότι η τιμή $\lambda_R^{(0)} = 1/2$ απλοποιεί πολύ τις πράξεις. Για την $\lambda_I^{(0)}$ η τιμή $\pm 1/2$ είναι επίσης καλή, εφόσον ο συνδυασμός $2\lambda_I^{(0)}$ εμφανίζεται στα στοιχεία του πίνακα. Συνιστάται πάντως να γίνει κάποιο γράφημα στο επίπεδο (λ_R, λ_I) και να ακολουθείται η κίνηση των σημείων. Τι θα παρατηρήσουμε αν πάρουμε ως αφετηρία άλλα σημεία;

Παρατήρηση 1η. Από γεωμετρική άποψη, οι ρίζες είναι τα σημεία τομής των καμπυλών:

$$f_R(\lambda_R, \lambda_I) = 0, \quad f_I(\lambda_R, \lambda_I) = 0$$

Παρατήρηση 2η. Παρατηρούμε ότι η εύρεση των μιγαδικών λύσεων είναι μια ειδική περίπτωση της λύσης ενός μη γραμμικού συστήματος εξισώσεων.

Ως παράδειγμα, μπορούμε να αναζητήσουμε τα σημεία ισορροπίας ενός υλικού σημείου που κινείται στο επίπεδο υπό την επίδραση ενός δυναμικού της μορφής:

$$V[x, y] = \frac{1}{2}K(x^2 + y^2) - a(x^2 + y^2)^2 - F_x \cdot x - F_y \cdot y \quad (2.10)$$

Συμπέρασμα

Στο κεφάλαιο αυτό αναφερθήκαμε στις μεθόδους αριθμητικού υπολογισμού των λύσεων μιας εξίσωσης. Κάθε μια από αυτές έχει τα πλεονεκτήματά της - τα οποία πρέπει να εκμεταλλευόμαστε στο έπακρο - όπως και τα μειονεκτήματά της - τα οποία πρέπει να λαμβάνουμε σοβαρά υπόψη - ώστε τα αποτελέσματα να έχουν σημασία. Η μέθοδος της διχοτόμησης είναι σίγουρη, αλλά αργή. Η Newton-Raphson είναι ταχύτερη, αλλά επικίνδυνη αν δεν γνωρίζουμε τη συμπεριφορά της συνάρτησης. Επίσης δεν είναι ανταγωνιστική αν δεν μπορούμε να υπολογίσουμε την παράγωγο της συνάρτησης με την ίδια ακρίβεια που υπολογίζουμε την ίδια τη συνάρτηση. Από την άλλη, είναι η μόνη μέθοδος που μπορεί να γενικευτεί για την περίπτωση μιγαδικών λύσεων ή των λύσεων ενός μη γραμμικού συστήματος εξισώσεων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Αριθμητική Ολοκλήρωση

Μια ενδιαφέρουσα διαφορά μεταξύ της παραγωγίσης και της ολοκλήρωσης είναι ότι υπάρχουν ολοκληρώματα, τα οποία δεν μπορούν να υπολογιστούν αναλυτικά, ενώ αντιθέτως δεν υπάρχει θεωρητικό εμπόδιο στον υπολογισμό της παραγώγου μιας συνάρτησης (ή στο συμπέρασμα ότι δεν υπάρχει η παράγωγος).

Επιπλέον, όπως ήδη αναφέραμε, η αναλυτική μορφή δεν προσαρμόζεται πάντοτε αρμονικά με αριθμητικούς υπολογισμούς.

Το απλούστερο φυσικό παράδειγμα είναι πάλι η κίνηση ενός σωματιδίου μέσα σ' ένα δυναμικό, σε μια διάσταση. Όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο, όταν γνωρίζουμε την ενέργεια διαθέτουμε όλες τις αναγκαίες πληροφορίες για τον υπολογισμό των ορίων κίνησης. Εδώ θα ασχοληθούμε με το δυναμικό πρόβλημα του υπολογισμού του χρονικού διαστήματος που χρειάζεται το σωματίδιο για να μετακινηθεί από ένα σημείο σ' ένα άλλο.

Η λύση ενός τέτοιου σημαντικού προβλήματος στη φυσική, έγκειται στην ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων της κίνησης. Οι αριθμητικές μέθοδοι για το σκοπό αυτό αποτελούν το αντικείμενο του κεφαλαίου αυτού. Σε μία διάσταση, με διατήρηση της ενέργειας, καταλήγουμε εύκολα σε μια συνήθη διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης. Η ολοκλήρωση αυτής της διαφορικής εξίσωσης μπορεί να γίνει αναλυτικά μόνο σε πολύ λίγες περιπτώσεις, οπότε η ανάγκη μιας αριθμητικής προσέγγισης είναι εμφανής.

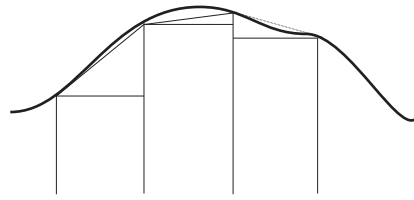
Υπενθυμίζουμε ότι η διατήρηση της ενέργειας, σε μια διάσταση, μπορεί να περιγραφεί από την εξίσωση:

$$E = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V(x) = \text{σταθερή} \quad (3.1)$$

Η εξίσωση αυτή οδηγεί στην εξίσωση του Newton:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} \quad (3.2)$$

δηλαδή, σε μια συνήθη διαφορική εξίσωση δευτέρας τάξης, όπου βέβαια θα πρέπει να καθορίσουμε την αρχική θέση και την αρχική ταχύτητα. Αλλά πολύ



Σχήμα 3.1: Αριθμητική ολοκλήρωση

εύκολα διακρίνουμε ότι μπορούμε να λύσουμε την εξίσωση αυτή ως προς την ταχύτητα, οπότε η διαφορική εξίσωση είναι πρώτης τάξης:

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(x))} \quad (3.3)$$

με αρχική συνθήκη $x(0) = x_0$. Αυτή η εξίσωση ολοκληρώνεται άμεσα:

$$t = \int_{x_0}^x \frac{dx'}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V[x'])}} \quad (3.4)$$

η οποία, αν αναστραφεί, μας δίνει την τροχιά $x(t)$ του σωματιδίου.

3.1 Η Μέθοδοι των Ορθογωνίων και των Τραπεζίων

Για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος, μπορούμε να ξεκινήσουμε βέβαια από τον μαθηματικό ορισμό του:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N+1} f(x_i)\delta x_i \quad (3.5)$$

(βλέπε Σχ.(3.1)). Το πρόβλημα είναι ότι η σύγκλιση αυτής της σειράς προς το ολοκλήρωμα είναι πολύ αργή και επίσης το σφάλμα (ως προς την θεωρητική τιμή που ορίζεται βέβαια όταν $N \rightarrow \infty$), είναι σημαντικό.

Μια καλύτερη προσέγγιση έχουμε αν χρησιμοποιήσουμε, αντί των ορθογωνίων παραλληλογράμμων, τα τραπέζια:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \left(\frac{1}{2}f(a) + f(x_1) + \dots + f(x_N) + \frac{1}{2}f(b) \right) \quad (3.6)$$

Παράδειγμα:

Ως ένα απλό παράδειγμα ας πάρουμε την $f(x) = Ax + B$. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό του ολοκληρώματος:

$$\int_a^b f(x)dx \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} h \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k)$$

όπου $x_k = a + kh$ και $h = (b - a)/N$. Για πεπερασμένο N βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} h \sum_{k=0}^{N-1} (Ax_k + B) &= h \left((B + Aa)N + Ah \sum_{k=0}^{N-1} k \right) = \\ &= B(b - a) + (A/2)(b^2 - a^2) - (A/2N)(b - a)^2 \end{aligned}$$

Γνωρίζοντας το ακριβές αποτέλεσμα $(A(b^2 - a^2)/2 + B(b - a))$, βλέπουμε ότι το σφάλμα είναι της τάξης $\mathcal{O}(1/N)$. Αν χρησιμοποιήσουμε τα τραπέζια βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} &h \left[\frac{1}{2}(Aa + B) + Ax_1 + B + Ax_2 + B + \dots + Ax_{N-1} + B + \frac{1}{2}(Ab + B) \right] = \\ &= h \left[(A/2)(a + b) + NB + Aa(N - 1) + Ah \sum_{k=0}^{N-1} k \right] = \\ &= \frac{b - a}{N} [(A/2)(b + a)N + BN] \end{aligned}$$

δηλαδή βλέπουμε ότι έχουμε το ακριβές αποτέλεσμα, ακόμα και για N πεπερασμένο! Στην πρώτη περίπτωση (με τα ορθογώνια) η συνάρτηση θεωρείται σταθερή σε κάθε διάστημα, ενώ στη δεύτερη περίπτωση (με τα τραπέζια) η συνάρτηση θεωρείται γραμμική σε κάθε διάστημα. Η συνάρτηση του παραδείγματός μας είναι πράγματι γραμμική. Οπότε, στην πρώτη περίπτωση το σφάλμα είναι ανάλογο του συντελεστή του γραμμικού όρου, A , ενώ στη δεύτερη το σφάλμα είναι μηδέν.

3.2 Η Μέθοδος Simpson

Μπορούμε να συνεχίσουμε με την ίδια φιλοσοφία και να φτάσουμε στον τύπο του *Simpson* που θεωρεί ότι η συνάρτηση είναι τετραγωνική σε κάθε διάστημα, δηλαδή ότι μπορεί να προσεγγιστεί από ένα πολυώνυμο δεύτερου βαθμού. Αλλά ας δούμε πιο συγκεκριμένα αυτή την περίπτωση.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε το διάστημα $[a, b]$ και το μέσον του $m \equiv (a + b)/2$. Υπάρχει ένα, και μόνο ένα, πολυώνυμο δεύτερου βαθμού,

το $P(x)$, το οποίο παίρνει τις τιμές $f(a)$, $f(b)$ και $f(m)$ στις θέσεις a , b και m αντίστοιχα. Για να βρούμε το πολυώνυμο αυτό, θέτουμε $P(x) = Ax^2 + Bx + C$ και απαιτούμε $P(a) = f(a)$, $P(b) = f(b)$ και $P(m) = f(m)$. Με αυτό τον τρόπο, παίρνουμε ένα γραμμικό σύστημα τριών εξισώσεων με τρεις αγνώστους, τους συντελεστές A , B και C . Γι' αυτό το πολυώνυμο έχουμε:

$$\int_a^b P(x)dx = h \left(\frac{1}{3}P(a) + \frac{4}{3}P(m) + \frac{1}{3}P(b) \right) \quad (3.7)$$

όπου $h \equiv (b - a)/2$. Η απόδειξη είναι εύκολη: Αντικαταστήστε το $P(x)$ με $Ax^2 + Bx + C$ και θα καταλήξετε σε ταυτότητα. Μια πιο ενδιαφέρουσα απόδειξη είναι η ακόλουθη:

Ξέρουμε ότι

- Κάθε πολυώνυμο $P(x)$ δευτέρου βαθμού μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των μονωνύμων x^2 , x και 1 .
- Η ολοκλήρωση είναι μια γραμμική πράξη:

$$\int_a^b (c_1 f(x) + c_2 g(x))dx = c_1 \int_a^b f(x)dx + c_2 \int_a^b g(x)dx \quad (3.8)$$

- Αρκεί να μπορούμε να ολοκληρώσουμε στο διάστημα $[0, 1]$:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_0^{b-a} f(x+a) d(x+a) \\ &= (b-a) \int_0^1 f\left(\frac{x+a}{b-a}(b-a)\right) d\left(\frac{x+a}{b-a}\right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Επομένως, μπορούμε να γράψουμε:

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^2 dx &= \frac{1}{2} \left(\alpha \cdot 0^2 + \beta \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \gamma \cdot 1^2 \right) \\ \int_0^1 x dx &= \frac{1}{2} \left(\alpha \cdot 0^1 + \beta \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^1 + \gamma \cdot 1^1 \right) \\ \int_0^1 dx &= \frac{1}{2} (\alpha \cdot 1 + \beta \cdot 1 + \gamma \cdot 1) \end{aligned} \quad (3.10)$$

και είναι εύκολο να λυθεί το σύστημα για τους τρεις αγνώστους που δίνει $\alpha = 1/3$, $\beta = 4/3$ και $\gamma = 1/3$. Η θεμελιώδης ιδιότητα αυτών των συντελεστών είναι η ανεξαρτησία τους από το συγκεκριμένο δευτεροβάθμιο πολυώνυμο που θέλουμε να ολοκληρώσουμε, αλλά και από το διάστημα $[a, b]$ ολοκλήρωσης που μας ενδιαφέρει. Η όλη διαδικασία εξαρτάται μόνο από την εκλογή μας να προσεγγίσουμε την υπό ολοκλήρωση συνάρτηση με πολυώνυμο (το πολύ) δευτέρου βαθμού.

