Υπολογιστική Φυσική
Ακαδημαϊκό Έτος 2013–2014
Εργασία στο Σπίτι (Homework) 01

Βασιλείου Σ. Γερογιάννη
Καθηγητή Τμήματος Φυσικής Πανεπιστημίου Πατρών

Πατρα, 22 Νοεμβριου 2013

1 Μέθοδος του Müller

1.1 Περιγραφή

Για την προσέγγιση $\bar{x}$ μίας ρίζας ξ της εξίσωσης $f(x) = 0$, η μέθοδος του Müller χρησιμοποιεί τρεις αρχικές εκτιμήσεις x_0, x_1, x_2, προσδιορίζει το τριώνυμο $r_2(x - x_2)$ που διέρχεται από τα τρία σημεία $(x_0, f(x_0)$, $(x_1, f(x_1)$, $(x_2, f(x_2))$, και υπολογίζει μία ρίζα του, $r_2(x-x_2) = 0$, με χρήση του τύπου (3). Η διαδικασία επαναλαμβάνεται με τις τιμές $x_0 = x_1$, $x_1 = x_2$, $x_2 = x$, έως ότου ικανοποιηθεί ένα συγκεκριμένο κριτήριο τερματισμού. Τότε το τελευταίο x είναι η ζητούμενη προσέγγιση $\bar{x}$ της ρίζας ξ.

Το τριώνυμο παριστάνεται εδώ ως $r_2(x) = A(x-x_2)^2 + B(x-x_2) + \Gamma$. Αφού διέρχεται από τα σημεία $(x_0, f(x_0)$, $(x_1, f(x_1)$, $(x_2, f(x_2))$, πρέπει να ισχύει

$$\begin{aligned}
f(x_0) &= A(x_0-x_2)^2 + B(x_0-x_2) + \Gamma, \\
f(x_1) &= A(x_1-x_2)^2 + B(x_1-x_2) + \Gamma, \\
f(x_2) &= A(x_2-x_2)^2 + B(x_2-x_2) + \Gamma = \Gamma, \qquad (1)
\end{aligned}$$

Η λύση του συστήματος των τριών εξισώσεων (1) για τους τρεις αγνώστους A, B, και Γ, δίνει

$$\begin{aligned}
\Gamma &= f(x_2), \\
B &= \frac{(x_0-x_2)^2\,[f(x_1)-f(x_2)] - (x_1-x_2)^2\,[f(x_0)-f(x_2)]}{(x_0-x_2)(x_1-x_2)(x_0-x_1)}, \\
A &= \frac{(x_1-x_2)\,[f(x_0)-f(x_2)] - (x_0-x_2)\,[f(x_1)-f(x_2)]}{(x_0-x_2)(x_1-x_2)(x_0-x_1)}. \qquad (2)
\end{aligned}$$

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον τύπο

$$x = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4A\Gamma}}{2\,A} = \frac{-2\Gamma}{B \pm \sqrt{B^2 - 4A\Gamma}} \qquad (3)$$

για την εύρεση μίας ρίζας του τριωνύμου r_2, επιλέγοντας το πρόσημο της ποσότητας $\Delta = \sqrt{B^2 - 4A\Gamma}$ έτσι ώστε να συμφωνεί με το πρόσημο του συντελεστή B.

Συγκεκριμένα, επιλέγουμε ως παρονομαστή την ποσότητα $E = B + \mathrm{sgn}(B)\,\Delta$, οπότε

$$h = x - x_2 = \frac{-2\,\Gamma}{E}, \qquad x = x_2 - \frac{2\,\Gamma}{E}. \tag{4}$$

Με το πρόσημο που επιλέξαμε, ο παρονομαστής E έχει τη μέγιστη δυνατή απόλυτη τιμή· συνεπώς το x απέχει την ελάχιστη δυνατή απόσταση από το x_2. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία με εκτιμήσεις $x_0 = x_1$, $x_1 = x_2$, $x_2 = x$, έως ότου εκπληρωθεί ένα κριτήριο τερματισμού.

