Υπολογιστική Φυσική
Εξεταστική Περίοδος Ιανουαρίου 2013

Πατρα, 16 Ιανουαριου 2013

1 Θέμα 1

Α. Να εξηγήσετε γραφικά την μέθοδο της διχοτόμησης.
Β. Να εξηγήσετε γραφικά την μέθοδο Runge–Kutta.

2 Θέμα 2

2.1 Διατύπωση

Οι μιγαδικές τριδιαγώνιες μήτρες, δηλαδή μήτρες της μορφής

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ c_2 & a_2 & b_3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1} & b_n \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_n & a_n \end{bmatrix}, \tag{1}$$

όπου $a_1, a_i, b_i, c_i \in \mathbb{C}, i = 2, 3, \dots, n,$ και όπου n είναι η τάξη της μήτρας A, εμφανίζονται σε πολλά προβλήματα της φυσικής (π.χ., στην κβαντομηχανική και κβαντική θεωρία πεδίων, στις ταλαντώσεις των αστέρων νετρονίων, στα κύματα βαρύτητας, στις μοντέρνες κοσμολογικές θεωρίες). Το φυσικό ενδιαφέρον εστιάζεται κυρίως στις ιδιοτιμές της μήτρας A, οι οποίες συμπίπτουν με τις ρίζες $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ του χαρακτηριστικού της πολυωνύμου $p(\lambda)$. Π.χ., για $n = 8$, το χαρακτηριστικό πολυώνυμο γράφεται

$$p(\lambda) = a_1 + a_2\lambda + a_3\lambda^2 + a_4\lambda^3 + a_5\lambda^4 + a_6\lambda^5 + a_7\lambda^6 + a_8\lambda^7 + a_9\lambda^8. \tag{2}$$

Στην βιβλιογραφία, είναι γνωστός ένας αξιόπιστος και ταχύτατος αλγόριθμος για τον υπολογισμό των συντελεστών του χαρακτηριστικού πολυωνύμου μίας τετραγωνικής μήτρας (S. Rombouts and K. Heyde, *J. of Comp. Phys.*, **140**, 453 (1998)), ο οποίος μπορεί να εφαρμοσθεί και στις τριδιαγώνιες μήτρες (αφού αυτές είναι ειδικές περιπτώσεις τετραγωνικών μητρών).

Δίδεται το κύριο πρόγραμμα `drv_ectm.for` (ιστοσελίδα του μαθήματος: Διάφορα 07, αποσυμπίεση με password: arb1trary), το οποίο περιέχει ένα υποπρόγραμμα που κατασκευάζει τυχαίες μιγαδικές τριδιαγώνιες μήτρες, τάξης $n = 8$, και ένα υποπρόγραμμα που υπολογίζει τους συντελεστές $a_1, \ldots, a_9$ του χαρακτηριστικού πολυωνύμου $p(\lambda)$. Όπως φαίνεται και από την Εξ. (2), οι συντελεστές αντιστοιχούν στο πολυωνυμικό σχήμα (polynomial format) A_1–A, δηλαδή είναι ανιόντες συντελεστές σε ανιούσες δυνάμεις του λ, με την δεικτοδότηση να αρχίζει από το '1' και όχι από το '0'.

2.2 Ερωτήσεις

1. Να υπολογίσετε τις ρίζες $\lambda_1, \ldots, \lambda_8$ του χαρακτηριστικού πολυωνύμου $p(\lambda)$.
2. Να εντοπίσετε τη ρίζα με το μεγαλύτερο, κατά την απόλυτη τιμή του, πραγματικό μέρος.
3. Να επεξεργασθείτε τη ρίζα αυτή με μία «αριθμητική διαδικασία στίλβωσης», ώστε τελικώς να την υπολογίσετε με τη μεγαλύτερη δυνατή ακρίβεια.

2.3 Υποδείξεις

1. Μπορείτε να υπολογίσετε τις μιγαδικές ρίζες με χρήση του υποπρογράμματος `SUBROUTINE CPZERO` και των σχετικών παρελκομένων του από τη βιβλιοθήκη `SLATEC` (π.χ., Ενότητα 01). Προσέξτε πάντως ότι το υποπρόγραμμα αυτό λειτουργεί με απλή ακρίβεια (`KIND = 4`), άρα πρέπει να κοινοποιήσετε σε αυτό τους πολυωνυμικούς συντελεστές απλής ακρίβειας (πίνακας `CCOEFS`) και όχι τους πολυωνυμικούς συντελεστές διπλής ακρίβειας (πίνακας `CDCOEFS`). Επίσης, προσέξτε ότι το υποπρόγραμμα `SUBROUTINE CPZERO` λειτουργεί με το πολυωνυμικό σχήμα A_1–D (ανιόντες συντελεστές σε κατιούσες δυνάμεις, με την δεικτοδότηση να αρχίζει από το '1'), άρα πρέπει με κάποιον τρόπο να 'αντιστρέψετε' την σειρά των πολυωνυμικών συντελεστών.
2. Μπορείτε να πραγματοποιήσετε την αριθμητική διαδικασία στίλβωσης με χρήση του υποπρογράμματος `SUBROUTINE CDNEWTON`, (π.χ., Ενότητα 02-1). Προσέξτε πάντως ότι το υποπρόγραμμα αυτό λειτουργεί με διπλή ακρίβεια (`KIND = 8`), άρα πρέπει να κοινοποιήσετε σε αυτό τους πολυωνυμικούς συντελεστές διπλής ακρίβειας (πίνακας `CDCOEFS`). Επίσης, προσέξτε ότι στο παρόν πρόβλημα οι πολυωνυμικοί συντελεστες είναι μιγαδικοί και όχι πραγματικοί, άρα πρέπει

