Υπολογιστική Φυσική I

Για το μάθημα Υπολογιστικής Φυσικής I
7ο εξάμηνο Σχολής ΕΜΦΕ
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Κωνσταντίνος Ν. Αναγνωστόπουλος

13 Ιανουαρίου 2012

Ο τόμος αυτός έχει γραφτεί με την υπόθεση ότι ο αναγνώστης **εκτελεί τις εντολές και τις διαδικασίες που περιγράφονται ταυτόχρονα με την ανάγνωση του κειμένου**. Αν αυτό δε γίνεται, η βοήθεια από το κείμενο θα είναι εξαιρετικά ελλειπής.

Στην ιστοσελίδα του μαθήματος[1] παρέχεται συνοδευτικό λογισμικό το οποίο, μεταξύ άλλων, περιέχει τους κώδικες που περιγράφονται στο κείμενο.

Μερικές συμβάσεις: Κείμενο με γραμματοσειρά όπως η παρακάτω αφορά εντολές στον υπολογιστή, είσοδο και έξοδο προγραμμάτων, κώδικα σε Fortran ή άλλη γλώσσα, ονόματα αρχείων:

```
> echo Hello world
Hello world
```

Όταν μια γραμμή *αρχίζει* με το χαρακτήρα "προτροπής" (prompt)

```
>
```

όπως παραπάνω, είναι μία *εντολή* που δίνουμε στη γραμμή εντολών του φλοιού. Η δεύτερη γραμμή παραπάνω είναι αυτά που τυπώνει η εντολή στην κονσόλα. Το `file.f` είναι το όνομα ενός αρχείου.

Παρακάτω δίνονται τα περιεχόμενα ενός αρχείου Fortran:

```
program add

z = 1.0
y = 2.0
x = z + y
print *, x

end
```

[1] **http://www.physics.ntua.gr/ph36/**

Τι χρειάζεστε για να δουλέψετε στον υπολογιστή σας:

- Ένα λειτουργικό σύστημα τύπου GNU/Linux και τα βασικά εργαλεία του.
- Ένα μεταγλωττιστή (compiler) για τη γλώσσα Fortran. Ο μεταγλωττιστής gfortran διατίθεται ελεύθερα υπό άδεια ελεύθερου λογισμικού[2].
- Ένα προηγμένο πρόγραμμα επεξεργασίας κειμένου κατάλληλο για προγραματιστές, όπως ο Emacs[3]
- Ένα καλό πρόγραμμα, κατάλληλο για ανάλυση δεδομένων, για να κάνετε γραφικές παραστάσεις όπως το `gnuplot`[4].
- Το φλοιό `tcsh`[5].
- Τα προγράμματα `gawk`[6], `grep`, `sort`, `cat`, `head`, `tail`, `less`. Βεβαιωθείτε ότι είναι στη διάθεσή σας.

Αν έχετε μια διανομή GNU/Linux εγκατεστημένη στον υπολογιστή σας, η εγκατάσταση του παραπάνω λογισμικού γίνεται συνήθως πολύ εύκολα με τον διαχειριστή πακέτων της διανομής. Λ.χ. σε μια διανομή τύπου Debian (Ubuntu, ...) με τις απλές εντολές

```
> sudo apt-get install tcsh emacs gnuplot gnuplot-doc gfortran gawk
> sudo apt-get install gawk-doc binutils manpages-dev coreutils
```

θα βρείτε όλο το λογισμικό έτοιμα εγκατεστημένο στον υπολογιστή σας.

Αν δε θέλετε να εγκαταστήσετε μια διανομή GNU/Linux στον υπολογιστή σας, έχετε τις εξής εναλλακτικές δυνατότητες:

- Χρησιμοπιήστε το cloud computing του ΕΜΠ[7]. Θα εξαρτάστε από την ταχύτητα του δικτύου.
- Εκκινήστε τον υπολογιστή σας από το DVD ή usb stick με μια live διανομή, όπως από του Ubuntu[8]. Αυτή η επιλογή δε θα αλλοιώσει τίποτα στον υπολογιστή σας, αν και θα τρέχει αργά.

[2] `http://www.gfortran.org`
[3] `http://www.gnu.org/software/emacs/`
[4] `http://www.gnuplot.info`
[5] `http://www.tcsh.org`
[6] `http://www.gnu.org/software/gawk`
[7] `https://cloudfront.central.ntua.gr/`
[8] `http://www.ubuntu.com`

- Εγκαταστήστε στα Microsoft Windows τη διανομή `Cygwin`[9]. Είναι μια πολύ καλή επιλογή για όσους έχουν εθιστεί στη `Microsoft`.

Ευχαριστώ τους/τις φοιτητές/τριες που μου υπέδειξαν διορθώσεις στο κείμενο και ιδιαίτερα τον κ. Στέφανο Κουτσουμπή.