Συμπέρασμα

Για τον αριθμητικό υπολογισμό ενός ολοκληρώματος μιας συνάρτησης με τη

μέθοδο του *Simpson*, αντικαθιστούμε τη συνάρτηση με ένα πολυώνυμο δευτέρου βαθμού το οποίο στά άκρα και στο μέσον του διαστήματος ολοκλήρωσης παίρνει τις τιμές που έχει η συνάρτηση για τα ίδια σημεία, και ολοκληρώνουμε αυτό το συγκεκριμένο πολυώνυμο ακριβώς.

Παράδειγμα:

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx$$

Θα υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα αυτό με τρεις διαφορετικές μεθόδους:

α) αναλυτικά, β) υπολογίζοντας ρητά το πολυώνυμο $P(x)$ και ολοκληρώνοντας το πολυώνυμο και, γ) εφαρμόζοντας τον κανόνα του Simpson.

α) Το ολοκλήρωμα υπολογίζεται εύκολα: $I = -\cos(\pi/2) + \cos(0) = 1$

β) Γράφουμε το πολυώνυμο ως $P(x) = Ax^2 + Bx + C$. Τα A , B και C θα είναι οι λύσεις του συστήματος:

$$\begin{aligned} C = f(0) &= 0 \\ A\pi^2/16 + B\pi/4 + C &= 1/\sqrt{2} \\ A\pi^2/4 + B\pi/2 + C &= 1 \end{aligned}$$

Επιλύοντας το σύστημα βρίσκουμε $A = -(8/\pi^2)(\sqrt{2}-1)$ και $B = (8/\pi)(1/\sqrt{2}-1/4)$. Αν αντικαταστήσουμε στο ολοκλήρωμα I το $\sin x$ με το πολυώνυμο $P(x)$ και ολοκληρώσουμε, βρίσκουμε:

$$I_{\text{πολ}} = \int_0^{\pi/2} P(x) \, dx = A \frac{\pi^3}{24} + B \frac{\pi^2}{8} = \frac{\pi}{4} \frac{2\sqrt{2}+1}{3} = 1.00228$$

γ) Υπολογίζουμε το I με τον κανόνα του Simpson:

$$\begin{aligned} I_{\text{Simpson}} &= \frac{1}{2} \frac{\pi}{2} \left[\frac{1}{3} \sin(0) + \frac{4}{3} \sin(\pi/4) + \frac{1}{3} \sin(\pi/2) \right] \\ &= \frac{\pi}{4} \left[\frac{4}{3\sqrt{2}} + \frac{1}{3} \right] = \frac{\pi}{4} \frac{2\sqrt{2}+1}{3} = 1.00228 \end{aligned}$$

βρίσκουμε δηλαδή το ίδιο αποτέλεσμα. Τι θα συνέβαινε αν, αντί να παίρναμε το πολυώνυμο που περνά από τα σημεία $(0, 0)$, $(\pi/4, 1/\sqrt{2})$ και $(\pi/2, 1)$, θεωρούσαμε ως πολυώνυμο το ανάπτυγμα του $\sin x$ γύρω από το σημείο 0 ως δεύτερη τάξη, δηλαδή $\sin x = x + \mathcal{O}(x^3)$; Τότε θα βρίσκαμε:

$$I_{\text{Taylor}} = \int_0^{\pi/2} x \, dx = \frac{\pi^2}{8} = 1.2337$$

Αυτό το αποτέλεσμα είναι βέβαια μικρότερης ακρίβειας από το προηγούμενο. Εδώ όμως, γνωρίζουμε το ακριβές αποτέλεσμα. Μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το πολυώνυμο $P(x)$ θα δίνει πάντοτε καλύτερο αποτέλεσμα από το ανάπτυγμα Taylor τάξης 2; Διαισθητικά θα απαντούσαμε θετικά, διότι το $P(x)$ 'περνά' όχι μόνο από το σημείο $x = 0$ (από το οποίο περνά και το ανάπτυγμα κατά Taylor) αλλά και από τα σημεία $x = m$ και $x = b$. Όμως, θα μπορούσαμε να προβλέψουμε ότι δεν αποκλείεται το σφάλμα που υπεισέρχεται από

τη προσέγγιση του πολυωνύμου να αντισταθμίζει την ικανότητά του να περνά από τα σημεία αυτά και το τελικό αποτέλεσμα να είναι χειρότερο. Το μόνο που μπορούμε να πούμε με σιγουριά είναι ότι, αν έχουμε να ολοκληρώσουμε μια συνάρτηση 2ου βαθμού, τόσο το $P(x)$ όσο και η ανάπτυξη κατά Taylor θα δώσουν τα ίδια αποτελέσματα.

Παράδειγμα:

Ας δοκιμάσουμε τώρα τη συνάρτηση $f(x) = \cos x$ για την οποία ξέρουμε βέβαια ότι η ανάπτυξή της γύρω από το $x = 0$ είναι $\cos x = 1 - x^2/2 + \mathcal{O}(x^4)$.
α) Το ακριβές αναλυτικό αποτέλεσμα είναι:

$$I = \int_0^{\pi/2} \cos x \, dx = \sin(\pi/2) = 1$$

β) Το πολυώνυμο $P(x) = Ax^2 + Bx + C$ δίνει για συντελεστές $A = (8/\pi^2)(\sqrt{2} - 1)$, $B = (2/\pi)(4\sqrt{2} - 3)$ και $C = 1$. Ολοκληρώνοντας παίρνουμε:

$$I_{\text{πολ}} = \int_0^{\pi/2} P(x) \, dx = A(\pi^3/24) + B(\pi^2/8) + C(\pi/2) = \quad (3.11)$$

$$(\pi/12)(1 + 2\sqrt{2}) = 1.00228$$

γ) Η μέθοδος Simpson δίνει άμεσα:

$$I_{\text{simpson}} = \frac{\pi}{4} \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} \right] = 1.00228$$

δ) Τέλος, αν αντικαταστήσουμε τη συνάρτηση με το ανάπτυγμά της γύρω από το $x = 0$ βρίσκουμε:

$$I_{\text{Taylor}} = \int_0^{\pi/2} \left(1 - \frac{x^2}{2} \right) dx = (\pi/2) \left(1 - \frac{\pi^2}{24} \right) = 0.9248$$

Το παράδειγμα αυτό δείχνει ότι, ακόμα και για μια συνάρτηση όπως το $\cos x$, το πολυώνυμο $P(x)$ δίνει καλύτερο αποτέλεσμα από ό,τι το ανάπτυγμα κατά Taylor. Βέβαια αυτό δεν αποτελεί απόδειξη, αλλά δείχνει ότι τα αντιπαραδείγματα δεν θα πρέπει να είναι τετριμμένα.

Μπορούμε να γενικεύσουμε τον κανόνα για N ενδιάμεσα σημεία (αντί ενός που είχαμε έως τώρα, αλλά προσοχή, γιατί το N πρέπει να είναι περιττός ώστε να ισχύει ο τύπος), εφαρμόζοντας τη μέθοδο σε κάθε ενδιάμεσο διάστημα:

$$\int_a^b f(x) \, dx = h \left(\frac{1}{3} f(a) + \frac{4}{3} (f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_N)) \right. \\ \left. + \frac{2}{3} (f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{N-1})) + \frac{1}{3} f(b) \right) \quad (3.12)$$

όπου τώρα $h = (b - a)/(N + 1)$

Είναι ευνόητο ότι μπορούμε να συνεχίσουμε με αυτήν την πορεία και να παράγουμε ανάλογους τύπους που είναι ακριβείς για πολυώνυμα τάξης ανώτερης του 2.

Τέλος, θα πρέπει να πούμε ότι η χρήση της μεθόδου Simpson μπορεί να γίνει όχι μόνο στο αρχικό ολοκλήρωμα αλλά και σ' αυτό που προκύπτει από έναν κατάλληλο μετασχηματισμό μεταβλητής. Το τελευταίο μπορεί να υπολογίζεται ακριβώς με τη μέθοδο ή να παρουσιάζει μικρότερο σφάλμα από την εφαρμογή της μεθόδου στο αρχικό ολοκλήρωμα. Μερικά παραδείγματα θα διευκρινίσουν το σημείο αυτό.

Παράδειγμα.

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin 3x \, dx$$

Η υπό ολοκλήρωση συνάρτηση δεν είναι πολυώνυμο του x οπότε ούτε η μέθοδος του τραπεζίου ούτε αυτή του Simpson εφαρμόζονται. Ωστόσο, μπορούμε να βρούμε μια αλλαγή μεταβλητών η οποία θα μας δώσει ένα ολοκλήρωμα τέτοιας μορφής ώστε τουλάχιστον μια από τις μεθόδους αυτές να δίνει ακριβές αποτέλεσμα.

α) $\sin 3x \, dx = -\frac{1}{3}d(\cos 3x)$. Οπότε, θέτοντας $u = \cos 3x$ παίρνουμε:

$$I = \frac{1}{3} \int_1^0 (-du) = \frac{1}{3} \int_0^1 du = \frac{1}{3}$$

Η σταθερή συνάρτηση μπορεί να ολοκληρωθεί δίνοντας ακριβές αποτέλεσμα και με τις δύο μεθόδους (τραπεζίου ή Simpson):

$$I = 1 \times \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] = \frac{1}{2} \times \left[\frac{1}{3} + \frac{4}{3} + \frac{1}{3} \right]$$

β) $\sin 3x = \sin(2x + x) = \sin 2x \cos x + \cos 2x \sin x = \sin x(4 \cos^2 x - 1)$

Το ολοκλήρωμα γράφεται, επομένως:

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\pi/2} \sin 3x \, dx = \int_0^{\pi/2} -(4 \cos^2 x - 1) d \cos x \\ &= \int_1^0 -(4u^2 - 1) du = \int_0^1 (4u^2 - 1) du \end{aligned}$$

όπου κάναμε αλλαγή την μεταβλητής $u = \cos x$. Τώρα το ολοκλήρωμα είναι ένα πολυώνυμο 2ου βαθμού και η μέθοδος του Simpson θα δώσει ακριβές αποτέλεσμα:

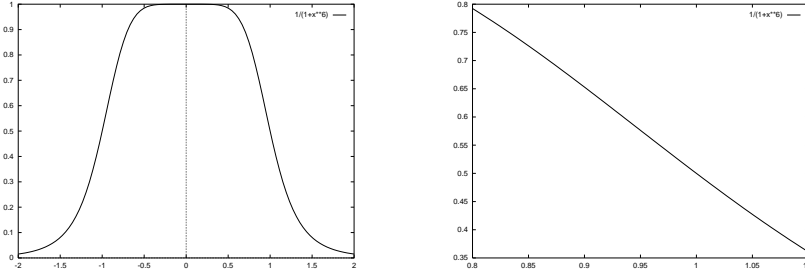
$$I = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{3}(-1) + \frac{4}{3}(0) + \frac{1}{3}(3) \right] = \frac{1}{3}$$

Παράδειγμα.

$$I = \int_{100}^{100+a} \frac{dx}{1+x^6}$$

με $0 < a \ll 100$. Εδώ μπορούμε να εφαρμόσουμε τη μέθοδο του τραπεζίου

$$\frac{1}{1+100^6} - \frac{1}{1+(100+a)^6} = \frac{6}{1+100^6} \frac{a}{100} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{a}{100}\right)^2\right)$$



Σχήμα 3.2: Η καμπύλη $f(x) = 1/(x^6 + 1)$. Στο σχήμα δεξιά βλέπουμε μια λεπτομέρεια της καμπύλης.