να τροποποιήσετε κατάλληλα το υποπρόγραμμα `SUBROUTINE CDNEWTON`. Αντίστοιχες τροποποιήσεις πρέπει να υποστούν και τα υποπρογράμματα `FUNCTION F`, `FUNCTION DF`, `FUNCTION POLY`, `FUNCTION DPOLY` (Ενότητα 02-1).

2.4 Δεδομένα

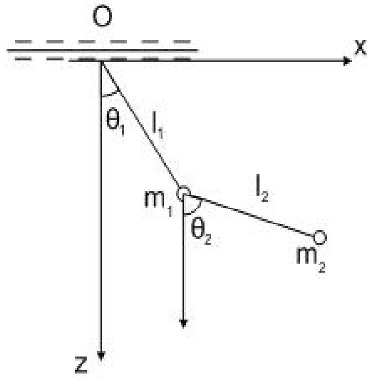
Κατά την εκτέλεση, το κύριο πρόγραμμα `drv_ectm.for` θα σας ζητήσει να δώσετε μία τιμή στην ακέραια μεταβλητή `LPS`. Πρέπει να δώσετε το «λήγον ψηφίο» του Αριθμού Μητρώου σας.

2.5 Αποτελέσματα

1. Να καταγράψετε (με τρία δεκαδικά ψηφία, τόσο για το πραγματικό, όσο και για το φανταστικό τους μέρος) όλες τις εντοπιζόμενες ρίζες απο το υποπρόγραμμα `SUBROUTINE CPZERO`.
2. Να καταγράψετε την υποδεικνυόμενη ρίζα μετά την αριθμητική διαδικασία στίλβωσης (με εννέα δεκαδικά ψηφία).
3. Να καταγράψετε την τιμή του χαρακτηριστικού πολυωνύμου $p(\lambda)$ στην υποδεικνυόμενη ρίζα. Η τιμή αυτή παριστάνει ένα μέτρο της ακρίβειας υπολογισμού της συγκεκριμένης ρίζας.

Θέμα 3

Διατύπωση: Με χρήση των εξισώσεων Lagrange, να ευρεθούν οι διαφορικές εξισώσεις της κίνησης του διπλού εκκρεμούς.



Διαπραγμάτευση: Το σύστημα έχει δύο βαθμούς ελευθερίας. Για την περιγραφή του, χρησιμοποιούμε ως γενικευμένες συντεταγμένες τις γωνίες θ_1 και θ_2 που σχηματίζουν οι ράβδοι l_1 και l_2, αντίστοιχα, με την κατακόρυφο. Τα διανύσματα θέσης των μαζών m_1 και m_2 είναι

$$\vec{r}_1 = l_1 \sin\theta_1 \vec{i} + l_1 \cos\theta_1 \vec{k},$$

$$\vec{r}_2 = \left(l_1 \sin\theta_1 + l_2 \sin\theta_2\right)\vec{i} + \left(l_1 \cos\theta_1 + l_2 \cos\theta_2\right)\vec{k}.$$

Οπότε η κινητική ενέργεια του συστήματος έχει τη μορφή

$$T = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^2 = \frac{1}{2}m_1 l_1{}^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\left[l_1^2\dot{\theta}_1^2 + l_2^2\dot{\theta}_2^2 + 2l_1 l_2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2\cos\left(\theta_2 - \theta_1\right)\right].$$

Η δυναμική ενέργεια (ως προς το οριζόντιο επίπεδο της στήριξης) είναι

$$V = -m_1 g z_1 - m_2 g z_2 = -m_1 g l_1 \cos\theta_1 - m_2 g\left(l_1\cos\theta_1 + l_2\cos\theta_2\right).$$

Από την Lagrangian του συστήματος

$$L = \frac{1}{2}\left(m_1 + m_2\right)l_1^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}m_2 l_2^2\dot{\theta}_2^2 + m_2 l_1 l_2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2\cos\left(\theta_2 - \theta_1\right) + \left(m_1 + m_2\right)g l_1\cos\theta_1 + m_2 g l_2\cos\theta_2$$

προκύπτει ότι οι εξισώσεις Lagrange

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial\theta_i} = 0,\; i = 1, 2,$$