1.2 Ο αλγόριθμος

Η μέθοδος υλοποιείται με τον ακόλουθο αλγόριθμο.
Step 1. Δίδονται τα $\mathtt{X0} = x_0$, $\mathtt{X1} = x_1$, $\mathtt{X2} = x_2$, η συνάρτηση $\mathtt{F(X)} = f(x)$ μία σχετική ανοχή $\mathtt{RE} = \tau_{\mathrm{R}}$, μία απόλυτη ανοχή $\mathtt{AE} = \tau_{\mathrm{A}}$, μία ανοχή $\mathtt{TOLE} = \tau_{\mathrm{E}}$ ως προς το πόσο επιτρέπεται να προσεγγίσει το μηδέν ο παρονομαστής E, και ένα άνω όριο επαναλήψεων $\mathtt{MAXIT} = N_{\max}$ που επιτρέπεται να πραγματοποιήσει ο αλγόριθμος.
Step 2. Επαναλαμβάνεται η ακόλουθη δομή DO, έως ότου ικανοποιηθεί το κριτήριο τερματισμού $|h| = |\delta x| = \mathtt{ABS(H)} <= \mathtt{RE} * \mathtt{ABS(X2)} + \mathtt{AE}$, οπότε το IFLAG λαμβάνει την τιμή '1', ή το κριτήριο τερματισμού $\mathtt{ABS(E)} < \mathrm{TOLE}$, οπότε το IFLAG λαμβάνει την τιμή '2'. Αν πραγματοποιηθούν MAXIT επαναλήψεις χωρίς να ικανοποιηθεί ένα από τα προηγούμενα κριτήρια, τότε ο αλγόριθμος τερματίζεται με $\mathtt{IFLAG} = 3$.

```
ITERATE: DO I=1,MAXIT
    H1=X1-X0
    H2=X2-X1
    G=F(X2)
    D1=(F(X1)-F(X0))/H1
    D2=(G-F(X1))/H2
    D=(D2-D1)/(H2+H1)
    B=D2+H2*D
    DC=SQRT(B*B-4*G*D)
    IF (ABS(B-DC) < ABS(B+DC)) THEN
        E=B+DC
    ELSE
        E=B-DC
    END IF
    IF (ABS(E) < TOLE) THEN
        X=X2
        IFLAG=2
        EXIT ITERATE
    END IF
    H=-2*G/E
    X=X2+H
    IF (ABS(H) < RE*ABS(X2)+AE) THEN
        IFLAG=1
        EXIT ITERATE
    END IF
    IF (I == MAXIT) THEN
        IFLAG=3
        EXIT ITERATE
    END IF
    X0=X1
    X1=X2
    X2=X
END DO ITERATE
```

2 Εργασία

1. Να γράψετε μία υπορουτίνα, για τη μέθοδο του Müller,

```
SUBROUTINE MULLER(F,X0,X1,X2,X,AE,RE,TOLE,MAXIT,ITER,IFLAG)
...
```

που να υλοποιεί τον αλγόριθμο §1.2.

2. Να προσθέσετε σχόλια στην υπορουτίνα σας, ώστε να δείξετε ότι έχετε κατανοήσει τον τρόπο με τον οποίο λειτουργεί αυτή.

3. Να τροποποιήσετε κατάλληλα το κύριο πρόγραμμα του αρχείου `drv_newton.for` (ιστοσελίδα του μαθήματος, Ενότητα 02-1), έτσι ώστε το τροποποιημένο κύριο πρόγραμμα `DRV_MULLER` να καλεί την υπορουτίνα `MULLER` αντί της υπορουτίνας `NEWTON`.

4. Να προσθέσετε στο κύριο πρόγραμμα `DRV_MULLER` μία επαναληπτική διαδικασία, έτσι ώστε, μετά την εύρεση μίας ριζας `ROOT` του αρχικού πολυωνύμου $f(x) = p_n(x)$ βαθμού $\mathtt{N} = \mathtt{N0} = n$, να γίνει η απομείωσή του στο πολυώνυμο $q_{n-1}(x)$ βαθμού $\mathtt{N} = \mathtt{N0} - \mathtt{1}$· στην επόμενη επανάληψη, τον ρόλο του $p(x)$ θα έχει το $q(x)$ και τον ρόλο του πολυωνυμικού βαθμού θα έχει το $\mathtt{N} = \mathtt{N0} - \mathtt{1}$· ομοίως για τις διαδοχικές τιμές $\mathtt{N} = \mathtt{N0} - 2$, $\mathtt{N0} - 3$, ..., 1. Ώστε σε κάθε επανάληψη θα υπολογίζεται μία από τις $\mathtt{N0} = n$ ρίζες του αρχικού πολυωνύμου $p_n(x)$. Σημειωτέον ότι η απομείωση ενός πολυωνύμου μπορεί να γίνει με χρήση της υπορουτίνας `SYNTHETIC_DIVISION` (βιβλίο, §2.4).

3 Ερωτήσεις

1. Δίδεται η πολυωνυμική εξίσωση $p_5(x) = 0$, όπου το μιγαδικό πολυώνυμο πέμπτου βαθμού $p_5(x)$ περιγράφεται στην §4. Με χρήση του προγράμματος `DRV_MULLER`, να υπολογίσετε τις πέντε ρίζες της εξίσωσης αυτής.