όπου χρησιμοποιήσαμε:

$$(1 + y)^n - 1 = ny + \mathcal{O}(y^2), \quad \frac{1}{1 + y} = 1 - y + \mathcal{O}(y^2)$$

Τα παραπάνω μας δείχνουν ότι η συνάρτηση $f(x) = 1/(1 + x^6)$ μπορεί να προσεγγιστεί από μια γραμμική συνάρτηση αν $x \gg 1$ και το εύρος του διαστήματος ολοκλήρωσης είναι $\ll x$ (δηλαδή το εύρος του διαστήματος μπορεί να είναι μεγαλύτερο του 1).

Αντίθετα, πολύ κοντά στο 0, τα πράγματα αλλάζουν. Εκεί η συνάρτηση έχει μέγιστο, $f(x) = 1 - x^6 + \mathcal{O}(x^{12})$, το οποίο δείχνει ότι κοντά στο 0 η συνάρτηση είναι περίπου σταθερή οπότε η μέθοδος του τραπεζίου ή του Simpson μπορούν να εφαρμοστούν με επιτυχία. Για μεγαλύτερες τιμές του x αρχίζουμε να 'αισθανόμαστε' την καμπύλωση. Περνάμε από ένα σημείο καμπής και στην περιοχή περίπου $[0.8, 1]$ η συνάρτηση μπορεί να προσεγγιστεί από μια γραμμική συνάρτηση. Για μεγαλύτερες τιμές του x αισθανόμαστε εκ νέου μια καμπύλωση και τέλος η καμπύλη πλατύνεται, όπως δείχνει το Σχ.(3.2).

Όσον αφορά την προσαρμογή αντίστοιχων αλγορίθμων τα πράγματα είναι απλά. Η μέθοδος του τραπεζίου απαιτεί τον υπολογισμό ενός αθροίσματος σ' όλα τα ενδιάμεσα σημεία με ίδιο συντελεστή (δηλαδή 1), ενώ η μέθοδος Simpson χρησιμοποιεί δύο συντελεστές (έναν για τα άρτια σημεία και άλλον για τα περιττά). Το πρόβλημα της ποιότητας της προσέγγισης δεν είναι καθόλου τετριμμένο, αλλά για μια διάσταση μπορούμε να το ελέγξουμε ικανοποιητικά. Επίσης, μπορούμε να πάρουμε ίδιο βήμα ολοκλήρωσης h για όλη την περιοχή ολοκλήρωσης. Για παραπάνω από μία διάσταση, χάνουμε αυτήν την πολυτέλεια και θα πρέπει να έχουμε πληροφορίες για τα διαστήματα όπου η συνάρτηση μεταβάλλεται γρήγορα ή να ακολουθήσουμε άλλες τεχνικές, όπως η πολυπλεγματική προσέγγιση ή μέθοδος *Monte Carlo*.

Τέλος, υπάρχει το θέμα των *ιδιζόντων σημείων*. Υπάρχουν δύο τύποι: τα ολοκληρώσιμα και τα μη ολοκληρώσιμα. Για τη δεύτερη περίπτωση δεν υπάρχει

κανένα αριθμητικό τέχνασμα. Όσον αφορά τον πρώτο τύπο, πάντοτε υπάρχει μια κατάλληλη αλλαγή μεταβλητής για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος.

Ένα κλασικό παράδειγμα είναι ο υπολογισμός της περιόδου κίνησης ενός υλικού σημείου σ' ένα δυναμικό:

$$T \equiv 2t(x_1 \rightarrow x_2) = 2\sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{E - V(x)}}$$

όπου $E = V(x_1) = V(x_2)$. Βλέπουμε αμέσως ότι δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο Simpson (ούτε αυτή του τραπεζίου) επειδή το ολοκλήρωμα απειρίζεται στα σημεία x_1 και x_2 . Ευτυχώς, γνωρίζουμε ότι αν τα σημεία αυτά δεν είναι ακρότατα του δυναμικού $V(x)$, το ολοκλήρωμα πρέπει να συγκλίνει, η περίοδος είναι πεπερασμένη. Αντίθετα, αρκεί ένα από τα σημεία να αποτελεί ακρότατο του $V(x)$ ώστε να κάνει το ολοκλήρωμα να αποκλίνει. Πιο συγκεκριμένα, αν το δυναμικό έχει πολυωνυμική μορφή μπορούμε να ακολουθήσουμε την παρακάτω διαδικασία:

$$E - V(x) \equiv \mathcal{P}(x) = (x - x_1)P(x) = (x_2 - x)Q(x)$$

όπου υποθέτουμε ότι $P(x_1) \neq 0$ και $Q(x_2) \neq 0$. Αν y είναι ένα σημείο του διαστήματος (x_1, x_2) με την ιδιότητα $P(y) \neq 0$ και $Q(y) \neq 0$, μπορούμε να γράψουμε:

$$T = 2\sqrt{\frac{m}{2}} \left(\int_{x_1}^y \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}} + \int_y^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}} \right) \quad (3.13)$$

Χρησιμοποιούμε τώρα το ανάπτυγμα $\mathcal{P}(x) = (x - x_1)P(x)$ στο πρώτο διάστημα $[x_1, y]$ και το $\mathcal{P}(x) = (x_2 - x)Q(x)$ για το δεύτερο $[y, x_2]$:

$$\int_{x_1}^y \frac{dx}{\sqrt{(x - x_1)P(x)}} = \int_{x_1}^y \frac{d[2\sqrt{x - x_1}]}{\sqrt{P(x)}} = \int_0^{2\sqrt{y - x_1}} \frac{du}{\sqrt{P(x_1 + \frac{u^2}{4})}} \quad (3.14)$$

και το τελευταίο ολοκλήρωμα δεν παρουσιάζει κανένα πρόβλημα. Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} \int_y^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{(x_2 - x)Q(x)}} &= \int_y^{x_2} \frac{d[-2\sqrt{x_2 - x}]}{\sqrt{Q(x)}} = \\ &= \int_{-2\sqrt{x_2 - y}}^0 \frac{dv}{\sqrt{Q(x_2 - \frac{v^2}{4})}} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Ένα ενδιαφέρον σημείο είναι ότι, αν μπορούμε να υπολογίσουμε αναλυτικά τα δύο παραπάνω ολοκλήρωματα, το τελικό αποτέλεσμα είναι ανεξάρτητο από την εκλογή του σημείου y . Αντίθετα, αν χρησιμοποιήσουμε μια προσεγγιστική μέθοδο, όπως για παράδειγμα του τραπεζίου ή τη Simpson, το αποτέλεσμα, γενικά, εξαρτάται από το σημείο y . Οπότε μπαίνει το ερώτημα αν μπορούμε να διαλέξουμε το σημείο y με τέτοιο τρόπο ώστε να ανακτήσουμε ορισμένες ιδιότητες που εκ των προτέρων γνωρίζουμε ότι υπάρχουν. Το επόμενο παράδειγμα θα διαλευκάνει το ζήτημα αυτό.

Παράδειγμα:

Ας υποθέσουμε ότι ένα σωματίο με μάζα m κινείται σε δυναμικό $V(x) = kx^2$ με ολική ενέργεια E . Θέλουμε να υπολογίσουμε την περίοδο της κίνησής του με τη μέθοδο του τραπέζιου.

Δείξτε ότι αν υπολογίσουμε την περίοδο αναλυτικά, το αποτέλεσμα δεν εξαρτάται από τη συνολική ενέργεια ούτε από το σημείο που θα διαλέξουμε να κόψουμε το ολοκλήρωμα.

Δείξτε επίσης ότι αν χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο του τραπέζιου, το αποτέλεσμα εξαρτάται από την ενέργεια καθώς και από το σημείο y , αλλά μπορούμε πάντοτε να διαλέξουμε το σημείο αυτό έτσι ώστε το αποτέλεσμα να μην εξαρτάται από την ενέργεια.

Συμπέρασμα

Η αριθμητική ολοκλήρωση περιέχει δύο ελεύθερες παραμέτρους: τον αριθμό των σημείων στα οποία υπολογίζουμε την υπό ολοκλήρωση συνάρτηση καθώς και το βάρος που βάζουμε σε κάθε σημείο. Στην απλή περίπτωση που εμπνέεται από τον κλασικό ορισμό της ολοκλήρωσης, η κατανομή των ενδιαμέσων σημείων είναι ομοιόμορφη και τα αντίστοιχα βάρη είναι 1. Στις μεθόδους του τραπέζιου και του Simpson η κατανομή παραμένει ομοιόμορφη αλλά το βάρος κάθε σημείου διαφέρει. Μπορεί κάποιος να αλλάξει επίσης την κατανομή των ενδιαμέσων σημείων, οπότε έχουμε και τις πιο εξελιγμένες αριθμητικές μεθόδους ολοκλήρωσης.

Στα συγκεκριμένα προβλήματα, η εκλογή των ενδιαμέσων σημείων δεν είναι πάντοτε αυθαίρετη. Θα πρέπει να γίνεται με τέτοιο τρόπο, ώστε το τελικό αποτέλεσμα να διατηρεί τις ποιοτικές ιδιότητες του 'ακριβούς αποτελέσματος' που ψάχνουμε.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Αριθμητική Λύση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων

Οι διαφορικές εξισώσεις παίζουν, από την εποχή του Newton, σημαντικό ρόλο στην περιγραφή της φύσης. Αλλά η διατύπωση μιας διαφορικής εξίσωσης από τη μια και η λύση της από την άλλη είναι δύο τελείως διαφορετικές ασκήσεις. Για πολλά χρόνια δεν είχαμε στη διάθεσή μας παρά μόνο αναλυτικά εργαλεία, γεγονός που περιόριζε σημαντικά το ερευνητικό πεδίο. Η ανακάλυψη των αριθμητικών μεθόδων απελευθέρωσε τη φυσική, τη χημεία, τη βιολογία κλπ., από τον περιορισμό της ανάπτυξης απλοποιημένων μοντέλων (προτύπων) στην προσπάθειά τους να περιγράψουν την πολυπλοκότητα των φυσικών φαινομένων. Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι η περιγραφή των ευρέως χρησιμοποιούμενων σήμερα μεθόδων για τη λύση συνήθων διαφορικών εξισώσεων που συναντάμε σε εφαρμογές της φυσικής (ή της χημείας ή της βιολογίας, όπου βρίσκουμε τις ίδιες εξισώσεις σ' ένα τελείως διαφορετικό πλαίσιο).