δίδουν τις ακόλουθες διαφορικές εξισώσεις

(1) $\left(m_1 + m_2\right)l_1^2\ddot{\theta}_1 + m_2 l_1 l_2\cos\left(\theta_2 - \theta_1\right)\ddot{\theta}_2 = m_2 l_1 l_2\dot{\theta}_2^2\sin\left(\theta_2 - \theta_1\right) - \left(m_1 + m_2\right)g l_1\sin\theta_1,$

(2) $m_2 l_1 l_2\cos\left(\theta_2 - \theta_1\right)\ddot{\theta}_1 + m_2 l_2^2\ddot{\theta}_2 = -m_2 l_1 l_2\dot{\theta}_1^2\sin\left(\theta_2 - \theta_1\right) - m_2 g\, l_2\sin\theta_2,$

οι οποίες παριστάνουν τις διαφορικές εξισώσεις κίνησης των (δύο) σφαιριδίων του διπλού εκκρεμούς.

Θέτουμε

$$a_{11} = \left(m_1 + m_2\right)l_1^2,$$

$$a_{12} = a_{21} = m_2 l_1 l_2\cos\left(\theta_2 - \theta_1\right),$$

$$a_{22} = m_2 l_2^2,$$

$$b_1 = m_2 l_1 l_2\dot{\theta}_2^2\sin\left(\theta_2 - \theta_1\right) - \left(m_1 + m_2\right)g l_1\sin\theta_1,$$

$$b_2 = -m_2 l_1 l_2\dot{\theta}_1^2\sin\left(\theta_2 - \theta_1\right) - m_2 g\, l_2\sin\theta_2.$$

Οπότε το σύστημα (1)-(2) λαμβάνει την μορφή

$$a_{11}\ddot{\theta}_1 + a_{12}\ddot{\theta}_2 = b_1,$$

$$a_{21}\ddot{\theta}_1 + a_{22}\ddot{\theta}_2 = b_2,$$

από την οποία προκύπτει ότι

$$\ddot{\theta}_1 = \left(\frac{b_1\, a_{22} - b_2\, a_{12}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \right) = \Delta_1 ,$$

$$\ddot{\theta}_2 = \left(\frac{b_2\, a_{11} - b_1\, a_{21}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \right) = \Delta_2 .$$

Στη συνέχεια, θέτοντας

$$\dot{\theta}_1 = \zeta_1 ,$$
$$\dot{\theta}_2 = \zeta_2 ,$$

λαμβάνουμε το ακόλουθο σύστημα των τεσσάρων συνήθων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης

$$\dot{\theta}_1 = \zeta_1 ,$$
$$\dot{\zeta}_1 = \Delta_1 ,$$
$$\dot{\theta}_2 = \zeta_2 ,$$
$$\dot{\zeta}_2 = \Delta_2 .$$

Ερωτήσεις:

1. Με χρήση του πακέτου της Ενότητας 04-2, να επιλύσετε το πρόβλημα του διπλού εκκρεμούς για τις ακόλουθες περιπτώσεις (τα αριθμητικά δεδομένα αντιστοιχούν στα μεγέθη: γωνία εκτροπής-1 [Q1], γωνία εκτροπής-2 [Q2], αμφότερες **σε μοίρες**, επιτάχυνση της βαρύτητας [GA], μήκος νήματος-1 [L1], μάζα-1 [M1], μήκος νήματος-2 [L2], μάζα-2 [M2], χρονικό διάστημα επίλυσης [T_END], **στο σύστημα CGS)**:

1.1. 2,2,981,25,1000,50,100,20.
1.2. 2,2,981,30,1050,55,125,60.
1.3. 2,2,981,20,800,40,200,40.
1.4. 3,3,981,25,1000,50,200,20.
1.5. 1,1,981,100,1000,200,100,20.
1.6. 1,1,981,25,1000,50,100,20.
1.7. 1,1,981,30,750,75,75,20.
1.8. +2,-2,981,45,1200,145,250,40.
1.9. +2,-2,981,30,1050,60,105,20.
1.0. +3,-3,981,100,2000,200,200,40.

Να ασχοληθείτε με την περίπτωση που αντιστοιχεί στο "λήγον ψηφίο" του Αριθμού Μητρώου σας. Να αποστείλετε τα δύο αρχεία της αριθμητικής λύσης στο Email του διδάσκοντος.

2. Να τροποποιήσετε κατάλληλα το πακέτο της Ενότητας 05-6, ώστε αυτό να παρεμβάλλει με την μέθοδο των "cubic splines" τις συναρτήσεις θ_1 και θ_2. Στην συνέχεια, να υπολογίσετε την πρώτη τιμή του χρόνου t_{cycle} για την οποία ισχύει $\theta_1(t_{\mathrm{cycle}}) = \theta_1(0)$. Να εξετάσετε άν συγχρόνως ισχύει και $\theta_2(t_{\mathrm{cycle}}) = \theta_2(0)$. Να καταγράψετε τον υπολογισθέντα χρόνο t_{cycle} και τα σχόλιά σας.