2. Μία και μόνον μία από τις ρίζες, της μορφής

$$\omega = \sigma + \tau\, i, \tag{5}$$

έχει $\sigma > 0$ και $\tau > 0$. Αυτή παριστάνει 'ιδιοτιμή' κυμάτων βαρύτητας ενός αστέρα νετρονίων με 'ιδιοπερίοδο' σ και 'ίδιο' ή 'χαρακτηριστικό' χρόνο απόσβεσης τ, μετρούμενα σε κατάλληλες μονάδες. Να υποδείξετε τη ρίζα ω που έχει τη συγκεκριμένη φυσική σημασία.

2. Γιατί, κατά τη γνώμη σας, οι άλλες τέσσερεις ρίζες στερούνται φυσικής σημασίας;

4 Δεδομένα

01. Για τους φοιτητές με «Λήγον Ψηφίο Αριθμού Μητρώου» (ΛΨ) '1'.

$$\begin{aligned} p_5(x) = \quad & (25.632 + 0.164\, i) + (4.09 - 20.954\, i)\, x - (14.5528 + 3.4724\, i)\, x^2 \\ & -(3.4274 - 4.0758\, i)\, x^3 + (3.2074 + 1.7322\, i)\, x^4 + x^5. \end{aligned} \tag{6}$$

02. Για τους φοιτητές με ΛΨ '2'.

$$p_5(x) = (22.252 + 0.424\,i) + (1.958 - 17.73\,i)x - (13.4972 + 1.2416\,i)x^2 - (2.2626 - 4.6322\,i)x^3 + (3.4466 + 1.7478\,i)x^4 + x^5. \quad (7)$$

03. Για τους φοιτητές με ΛΨ '3'.

$$p_5(x) = (19.4216 + 0.6212\,i) + (0.1542 - 15.0446\,i)x - (12.6272 - 0.6318\,i)x^2 - (1.2911 - 5.1049\,i)x^3 + (3.6467 + 1.7623\,i)x^4 + x^5. \quad (8)$$

04. Για τους φοιτητές με ΛΨ '4'.

$$p_5(x) = (18.5604 + 0.6328\,i) - (0.4382 + 14.2614\,i)x - (12.3954 - 1.2144\,i)x^2 - (1.0047 - 5.2647\,i)x^3 + (3.7071 + 1.7701\,i)x^4 + x^5. \quad (9)$$

05. Για τους φοιτητές με ΛΨ '5'.

$$p_5(x) = (16.9526 + 0.7982\,i) - (1.4148 + 12.6986\,i)x - (11.8649 - 2.2647\,i)x^2 - (0.4427 - 5.5156\,i)x^3 + (3.8213 + 1.7746\,i)x^4 + x^5. \quad (10)$$

06. Για τους φοιτητές με ΛΨ '6'.

$$p_5(x) = (15.6346 + 0.8122\,i) - (2.3248 + 11.5026\,i)x - (11.5127 - 3.1573\,i)x^2 - (0.0051 - 5.7614\,i)x^3 + (3.9137 + 1.7868\,i)x^4 + x^5. \quad (11)$$

07. Για τους φοιτητές με ΛΨ '7'.

$$p_5(x) = (14.2006 + 0.7642\,i) - (3.3718 + 10.2456\,i)x - (11.1725 - 4.1449\,i)x^2 + (0.459 + 6.0497\,i)x^3 + (4.0136 + 1.8045\,i)x^4 + x^5. \quad (12)$$

08. Για τους φοιτητές με ΛΨ '8'.

$$p_5(x) = (13.9792 + 0.6444\,i) - (3.6346 + 10.1302\,i)x - (11.1964 - 4.3266\,i)x^2 + (0.5093 + 6.1313\,i)x^3 + (4.0279 + 1.8151\,i)x^4 + x^5. \quad (13)$$

09. Για τους φοιτητές με ΛΨ '9'.

$$p_5(x) = (13.08 + 0.29\,i) - (4.583 + 9.569\,i)x - (11.2036 - 5.0302\,i)x^2 + (0.7387 + 6.4191\,i)x^3 + (4.0873 + 1.8489\,i)x^4 + x^5. \quad (14)$$

10. Για τους φοιτητές με ΛΨ '0'.

$$p_5(x) = (11.6516 + 0.1812\,i) - (5.6808 + 8.3596\,i)x - (10.9062 - 6.0298\,i)x^2 + (1.1894 + 6.7264\,i)x^3 + (4.1862 + 1.8708\,i)x^4 + x^5. \quad (15)$$