Θα παρουσιάσουμε τις μεθόδους αυτές σ' ένα πλαίσιο γενικό. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε την εξαρτημένη μεταβλητή x και t είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή. Ψάχνουμε να βρούμε λύση της εξίσωσης:

$$\frac{dx}{dt} = F(x(t), t) \quad (4.1)$$

με 'αρχικές' συνθήκες $x(0) = x_0$. Αν οι εξισώσεις είναι βαθμού ανώτερου του πρώτου (όπως είναι οι εξισώσεις της κίνησης στη Μηχανική), οδηγούμαστε σε σύστημα εξισώσεων, οπότε χρειαζόμαστε τη γραμμική άλγεβρα, κυρίως αν είμαστε σε χώρο με διαστάσεις μεγαλύτερες του 1. Για μία διάσταση δεν

έχουμε ανάγκη τέτοιων εργαλείων και απλά γράφουμε

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= \frac{1}{m}f(x(t), t)\end{aligned}\quad (4.2)$$

με αρχικές συνθήκες $x(0) = x_0$ και $v(0) = v_0$.

Η κεντρική ιδέα πίσω από τις αριθμητικές μεθόδους είναι η διακριτοποίηση του χρόνου (της ανεξάρτητης μεταβλητής) και η αντικατάσταση των παραγώγων από πεπερασμένες διαφορές:

$$\frac{dx}{dt} \rightarrow \frac{\Delta x}{\Delta t} \equiv \frac{x(t+h) - x(t)}{h}\quad (4.3)$$

4.1 ΟΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΤΟΥ EULER ΚΑΙ ΤΟΥ ΕΝΔΙΑΜΕΣΟΥ ΣΗΜΕΙΟΥ

Η παραπάνω διαδικασία οδηγεί αβίαστα στη μέθοδο του *Euler* που για μεν την Εξ. (4.2) γράφεται:

$$x(t+h) = x(t) + hF(x(t), t)\quad (4.4)$$

ενώ για τις Εξ. (4.3) έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned}x(t+h) &= x(t) + hv(t) \\ v(t+h) &= v(t) + hf(x(t), t)\end{aligned}\quad (4.5)$$

Παρατηρούμε αμέσως ότι αυτές οι εξισώσεις δεν αντιστοιχούν σε τίποτα άλλο παρά στον πρώτο όρο αναπτύγματος, ως προς το χρόνο, γύρω από το $t = 0$. Δηλαδή η ακρίβεια της μεθόδου είναι $\mathcal{O}(h^2)$. Μπορούμε λοιπόν να ρωτήσουμε πώς είναι δυνατόν να αυξήσουμε την ακρίβεια, ώστε το σφάλμα να είναι $\mathcal{O}(h^3)$ τουλάχιστον.

Αυτό επιτυγχάνεται ως ακολούθως:

$$\begin{aligned}x(t+h) &= x(t) + hv(t) + (h^2/2)f(x(t), t) + (h^3/6)f'(x(t), t) + \dots \\ x(t-h) &= x(t) - hv(t) + (h^2/2)f(x(t), t) - (h^3/6)f'(x(t), t) + \dots\end{aligned}\quad (4.6)$$

Πολύ εύκολα βλέπουμε ότι

$$x(t+h) = x(t-h) + 2hv(t) + \mathcal{O}(h^3)\quad (4.7)$$

δηλαδή στο $t = 0$ κάνουμε ένα βήμα πίσω για να υπολογίσουμε το $x(-h)$, χρησιμοποιώντας μια από τις άλλες μεθόδους, για παράδειγμα την καθιερωμένη μέθοδο του Euler, και έπειτα υπολογίζουμε τα $x(h)$, $x(3h)$, ... με τη νέα μέθοδο που ονομάζεται *μέθοδος του ενδιάμεσου σημείου*.

Παράδειγμα: Για την εξίσωση $x' = -x$ με αρχική συνθήκη $x(0) = 1$ και βήμα $h = 0.01$, στον Πίνακα 4.1 μπορούμε να συγκρίνουμε τη μέθοδο του Euler και τη μέθοδο του ενδιάμεσου σημείου. Στην περίπτωση μας $dx/dt = f(x(t), t) = -x(t)$, οπότε η μέθοδος του Euler δίνει:

$$x(t+h) = x(t) + hf(x(t), t) = x(t) + h(-x(t)) = x(t) - hx(t) = x(t)(1-h)$$

t	Euler	Ενδ.σημ.	Ακριβές αποτ.
1.00000×10^{-2}	0.990000	0.990000	0.990050
2.00000×10^{-2}	0.980100	0.980200	0.980199
3.00000×10^{-2}	0.970299	0.970396	0.970446
4.00000×10^{-2}	0.960596	0.960792	0.960789
5.00000×10^{-2}	0.950990	0.951180	0.951229
6.00000×10^{-2}	0.941480	0.941768	0.941765
7.00000×10^{-2}	0.932065	0.932345	0.932394
8.00000×10^{-2}	0.922745	0.923122	0.923116
9.00000×10^{-2}	0.913517	0.913882	0.913931
1.00000×10^{-1}	0.904382	0.904844	0.904837

Πίνακας 4.1: Σύγκριση της μεθόδου του Euler με αυτή του ενδιάμεσου σημείου

Στην περίπτωση της μεθόδου του ενδιάμεσου σημείου, βάζοντας βήμα h αντί $2h$, η Εξ.(;) γράφεται για την περίπτωσή μας:

$$\begin{aligned}
 x(t+h) &= x(t) + hf(x(t+h/2), t+h/2) \\
 &= x(t) + hf(x(t) + (h/2)f(x(t), t), t+h/2) \\
 &= x(t) + hf(x(t) + (h/2)(-x(t)), t+h/2) \\
 &= x(t) + h(-x(t) + (h/2)x(t)) = x(t)(1-h+h^2/2)
 \end{aligned}$$

όπου στη δεύτερη ισότητα αντικαταστήσαμε το όρισμα $x(t+h/2)$ της f με το ανάπτυγμά του, δηλαδή χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Euler: $x(t+h/2) = x(t) + (h/2)f(x(t), t)$, ενώ στην τρίτη και τέταρτη ισότητα χρησιμοποιήσαμε ότι $f(x) = -x$ στο συγκεκριμένο παράδειγμά μας.

Υπάρχει όμως και ένας άλλος, περισσότερο διαισθητικός, τρόπος εφαρμογής της μεθόδου του ενδιάμεσου σημείου. Θεωρώντας πάλι το διάστημα $[t, t+h]$, όπως κάναμε στο παραπάνω παράδειγμα, αντί του $[t-h, t+h]$, οι παρακάτω σχέσεις είναι ουσιαστικά ισοδύναμες με την Εξ.(;):

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(x(t), t) \\
 k_2 &= hf(x(t) + \frac{k_1}{2}, t + \frac{h}{2})
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

$$x(t+h) = x(t) + k_2$$

Η ιδέα είναι πως η μέθοδος του Euler θεωρεί ότι το βασικό σημείο στο διάστημα $[t, t+h]$ είναι το t : $f(x(t), t)$. Η μέθοδος του ενδιάμεσου σημείου θεωρεί ότι το βασικό σημείο του διαστήματος είναι το ενδιάμεσο: $f(x(t+h/2), t+h/2)$.

4.2 Η Μέθοδος Runge-Kutta

Είναι δυνατό να προχωρήσουμε ακόμα περισσότερο και να φτάσουμε σε σφάλμα της τάξης του $\mathcal{O}(h^5)$. Αυτή είναι η μέθοδος *Runge-Kutta* *τετάρτης τάξης*,

η οποία παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(x(t), t) \\
 k_2 &= hf(x(t) + k_1/2, t + h/2) \\
 k_3 &= hf(x(t) + k_2/2, t + h/2) \\
 k_4 &= hf(x(t) + k_3, t + h) \\
 x(t + h) &= x(t) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + \mathcal{O}(h^5)
 \end{aligned}
 \tag{4.9}$$

Σε προβλήματα μηχανικής, όπου η διαφορική εξίσωση είναι δεύτερου βαθμού, ορίζουμε την ταχύτητα $dx/dt = v$, και η διαφορική εξίσωση γίνεται $dv/dt = f(x(t), t)/m$. Σ' αυτήν την περίπτωση εφαρμόζουμε τις Εξ.(;) δύο φορές, μια για την ταχύτητα και μια για την επιτάχυνση.

Παράδειγμα: Αρμονικός ταλαντωτής. Θα ασχοληθούμε με συντομία με ένα κλασικό παράδειγμα: ένα οριζόντιο ελατήριο με μιά μάζα m στο ένα άκρο του. Η εξίσωση της κίνησης είναι:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \tag{4.10}$$

όπου x η απομάκρυνση από το σημείο ισορροπίας. Θέτουμε τις αρχικές συνθήκες $x(0)$ και $v(0) \equiv \frac{dx}{dt}|_{t=0}$ και μετατρέπουμε τη δεύτερου βαθμού εξίσωση σε σύστημα δύο εξισώσεων πρώτου βαθμού:

$$\begin{aligned}
 v &= \frac{dx}{dt} \\
 -\frac{k}{m}x &= \frac{dv}{dt}
 \end{aligned}
 \tag{4.11}$$

Η πρακτική ερώτηση που παρουσιάζεται τώρα είναι πώς μπορούμε να ελέγξουμε τις μεθόδους του Euler, του ενδιάμεσου σημείου ή Runge-Kutta σε συγκεκριμένα παραδείγματα. Μια πολύ ισχυρή μέθοδος είναι αυτή των νόμων διατήρησης. Με άλλα λόγια, στη μηχανική, όταν δεν έχουμε τριβές, η ολική ενέργεια διατηρείται. Μπορούμε λοιπόν να θέσουμε την ερώτηση κατά πόσον αυτές οι προσεγγιστικές μέθοδοι ικανοποιούν αυτήν τη διατήρηση. Ας το δούμε σε ένα παράδειγμα.

Παράδειγμα: Έστω η μάζα m , η οποία βρίσκεται στην άκρη ενός ελατηρίου σταθεράς k . Η εξισώσεις της κίνησης, όπως είπαμε και παραπάνω, είναι:

$$\begin{aligned}
 \frac{dx}{dt} &= v \\
 \frac{dv}{dt} &= -\frac{k}{m}x
 \end{aligned}
 \tag{4.12}$$

οι οποίες και διατηρούν την ολική ενέργεια $E = mv^2/2 + kx^2/2$. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Euler, οι εξισώσεις γράφονται:

$$\begin{aligned}
 x_{n+1} &= x_n + v_n h \\
 v_{n+1} &= v_n + (-(k/m)x_n) h
 \end{aligned}
 \tag{4.13}$$

και η ολική ενέργεια γράφεται αμέσως:

$$E_{n+1} = mv_{n+1}^2/2 + kx_{n+1}^2/2 = (1 + \delta)E_n$$

όπου $\delta = h^2k/m$. Μπορούμε εύκολα να γράψουμε την E_{n+1} συναρτήσει της E_0 :

$$E_{n+1} = (1 + \delta)^n E_0 = (1 + n\delta + \mathcal{O}(n^2\delta^2)) E_0$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι η μέθοδος του Euler δεν διατηρεί την ενέργεια, αλλά η διαφορά για κάθε βήμα μπορεί να θεωρηθεί «μικρή» αφού είναι της ίδιας τάξης με το σφάλμα της μεθόδου, $\mathcal{O}(h^2)$. Όμως, το σφάλμα είναι προσθετικό, και μετά από n βήματα γίνεται $n\delta$, δηλαδή πρώτης τάξης στο δ . Αν το $n\delta$ γίνει συγκρίσιμο με τη μονάδα, η προσεγγιστική μέθοδός μας δεν έχει πια έννοια. Συμπέρασμα: το σφάλμα, όντας προσθετικό, θέτει όριο στον αριθμό των βημάτων που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε στη μέθοδο του Euler:

$$n_{max} = 1/\delta = \frac{m}{h^2k}$$

Βλέπουμε ότι ο μέγιστος αριθμός των βημάτων είναι ανάλογος της μάζας και αντιστρόφως ανάλογος της σταθεράς του ελατηρίου και του βήματος. Παρατηρούμε επίσης ότι η ποσότητα $n_{max}h$ έχει διαστάσεις χρόνου και επειδή η περίοδος είναι ανάλογη με το $\sqrt{m/k}$, μας ενδιαφέρει το $n_{max}h$ να είναι τουλάχιστον όσο η περίοδος. Οι συνθήκες αυτές θέτουν κάθε άλλο παρά τετριμμένους περιορισμούς στην εκλογή του h , με δεδομένες τις σταθερές του προβλήματος m και k .

Συμπέρασμα

Παραπάνω παρουσιάσαμε τα κυριότερα και άμεσης χρήσης σημεία της αριθμητικής επίλυσης συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Ένα πολύ σοβαρό πρακτικό πρόβλημα είναι η εκλογή του βέλτιστου βήματος h και της μεταβολής του: πιο συγκεκριμένα, στις περισσότερες εφαρμογές πρέπει να μεταβάλλουμε το βήμα το οποίο θα πρέπει να είναι μικρό όταν, για παράδειγμα, οι δυνάμεις μεταβάλλονται γρήγορα με το χρόνο και μεγαλύτερο όταν η μεταβολή τους είναι αργή. Μπορούμε επίσης να «συντονίσουμε» την εκλογή του βήματος με την ταχύτητα. Παρόλα αυτά, με τις τεχνικές που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο αυτό μπορούμε να λύσουμε όλα τα προβλήματα κλασικής μηχανικής με ένα βαθμό ελευθερίας και αυτό δεν είναι λίγο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Πίνακες και εφαρμογές τους

Οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές συναντούν πολλές δυσκολίες στην επεξεργασία πινάκων και μόνο πρόσφατα, με την εισαγωγή της FORTRAN90, οι διαδικασίες με πίνακες και διανύσματα μπορούν να εκτελεστούν με σοβαρές επιδόσεις. Θα ξεκινήσουμε με φυσικά προβλήματα που περιγράφονται από περισσότερους από ένα βαθμούς ελευθερίας οι οποίοι και αλληλεπιδρούν. Θα εξετάσουμε δύο αντιπροσωπευτικά παραδείγματα: τη λύση ενός γραμμικού συστήματος και τον υπολογισμό των ιδιοτιμών ενός πίνακα.

5.1 Λύση Γραμμικού Συστήματος Εξισώσεων

Ένα συχνό μαθηματικό πρόβλημα που συναντάμε είναι η λύση ενός γραμμικού συστήματος εξισώσεων, δηλαδή

$$A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (5.1)$$

όπου $A \equiv A_{ij}$ είναι ένας $n \times n$ πίνακας, \mathbf{x} είναι ένα άγνωστο διάνυσμα και \mathbf{b} γνωστό διάνυσμα. Ο σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε τις συνιστώσες του \mathbf{x} . Όπως είναι γνωστό, το πρόβλημα έχει λύση αν, και μόνον αν, $\det A \neq 0$, και η λύση γράφεται συμβολικά

$$\mathbf{x} = A^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (5.2)$$

Η ανησυχία έγκειται στο γεγονός ότι ο υπολογισμός του αντίστροφου ενός πίνακα είναι μια διαδικασία με κόστος και πολύ επιρρεπής σε αριθμητικές αστάθειες. Θα αναφέρουμε εδώ δύο μεθόδους οι οποίες οδηγούν στη λύση της Εξ.(5.1) μ' ένα τρόπο σταθερό: είναι η μέθοδος Gauss-Jordan και η μέθοδος LU.

5.2 Η Μέθοδος Gauss-Jordan

Η βασική ιδέα αυτής της μεθόδου είναι η αναγωγή του πίνακα A σε τριγωνικό και ακολούθως ο υπολογισμός των συνιστωσών x_i . Ο λόγος είναι γιατί αν ο A είναι τριγωνικός

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

βρίσκουμε αμέσως ότι

$$x_n = b_n / a_{nn} \quad (5.4)$$

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n) / a_{n-1,n-1} \quad (5.5)$$

ή γενικά

$$x_{n-k} = \left(b_{n-k} - \sum_{l=n-k+1}^n a_{n-k,l}x_l \right) / a_{n-k,n-k}, \quad k = 1, \dots, n-1 \quad (5.6)$$

Το όλο πρόβλημα ανάγεται λοιπόν στο μετασχηματισμό του πίνακα A σε τριγωνική μορφή. Ακολουθούμε τον παρακάτω τρόπο:

1. Αντικαθιστούμε την τελευταία εξίσωση που περιγράφει η (5.1) με ένα γραμμικό συνδυασμό της ίδιας και της πρώτης εξίσωσης, κατάλληλο ώστε το στοιχείο a_{n1} να μηδενιστεί. Δηλαδή, πολλαπλασιάζουμε τη γραμμή (a_{11}, \dots, a_{1n}) με $-a_{n1}/a_{11}$ και αντικαθιστούμε τη γραμμή $(a_{n1}, a_{n2}, \dots, a_{nj}, \dots, a_{nn})$ με την

$$\left(0, a_{n2} - a_{12} \frac{a_{n1}}{a_{11}}, \dots, a_{nj} - a_{1j} \frac{a_{n1}}{a_{11}}, \dots, a_{nn} - a_{1n} \frac{a_{n1}}{a_{11}} \right)$$

Βέβαια αντικαθιστούμε το b_n με το $b_n - b_1 \left(\frac{a_{n1}}{a_{11}} \right)$.

2. Συνεχίζουμε με αυτόν τον τρόπο και μηδενίζουμε τα στοιχεία της πρώτης στήλης του πίνακα, εκτός βέβαια του a_{11} , καταλήγοντας στον πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ 0 & a_{32} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{k2} & \dots & a_{kn} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τα ίδια σύμβολα για τα στοιχεία των γραμμών $2, \dots, n$.

3. Συνεχίζουμε με ανάλογο τρόπο στο μηδενισμό των στοιχείων $a_{n2}, a_{n-1,2}, \dots, a_{32}$. Θεωρούμε τον πίνακα

$$\begin{pmatrix} a_{22} & \dots & a_{2n} \\ a_{32} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{k2} & \dots & a_{kn} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

πολλαπλασιάζουμε τα στοιχεία (a_{22}, \dots, a_{2n}) με $-a_{n2}/a_{22}$ και αντικαθιστούμε την τελευταία γραμμή με το αποτέλεσμα το οποίο έχει $a_{32} = \dots = a_{n2} = 0$.

4. Είναι εύκολο πλέον να πεισθούμε ότι στο τέλος του m βήματος, θα έχουμε μηδενίσει τα στοιχεία $a_{n1}, a_{n-1,1}, \dots, a_{21}; a_{n2}, a_{n-1,2}, \dots, a_{32}; \dots, a_{n,m-1}, \dots, a_{n-1,m-1}, \dots, a_{n,m-1}$. Στο τέλος του $n-1$ βήματος ο πίνακας θα είναι τριγωνικός.

Παράδειγμα:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Πολλαπλασιάζουμε την πρώτη γραμμή επί 1 και αντικαθιστούμε την τρίτη με $(0, 3, 2)$. Βρίσκουμε

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Τώρα, πολλαπλασιάζουμε την πρώτη γραμμή επί 1 και την αφαιρούμε από τη δεύτερη (για να απαλείψουμε το a_{21}). Το σύστημα γίνεται

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Πολλαπλασιάζουμε τη δεύτερη γραμμή επί 3 και την αφαιρούμε από την τρίτη, για να απαλείψουμε το a_{32} , και τελειώσαμε. Παίρνουμε

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

και βρίσκουμε άμεσα ότι $z = 1/2$, $y = -1$ και $x = 5/2$. Αντικαθιστώντας τις τιμές αυτές στο αρχικό σύστημα της Εξ.(5.9), επαληθεύουμε την ορθότητα της λύσης.

Έχουμε ήδη παρατηρήσει τη σπουδαιότητα που παίζουν οι διαγώνιοι όροι a_{nn} , καθώς διαιρούμε με αυτούς. Οπότε, η ερώτηση είναι άμεση: τι γίνεται αν ένας οι περισσότεροι από αυτούς είναι μηδενικοί; Η ιδέα είναι ότι αν το σύστημα δεν είναι ιδιάζον, είναι δυνατό, με εναλλαγές των εξισώσεων ή/και των αγνώστων, να καταλήξουμε σε τριγωνικό πίνακα με διαγώνια στοιχεία μη μηδενικά. Πράγματι, το σύστημα δεν αλλάζει αν εναλλάξουμε δύο εξισώσεις. Αντίθετα, αν εναλλάξουμε δύο στήλες, οι μεταβλητές μπερδεύονται. Όμως αυτό το μπέρδεμα αντιστοιχεί σε γραμμικό μετασχηματισμό. Ο τελικός σκοπός της διαδικασίας αυτής είναι κάθε διαγώνιο στοιχείο να έχει τη μεγαλύτερη απόλυτη τιμή από όλα τα στοιχεία της αντίστοιχης γραμμής και στήλης. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται *περιστροφή* και το διαγώνιο στοιχείο *περιστροφέας*. Θα χρησιμοποιήσουμε τη *μερική περιστροφή* που είναι απλούστερη σε εφαρμογή και ικανή να κρατήσει την όλη διαδικασία σταθερή. Μ' αυτή τη διαδικασία, εναλλάσσουμε τις εξισώσεις ώστε κάθε διαγώνιο στοιχείο να έχει τη μεγαλύτερη απόλυτη τιμή στην αντίστοιχη στήλη (ενώ η πλήρης περιστροφή απαιτεί τη μεγαλύτερη απόλυτη τιμή και στην αντίστοιχη γραμμή). Ένα παράδειγμα θα μας διαφωτίσει.

Παράδειγμα:

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Βρίσκουμε

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -5 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \\ -5 \end{pmatrix}$$

Βλέπουμε ότι $a_{22} = 0$. Αλλά μπορούμε να εναλλάξουμε τις γραμμές 2 και 3 χωρίς να αλλάξουμε τους αγνώστους. Οπότε καταλήγουμε

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & 4 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -5 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Γενικά, θα πρέπει να ελέγχουμε την απόλυτη τιμή $|a_{mm}|$. Αν $|a_{mm}| < \epsilon$, θα πρέπει να εναλλάξουμε τη γραμμή m με τη γραμμή j , όπου $|a_{jm}| = \max_{i=1, \dots, n} \{|a_{im}|\}$. Βέβαια θα πρέπει $b_m \rightarrow b_j$.

5.3 Η Μέθοδος LU

Η μέθοδος αυτή στηρίζεται επίσης στην ιδέα της επίλυσης ενός συστήματος μετατρέποντας τον αντίστοιχο πίνακα σε τριγωνικό. Η ιδέα έγκειται στην

παραγοντοποίηση του αρχικού πίνακα σε γινόμενο δύο πινάκων: ενός κάτω-τριγωνικού (Lower-triangular), δηλαδή $a_{ij} = 0$ για $j > i$ και ενός άνω-τριγωνικού (Upper-triangular), δηλαδή $a_{ij} = 0$ για $j < i$.

$$A \cdot x = (L \cdot U) \cdot x = L \cdot (U \cdot x) = b \quad (5.11)$$

και αν θέσουμε $y = U \cdot x$ μπορούμε να υπολογίσουμε τις συνιστώσες του y άμεσα, με αντικατάσταση, και ύστερα τις συνιστώσες του x . Πώς βρίσκουμε λοιπόν τους πίνακες L και U ; Ας πάρουμε το παράδειγμα ενός πίνακα 4×4 .

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

Καταλαβαίνουμε ότι η Εξ. (5.12) αποτελεί ένα σύστημα n^2 εξισώσεων (όσα και τα στοιχεία του πίνακα A) με $n^2 + n$ αγνώστους (τις μεταβλητές l_{ij} και u_{ij}). Δηλαδή, μπορούμε να θέσουμε n συνθήκες. Για να απλοποιήσουμε τα πράγματα διαλέγουμε

$$l_{ii} = 1, \quad i = 1, \dots, n$$

και μπορούμε να υπολογίσουμε τα υπόλοιπα στοιχεία με τον αλγόριθμο του *Crout*:

Για κάθε $j = 1, 2, 3, \dots, n$

- Για $i = 1, 2, \dots, j$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$$

(το άθροισμα είναι 0 για $i = 1$).

- Για $i = j + 1, \dots, n$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right)$$

Παράδειγμα:

Θα λύσουμε το προηγούμενο παράδειγμα με τη μέθοδο LU

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Θέτουμε $l_{11} = l_{22} = l_{33} = 1$.

$$j = 1$$

$$i = 1, \quad u_{11} = a_{11} = 1$$

$$i = 2, \quad l_{21} = \frac{1}{u_{11}} a_{21} = 1$$

$$i = 3, \quad l_{31} = \frac{1}{u_{11}} a_{31} = 1$$

$$j = 2$$

$$i = 1, \quad u_{12} = a_{12} = 2$$

$$i = 2, \quad u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 1 - 1 \times 2 = -1$$

$$i = 3, \quad l_{32} = \frac{1}{-1}(a_{32} - l_{31}u_{12}) = -(-3) = +3$$

$$j = 3$$

$$i = 1, \quad u_{13} = a_{13} = 1$$

$$i = 2, \quad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = 1 - 1 \times 1 = 0$$

$$i = 3, \quad u_{33} = a_{33} - (l_{31}u_{13} + l_{32}l_{23}) = -1 - (1 \times 1 + 3 \times 0) = -2$$

Επομένως, οδηγούμαστε στα παρακάτω συστήματα:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

και βρίσκουμε $x' = 1, y' = 1, z' = 1$ και $x = 5/2, y = -1, z = 1/2$.

Ένα μαθηματικό ερώτημα παραμένει αναπάντητο όμως: ποιες είναι οι συνθήκες, αναγκαίες και ικανές, που επιτρέπουν την παραγοντοποίηση ενός πίνακα 4×4 σε γινόμενο $L \cdot U$; Είναι δυνατό να αποδειχτεί ότι αρκεί όλοι οι ελάσσονες του A να είναι μη μηδενικοί. Αλλά είναι δυνατό να έχουμε ένα μη ιδιάζον σύστημα με κάποιον ελάσσονα μηδενικό. Η απάντηση είναι ότι μπορούμε να παραγοντοποιήσουμε στη μορφή $L \cdot U$ όχι τον A αλλά τον πίνακα όπου έχουμε εναλλάξει τις γραμμές του. Είναι και πάλι μια περιστροφή στον αλγόριθμο του Crout. Η ιδέα προέρχεται από το δεύτερο βήμα του αλγορίθμου αυτού. Αντιλαμβανόμαστε ότι μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμητή και τον παρονομαστή ανεξάρτητα. Αφού υπολογίσουμε τους αριθμητές, τότε μπορούμε να αποφασίσουμε. Επομένως διαλέγουμε, το μεγαλύτερο από τα στοιχεία u της στήλης j , εναλλάσσουμε τη γραμμή j με τη γραμμή i_{max} και διαιρούμε μόνο τα στοιχεία του δεύτερου βήματος με τα καινούργια u_{jj} . Ο λόγος που ένα τέτοιο τέχνασμα επιτυγχάνει είναι ότι δεν χρειάζεται να αποθηκεύουμε στη μνήμη τρεις πίνακες $n \times n$ (τους πίνακες A, L και U) αλλά

τους αντικαθιστούμε «επί τόπου», επειδή κάθε στοιχείο a_{ij} δεν χρησιμοποιείται παρά μόνο μια φορά.

5.4 Υπολογισμός Ορίζουσας

Ένα πολύ ενδιαφέρον μέγεθος, τόσο από μαθηματική σκοπιά όσο και από τη σκοπιά της φυσικής, είναι η ορίζουσα ενός πίνακα. Η έννοιά της στη φυσική είναι αυτή του «όγκου» –σε δύο διαστάσεις αντιστοιχεί σε (προσανατολισμένη) «επιφάνεια». Στη γραμμική άλγεβρα μαθαίνουμε ότι η ορίζουσα αποτελεί τμήμα των «αναλλοίωτων» ποσοτήτων –ποσότητες οι οποίες δεν αλλάζουν τιμή σε μετασχηματισμούς ομοιότητας, $A \rightarrow SAS^{-1}$. Μαθαίνουμε επίσης πώς να υπολογίζουμε την ορίζουσα (αναλύοντάς την σε ελάχιστονες ορίζουσες). Στη γενική περίπτωση, αυτή η ανάλυση χρειάζεται $\mathcal{O}(n^3)$ επιμέρους υπολογισμούς, αλλά απαιτούνται μόνο $\mathcal{O}(n)$ υπολογισμοί για την περίπτωση που ο πίνακας είναι τριγωνικός –γιατί γνωρίζουμε ότι η ορίζουσα τριγωνικού πίνακα είναι ίση με το γινόμενο των διαγωνίων όρων. Παίρνοντας υπόψη ότι τόσο η μέθοδος Gauss-Jordan όσο και η μέθοδος LU μετασχηματίζουν τον αρχικό πίνακα σε τριγωνικό, καταλαβαίνουμε πόσο εύκολος είναι ο υπολογισμός μιας ορίζουσας. Αλλά απαιτείται προσοχή. Γνωρίζουμε ότι το πρόσημο μιας ορίζουσας αλλάζει με την εναλλαγή δύο γραμμών ή δύο στηλών. Απαιτείται λοιπόν η ύπαρξη μιας βοηθητικής μεταβλητής η οποία θα αλλάζει πρόσημο σε κάθε εναλλαγή γραμμών κατά τη διάρκεια της περιστροφής. Αυτή η μεταβλητή θα δίνει και το τελειωτικό πρόσημο στην ορίζουσα

$$\det A = \text{ομοτιμία} \times \prod_{k=1}^n a_{kk}$$

Ποια είναι τα σημαντικά σημεία; Το γινόμενο μπορεί να γίνει πολύ μεγάλο ή πολύ μικρό (σε απόλυτη τιμή) –επομένως θα πρέπει να αθροίσουμε λογαρίθμους. Αλλά θα πρέπει επίσης να βλέπουμε και από τη σκοπιά της φυσικής. Δηλαδή, αν μία (ή περισσότερες) ιδιοτιμές τείνουν στο μηδέν (οπότε η ορίζουσα τείνει επίσης στο μηδέν), είναι σημάδι ότι ίσως υπάρχει μια «ψευδοσυμμετρία», την οποία αξίζει να μελετήσουμε.

1η ΑΣΚΗΣΗ

ΣΧΕΔΙΑΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΓΡΑΜΜΩΝ

1. Πληκτρολογήστε τον κώδικα FORTRAN για τη σχεδίαση των δυναμικών γραμμών. Η πρώτη γραμμή του προγράμματός σας θα είναι PROGRAM ONOMA.ΕΡΙΤΗΤΟ.
2. Απενεργοποιήστε την εντολή που 'γράφει' τα αποτελέσματα σε αρχείο και ενεργοποιήστε αυτήν που 'γράφει' τα αποτελέσματα στην οθόνη.
3. Εκτελέστε τις εντολές compile, built exe και execute για το πρόγραμμά σας.
4. Επιλέξτε ένα (1) φορτίο και δώστε τη τιμή του (σε μορφή πραγματικού αριθμού για παράδειγμα 1.0) και τη θέση του. Για την τελευταία επιλέξτε (0.0,0.0). Επιλέξτε σχεδίαση δυναμικής γραμμής και ως αρχικό σημείο το (0.06,0.06)
Πώς περιμένετε τα αποτελέσματα;
5. Επαναλάβετε τα βήματα 3 και 4 αφού ενεργοποιήσετε την εντολή που 'γράφει' τα αποτελέσματα σε αρχείο (και απενεργοποιήστε την άλλη εντολή), για τη δυναμική γραμμή του προηγούμενου βήματος καθώς και για μια ισοδυναμική γραμμή που ξεκινά από το σημείο (5.0,0.0).
6. Ανοίξτε το MATLAB και ακολουθώντας τις οδηγίες που σας έχουν δοθεί, σχεδιάστε τα δεδομένα του αρχείου που παρήγαγε το πρόγραμμα FORTRAN.
7. Επαναλάβετε όλα τα αναγκαία βήματα για τη σχεδίαση μιας δυναμικής και μιας ισοδυναμικής γραμμής σε σύστημα δύο φορτίων με τιμές -1.0 και 1.0 στις θέσεις (-10.0,0.0) και (10.0,0.0) αντίστοιχα. Η δυναμική γραμμή να ξεκινά από το σημείο (10.0,0.06) ενώ η ισοδυναμική από το σημείο (10.0,0.0).
8. Επαναλάβετε όλα τα αναγκαία βήματα για τη σχεδίαση μιας πλήρους εικόνας για τα δύο φορτία του προηγούμενου βήματος. Επιλέξτε τα σημεία:

Για δυναμικές γραμμές	Για ισοδυναμικές γραμμές
(10.00, 0.06)	(12.0, 0.0)
(9.94, 0.06)	(15.0, 0.0)
(9.94, 0.0)	(17.0, 0.0)
(9.94, -0.06)	(-12.0, 0.0)
(10.0, -0.06)	(-15.0, 0.0)
(10.06, -0.06)	(-17.0, 0.0)
(10.06, 0.0)	
(10.06, 0.06)	
(-20.0, 12.0)	
(-20.0, -12.0)	

2η ΑΣΚΗΣΗ

ΕΥΡΕΣΗ ΡΙΖΩΝ ΜΙΑΣ ΕΙΣΩΣΗΣ

1. Πληκτρολογήστε τον κώδικα FORTRAN για τη μέθοδο της διχοτομίας, ακολουθώντας το λογικό διάγραμμα που δίνεται. Η συνάρτηση θα ορίζεται από το ακόλουθο τμήμα του κώδικα που γράφεται μετά το τέλος του κυρίου προγράμματος:

```
REAL FUNCTION F(X)
```

```
IMPLICIT NONE
```

```
REAL X
```

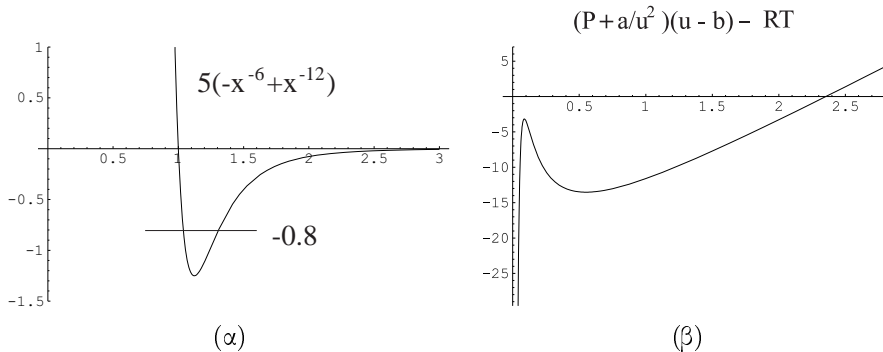
```
F=...
```

```
RETURN
```

```
END
```

2. Τρέξτε το πρόγραμμα για τις περιπτώσεις α) $x^2 - 5x + 6$ και β) $2x^4 - 4x^2 - 16$. Γράψτε το διάστημα που επιλέγετε, και τη λύση που βρίσκεται για δύο περιπτώσεις ακρίβειας: $E = 0.01$ και 0.001 .

3. Θεωρείστε ότι το δυναμικό μεταξύ δύο ατόμων που συνιστούν ένα μόριο δίνεται από τη συνάρτηση $V(r) = 5(r^{-6} + r^{-12})$ όπου r είναι η απόσταση μεταξύ των ατόμων. Βρείτε τα όρια αυτής της απόστασης, αν η συνολική ενέργεια του μορίου είναι $E = -0.8$, με ακρίβεια $E = 0.001$. Γράψτε το διάστημα που επιλέγετε και τις επαναλήψεις που χρειαστήκατε.



Σχήμα 1: (α) Η συνάρτηση για το δυναμικό του μορίου και (β) για την εξίσωση Van der Waals

4. Η εξίσωση Van der Waals αποτελεί μια φαινομενολογική γενίκευση της γνωστής καταστατικής εξίσωσης των αερίων για τα πραγματικά αέρια:

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT$$

όπου P η πίεση (σε atm), v ο γραμμομοριακός όγκος V/n (σε L/mole), T η θερμοκρασία (σε K) και $R = 0.082054 \text{ L atm/(mole K)}$. Τα a και b είναι πειραματικές σταθερές ειδικές για κάθε αέριο. Για το CO_2 είναι $a = 3.592$ και $b = 0.04267$. Βρείτε το γραμμομοριακό όγκο για αυτό το αέριο και για $P = 10 \text{ atm}$ και $T = 300 \text{ K}$ με ακρίβεια $E = .0001$. Συγκρίνετε με την εξίσωση των τελίων αερίων $Pv = Rt$.

5. Λύση της εξίσωσης Schrödinger για σωματίδιο μάζας m σε πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού βάθους V_0 που εκτείνεται από $-b$ έως b (μία διάσταση). Στο χώρο $|x| < b$ έχουμε να λύσουμε την εξίσωση:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu$$

η οποία δέχεται λύση της μορφής:

$$u(x) = A \sin(ax) + B \cos(ax), \quad a = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Στο χώρο $|x| > b$ έχουμε να λύσουμε την εξίσωση:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dx^2} = (E - V_0)u$$

η οποία δέχεται λύση της μορφής:

$$u_N(x) = C e^{-a_N x} + D e^{a_N x}, \quad a_N = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

(μας ενδιαφέρει η περίπτωση $E < V_0$, δηλαδή δέσμες καταστάσεις).

Επειδή απαιτούμε $u(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$, θα πρέπει για $x > b$ να ισχύει $D = 0$ ενώ για $x < -b$ να ισχύει $C = 0$. Απαιτώντας επίσης οι συναρτήσεις και οι παράγωγοί τους να είναι ίσες στα όρια $\pm b$:

$$u_N(b) = u(b), \quad u'_N(b) = u'(b), \quad u_N(-b) = u(-b), \quad u'_N(-b) = u'(-b)$$

καταλήγουμε στις παρακάτω περιπτώσεις:

$$A = 0, \quad C = D, \quad a \tan(ba) = a_N \quad \text{ή} \quad B = 0, \quad C = -D, \quad a \cot(ba) = -a_N$$

Αντικαθιστώντας στην πρώτη την τιμή του a παίρνουμε την εξίσωση:

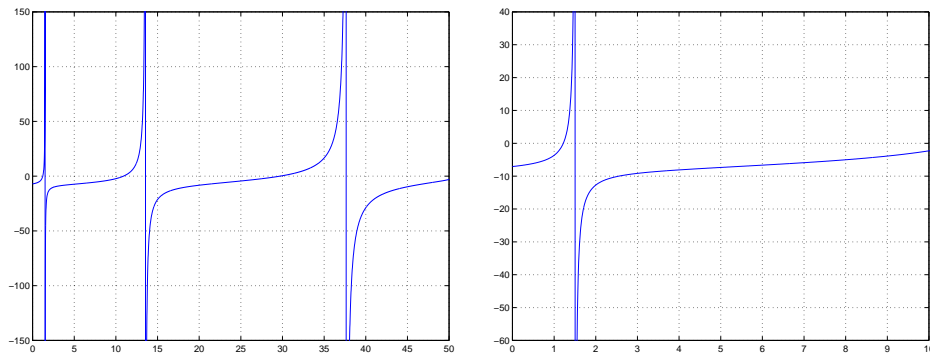
$$\sqrt{E} \tan\left(\frac{b\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E}\right) = \sqrt{V_0 - E}$$

Χρησιμοποιώντας τις τιμές $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}$, $m = m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ και $b = 10^{-9} \text{ m}$ και μετρώντας την ενέργεια σε μονάδες 10^{-14} J , μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση στη μορφή:

$$\sqrt{E} \tan(1.28\sqrt{E}) = \sqrt{V_0 - E}$$

όπου το V_0 μετριέται βέβαια σε μονάδες 10^{-14} J .

Βρείτε τις ενεργειακές στάθμες για $V_0 = 50$ με ακρίβεια $E = 0.001$.



6. Πληκτρολογήστε τον κώδικα για τη μέθοδο Newton-Rahpson και επαναλάβετε τα παραπάνω βήματα συγκρίνοντας με τη μέθοδο της διχοτομίας.

3η ΑΣΚΗΣΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ

1. Πληκτρολογήστε τον κώδικα FORTRAN για ολοκλήρωση χρησιμοποιώντας και τις τρεις μεθόδους: ορθογωνίων, τραπεζίων και Simpson. Το κυρίως πρόγραμμα θα ζητά το αρχικό (A) και τελικό (B) σημείο της ολοκλήρωσης καθώς και τον αριθμό των σημείων (N). Οι τρεις μέθοδοι θα καλούνται από αντίστοιχα υποπρογράμματα (subroutine). Τα ορίσματα της κάθε subroutine θα είναι τα δύο άκρα ολοκλήρωσης, ο αριθμός των σημείων και το αποτέλεσμα (SUM) της ολοκλήρωσης. Στη μέθοδο των ορθογωνίων να χρησιμοποιήσετε το ενδιάμεσο σημείο: $X_1 = A + H/2$, $X_2 = A + 3*H/3$, $X_3 = A + 5*H/2$, ..., $X_N = A + (2*N - 1)*H/2 = B - H/2$ όπου $H = (B - A)/N$. Στο τέλος του κυρίως προγράμματος θα τυπώνεται το αρχικό και τελικό σημείο της ολοκλήρωσης, ο αριθμός των σημείων και τέλος η μέθοδος και το αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης.

Εφαρμόστε τα παραπάνω για τα ακόλουθα ολοκληρώματα:

$$\int_0^{2\pi} \sin(x) dx, \quad \int_1^3 (5x^2 + 3x - 2) dx, \quad \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx, \quad \int_0^1 \ln(x) dx$$

και για $N = 500, 1000$ και 5000 . Για το τελευταίο ολοκλήρωμα επιλέξτε για κάτω όριο έναν μικρό αριθμό (π.χ. 10^{-5}), διότι $\ln(0)$ δεν ορίζεται. Ελέγξτε το αποτέλεσμα για διάφορες μικρές τιμές του κάτω ορίου.

2. Αφού ελέγξετε τη σωστή λειτουργία του προγράμματος, δοκιμάστε το φυσικό πρόβλημα που αναφέραμε στο μάθημα (χρησιμοποιήστε τη μέθοδο Simpson):

$$\Delta T = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{X_1}^{X_2} \frac{dx}{\sqrt{E - V(X)}}$$

όπου $V(X) = \frac{1}{2}kX^2$. Θεωρήστε ότι η ενέργεια του αρμονικού ταλαντωτή είναι $E = 9$, ότι $m = 2$ και $k = 2$. Δοκιμάστε για διάφορες τιμές διαμέρισης του ολοκληρώματος (500, 1000, 1500) καθώς και για διάφορες τιμές του σημείου Y (-1, 0, 1) όπου 'κόβεται' το ολοκλήρωμα. Καταγράψτε τα αποτελέσματά σας.

Υπενθυμίζουμε ότι το παραπάνω ολοκλήρωμα γράφεται ως:

$$\Delta T = 2\sqrt{\frac{m}{2}} \left(\int_0^{2\sqrt{Y-X_1}} \frac{du}{\sqrt{P(X_1 + \frac{u^2}{4})}} + \int_{-2\sqrt{X_2-Y}}^0 \frac{dv}{\sqrt{Q(X_2 - \frac{v^2}{4})}} \right)$$

όπου $P(X) = X_2 - X$ και $Q(X) = X - X_1$ και X_1 και X_2 οι λύσεις της $E - V(X) = 0$. Οι συναρτήσεις P και Q καθώς και οι μετασχηματισμοί να δίνονται ως εξωτερικές συναρτήσεις.

4η ΑΣΚΗΣΗ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΙΣΩΣΕΩΝ Ι

Στην άσκηση αυτή θα επιλύσουμε αριθμητικά τη διαφορική εξίσωση που διέπει την κίνηση ενός εκκρεμούς:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l} \sin \theta \quad \text{ή} \quad \left(\frac{d\theta}{dt} = \omega, \quad \frac{d\omega}{dt} = \alpha(\theta) = -\frac{g}{l} \sin \theta \right)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε δύο μεθόδους: την μέθοδο Euler και την μέθοδο Euler-Verlet. Υπενθυμίζουμε τους γενικούς τύπους για τις δύο μεθόδους:

$$\begin{aligned} \text{Euler} \quad \theta_{n+1} &= \theta_n + \omega_n \Delta t, \quad \omega_{n+1} = \omega_n + \alpha_n \Delta t \\ \text{Euler-Verlet} \quad \theta_{n+1} &= 2\theta_n - \theta_{n-1} + \alpha_n (\Delta t)^2, \quad \omega_n = \frac{\theta_{n+1} - \theta_{n-1}}{2\Delta t} \end{aligned}$$

Για την Euler-Verlet χρησιμοποιήστε τον τύπο: $\theta_0 = \theta_1 - \omega_1 \Delta t + \alpha_1 (\Delta t)^2 / 2$ για να ξεκινήσετε τη μέθοδο.

Ο τελικός μας σκοπός είναι να σχεδιάσουμε στο MatLab τις καμπύλες (t, θ) και (t, ω) . Για $\theta = 2^\circ$ και 10° τρέξτε τη μέθοδο Euler, συγκρίνετε την περίοδο που βρίσκετε με την αντίστοιχη θεωρητική τιμή ($T = 2\pi\sqrt{l/g}(1 + \theta^2/12 + \dots)$) και ελέξτε το πλάτος της ταλάντωσης. Τρέξτε τη μέθοδο Euler-Verlet για τις ίδιες γωνίες και συγκρίνετε με τα προηγούμενα. Δοκιμάστε για $\theta = 20^\circ, 90^\circ$ και 120° . Ελέξτε τη συμπεριφορά του πλάτους και προσέξτε πώς οι καμπύλες απομακρύνονται από την ημιτονοειδή καμπύλη για μεγάλες γωνίες.

Στον κώδικα FORTRAN, στο κυρίως πρόγραμμα θα δίνονται: οι αρχικές συνθήκες $\theta(t=0)$ και $\omega(t=0) = 0$ (θεωρούμε ότι ο αρχικός χρόνος είναι $t=0$), ο ολικός χρόνος και ο αριθμός των βημάτων που διαμερίζουμε το χρόνο αυτό. Για τον λόγο g/l επιλέξτε μια λογική τιμή, π.χ. 10s^{-2} , οπότε στην περίπτωση αυτή η περίοδος είναι της τάξης των 2-3s. Το κυρίως πρόγραμμα θα καλεί τις subroutine για τις δύο μεθόδους.

Αποφύγετε να έχετε την εντολή που αποθηκεύει τα ζευγάρια (t, θ) και (t, ω) μέσα στη subroutine. Ο σωστός τρόπος (που εφαρμόζεται και στα έτοιμα υποπρογράμματα) είναι να αποθηκεύετε τα ζευγάρια αυτά σε array τα οποία θα παρουσιάζονται ως ορίσματα στη subroutine.

Για παράδειγμα:

```
SUBROUTINE EULER(XIN,VIN,TFI,STEPS,T,X,V)
```

```
REAL T(P),X(P),V(P),...
```

Καλώντας τη subroutine από το κυρίως πρόγραμμα, τα T,X,V δεν είναι ορισμένα (μπορείτε να τα αρχικοποιήσετε, μηδενίζοντας τα μέσα στη subroutine) αλλά επιστρέφοντας στο κυρίως πρόγραμμα, θα μεταφέρουν τη πληροφορία, που μπορεί να γραφεί σε αρχείο για να χρησιμοποιηθεί στη σχεδίαση.

5η ΑΣΚΗΣΗ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΙΙ

Στην άσκηση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης για να επιλύσουμε την εξίσωση του Newton για διάφορες περιπτώσεις δυνάμεων.

Για την περίπτωση δύο διαφορικών εξισώσεων της μορφής:

$$\frac{dx}{dt} = f_1(t, x, y), \quad \frac{dy}{dt} = f_2(t, x, y) \quad (1)$$

η μέθοδος δίνει:

$$\begin{aligned} K_{11} &= f_1(t_i, x_i, y_i), & K_{21} &= f_2(t_i, x_i, y_i) \\ K_{12} &= f_1\left(t_i + \frac{\tau}{2}, x_i + \frac{\tau}{2}K_{11}, y_i + \frac{\tau}{2}K_{21}\right), & K_{22} &= f_2\left(t_i + \frac{\tau}{2}, x_i + \frac{\tau}{2}K_{11}, y_i + \frac{\tau}{2}K_{21}\right) \\ K_{13} &= f_1\left(t_i + \frac{\tau}{2}, x_i + \frac{\tau}{2}K_{12}, y_i + \frac{\tau}{2}K_{22}\right), & K_{23} &= f_2\left(t_i + \frac{\tau}{2}, x_i + \frac{\tau}{2}K_{12}, y_i + \frac{\tau}{2}K_{22}\right) \\ K_{14} &= f_1(t_i + \tau, x_i + \tau K_{13}, y_i + \tau K_{23}), & K_{24} &= f_2(t_i + \tau, x_i + \tau K_{13}, y_i + \tau K_{23}) \\ t_{i+1} &= t_i + \tau \\ x_{i+1} &= x_i + \frac{1}{6}\tau(K_{11} + 2K_{12} + 2K_{13} + K_{14}), & y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}\tau(K_{21} + 2K_{22} + 2K_{23} + K_{24}) \end{aligned} \quad (2)$$

Ο νόμος του Newton στη Μηχανική είναι διαφορική εξίσωση δευτέρου βαθμού ως προς το χρόνο μπορεί να γραφτεί ως σύστημα δύο διαφορικών πρώτου βαθμού:

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = a(x, v)$$

Το σύστημα αυτό είναι ισοδύναμο με το (1) αν η μεταβλητή y είναι η ταχύτητα v , $f_2(t, x, y) = y$ και $f_2(t, x, y)$ είναι η επιτάχυνση.

Για επιτάχυνση θα πάρετε τις περιπτώσεις: α) μηδενική (ευθύγραμμη ομαλή κίνηση), β) σταθερή (ευθύγραμμη ομαλά επιταχυνόμενη κίνηση), γ) ανάλογη της $-v$ (επιβραδυνόμενη λόγω αντιστάσεων) και δ) ανάλογη του $-x$ (ταλάντωση). Κάθε φορά επιλέξτε κατάλληλες αρχικές συνθήκες ($x(t=0)$ και $v(t=0)$). Για κάθε περίπτωση να σχεδιάσετε τα $x(t)$ και $v(t)$.

Προτάσεις για την σύνταξη του κώδικα.

Στο κυρίως πρόγραμμα θα ορίζετε τον τελικό και αρχικό (συνήθως 0) χρόνο, τον αριθμό βημάτων, αρχική θέση, την αρχική ταχύτητα και, αν θέλετε, επιλογή της επιτάχυνσης. Η subroutine Runge-Kutta θα καλείται με ορίσματα τον τελικό χρόνο, αρχική θέση και ταχύτητα και αριθμό βημάτων. Καλό θα είναι η πληροφορία για κάθε βήμα (χρόνος, θέση και ταχύτητα) να αποθηκεύεται σε αντίστοιχα array (που θα είναι και αυτά ορίσματα της subroutine) ώστε η εγγραφή σε αρχείο να γίνεται στο κυρίως πρόγραμμα (όπως προτάθηκε και στην προηγούμενη άσκηση).

Μπορείτε να έχετε μια ξεχωριστή subroutine που θα εκτελεί σε κάθε βήμα τις πράξεις που απαιτεί η μέθοδος. Για παράδειγμα:

```
SUBROUTINE RGCALC(T,X1,X2,DT)
```

όπου $T, X1, X2$ είναι ο χρόνος και η αρχική θέση και ταχύτητα κατά την είσοδο στην subroutine, ενώ στην έξοδο οι μεταβλητές αυτές θα έχουν τις νέες τιμές. DT είναι το χρονικό βήμα που θα ορίζεται στην subroutine Runge-Kutta απ' όπου και θα καλείται η subroutine RGCALC.

6η ΑΣΚΗΣΗ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΛΥΣΗ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΙΙΙ

Στην άσκηση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης για να επιλύσουμε την εξίσωση του Newton σε δύο διαστάσεις για την περίπτωση κεντρικών δυνάμεων.

Αν τα μεγέθη x , v_x , y και v_y αντιστοιχούν στα x_1 , x_2 , x_3 και x_4 , έχουμε το παρακάτω σύστημα διαφορικών εξισώσεων:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= f_1(t, x_1, x_2, x_3, x_4), & \frac{dx_2}{dt} &= f_2(t, x_1, x_2, x_3, x_4), \\ \frac{dx_3}{dt} &= f_3(t, x_1, x_2, x_3, x_4), & \frac{dx_4}{dt} &= f_4(t, x_1, x_2, x_3, x_4)\end{aligned}$$

όπου βέβαια $f_1(t, x_1, x_2, x_3, x_4) = x_2$ και $f_3(t, x_1, x_2, x_3, x_4) = x_4$.

Για την περίπτωση κεντρικής δύναμης έχουμε:

$$f_2(t, x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{-C}{x_1^2 + x_3^2} \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_3^2}}, \quad f_4(t, x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{-C}{x_1^2 + x_3^2} \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2 + x_3^2}}$$

Μπορούμε να εξετάσουμε δύο περιπτώσεις:

1) Κίνηση πλανητών. Μπορείτε να ξεκινήσετε με κυκλική κίνηση. Χρησιμοποιήστε τις παρακάτω αρχικές τιμές: $x_1 = 10.0$, $x_2 = 0.0$, $x_3 = 0.0$ και $x_4 = 5.0$, ενώ $C = 250.0$. Αρχικός χρόνος $t_i = 0.0$, τελικός χρόνος $t_f = 14.0$ και τουλάχιστον 5000 βήματα.

2) Σκέδαση Rutherford. Χρησιμοποιήστε τις παρακάτω αρχικές τιμές: $x_1 = -150.0$, $x_2 = 15.0$ και $x_4 = 0.0$, ενώ $C = -250.0$. Για αρχικό και τελικό χρόνο χρησιμοποιήστε τους ίδιους όπως και στην κυκλική κίνηση. Θεωρούμε ότι ο πυρήνας είναι στη θέση $(0, 0)$ και ότι το σωματίδιο α ξεκινά από τη θέση $(-150, x_3)$ με ταχύτητα $(15, 0)$. Αλλάζοντας το x_3 (δώστε τιμές 0.05, 0.1, 0.5, 1.0 και 1.5), παρατηρήστε την αλλαγή της γωνίας σκέδασης.

Προαιρετικό τμήμα: Ο τύπος της επιτάχυνσης που γράψαμε παραπάνω ισχύει για σημειακό πυρήνα. Αν ο πυρήνας έχει κάποια έκταση, η επιτάχυνση εξαρτάται από την κατανομή του φορτίου στο χώρο που καταλαμβάνει. Εμείς θα απλοποιήσουμε την κατάσταση θεωρώντας σφαιρικό πυρήνα ακτίνας R με ομοιόμορφη κατανομή φορτίου. Οπότε, αν το βλήμα (ο πυρήνας ηλίου του Rutherford) βρίσκεται εκτός του πυρήνα, η επιτάχυνση που υφίσταται ο πρώτος είναι η ίδια με αυτήν του σημειακού πυρήνα. Αν ο πυρήνας ηλίου βρίσκεται σε απόσταση μικρότερης της ακτίνας R , η επιτάχυνση πρέπει να πολλαπλασιαστεί με τον παράγοντα $(r/R)^3$ όπου $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ η απόσταση του πυρήνα του ηλίου από το κέντρο του πυρήνα. Από τη διαφορετική γωνία σκέδασης για σημειακό και μη σημειακό πυρήνα, ο Rutherford εκτίμησε το μέγεθός του (χρησιμοποιήστε $R = 2.5$).

Για να σχεδιάσετε στο MATLAB ένα ημικύκλιο (που παριστά τον πυρήνα), πληκτρολογήστε την εντολή: `ezplot('R*cos(t)', 'R*sin(t)', [0, pi])`, όπου R η ακτίνα του πυρήνα.

Προτάσεις για την σύνταξη του κώδικα.

Όπως έχουμε αναφέρει και σε προηγούμενες ασκήσεις, καλό θα είναι η αποθήκευση σε αρχείο των σημείων να γίνεται στο κυρίως πρόγραμμα και όχι μέσα στη subroutine. Οπότε, τα x_1 , x_2 , x_3 και x_4 θα είναι το καθένα από ένα array με πλήθος όσο ο αριθμός των βημάτων. Αλλά, αν θέλουμε μπορούμε να συμπεριλάβουμε τα x σε ένα πίνακα $x(4, P)$ (όπου P ο αριθμός των βημάτων).