[9] `http://www.cygwin.com`

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[Βασικά συγγράματα για το μάθημα]

[1] H. Gould, J. Tobochnik και H. Christian, *Coumputer Simulation Methods*, *Application to Physical Systems*, Third Edition, Addison Wesley. Πλήρες και καλό βιβλίο υπολογιστικής φυσικής. Το λογισμικό των εφαρμογών είναι γραμμένο σε Java και είναι προσφέρεται για εφαρμογές με εικονικές και διαδραστικές δυνατότητες. Το λογισμικό διατίθεται ελεύθερα στο `opensourcephysics.org`.

[2] R. Landau, *Computational Physics*

[3] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flanney, *Numerical Recipes*, *The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press. Το βιβλίο είναι ελεύθερα διαθέσιμο στην ιστοσελίδα www.nr.com.

[Κεφάλαιο 1]

[4] Υπάρχει πολύ εκπαιδευτικό υλικό για τη χρήση του υπολογιστή διαθέσιμο από την ιστοσελίδα `www.physics.ntua.gr/ph36/`.

[Κεφάλαιο 6]

[Κεφάλαιο 3]

[5] *Numerical Recipes* [3] Κεφ. 16.0 και 16.1. Μέθοδοι Runge–Kutta, βασική θεωρία και προγραμματισμός.

[6] Weisstein, Eric W. *Runge-Kutta Method*, from MathWorld–A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/Runge-KuttaMethod.html.

[7] J. H. E. Cartwright and O. Piro, *The dynamics of Runge-Kutta methods*, Int. J. Bifurcation and Chaos 2, 427-449, 1992.

[8] John H. Mathews, Kurtis Fink, *Numerical Methods Using Matlab*, Prentice Hall, 2003, Κεφ. 9.

[9] John H. Mathews, *Numerical Analysis - Numerical Methods Project*, `http://math.fullerton.edu/mathews/numerical.html`.

[10] Ian Percival and Derek Richards, *Introduction to Dynamics*, Cambridge University Press, 1982. Διαβάστε εδώ για τροχιές στο χώρο των φάσεων, θεωρία σταθερότητας και για το εκκρεμές με απόσβεση και εξωτερικη δύναμη.

[11] J. B. McLaughlin, *Period Doubling bifurcations and chaotic motion for a parametrically forced pendulum*, J. Stat. Phys. 24, 375–388 (1981).

[Κεφάλαιο 4]

[12] J.V. José, E.J. Saletan, *Classical Dynamics, a Contemporary Approach*, Cambridge University Press, 1998.. Πολύ καλό βιβλίο κλασικής μηχανικής.

[Κεφάλαιο 5]

[13] R.W. Brankin, I. Gladwell, and L.F. Shampine, RKSUITE: a suite of Runge-Kutta codes for the initial value problem for ODEs, Softreport 92-S1, Department of Mathematics, Southern Methodist University, Dallas, Texas, U.S.A, 1992. Μπορείτε να την κατεβάσετε από το δικτυακό τόπο `www.netlib.org/ode/rksuite` ή να τη βρείτε στο συνοδευτικό λογισμικό.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Ο Υπολογιστής

Σκοπός του κεφαλαίου αυτού είναι να θέσει τα θεμέλια για την ανάπτυξη δεξιοτήτων χρήσης των υπολογιστικών εργαλείων που θα χρησιμοποιήσουμε στη μελέτη των υπολογιστικών προβλημάτων που παρουσιάζονται στα επόμενα κεφάλαια. Δεν έχει σκοπό να κάνει πλήρη και εις βάθος παρουσίαση, είναι μάλλον πρακτική εκμάθηση μέσω παραδειγμάτων. Άλλωστε υπάρχουν πολλές πλήρης και παιδαγωγικές παρουσιάσεις του υλικού που θα παρουσιάσουμε σε πολλά βιβλία ελεύθερα διαθέσιμα στο διαδίκτυο ή/και σε βιβλία τα οποία ... έχουν κάποιο τίμημα. Παρακολουθήστε τη βιβλιογραφία και την ιστοσελίδα του μαθήματος[1].

Όπως σε κάθε περιβάλλον εργασίας ενός υπολογιστικού προγράμματος, είναι ανάγκη να γίνουν επιλογές. Αυτές εξαρτώνται από τις συγκεκριμένες ανάγκες του προγράμματος: Απαιτήσεις αριθμητικής αποτελεσματικότητας, μικρή/μεγάλη ομάδα εργασίας, πολυπλοκότητα κώδικα, ανάγκες για αναβαθμίσεις ... αναμνήσεις από το μέλλον.

Εμείς εδώ θα διαλέξουμε να πάρουμε ένα άρωμα από τις ανάγκες ενός προγράμματος με κατεύθυνση επιστημονική/υπολογιστική. Ενός προγράμματος με μεγάλες ανάγκες σε εκμετάλλευση των υπολογιστικών πόρων για γρήγορους αριθμητικούς υπολογισμούς και για ευέλικτη ανάλυση (...πολλών) δεδομένων. Ένα τέτοιο περιβάλλον που προσφέρει ευελιξία, αξιοπιστία, απλότητα[2], δυνατά εργαλεία για ανάλυση δεδομένων και μεταγλώττιση προγραμμάτων και που να προσφέρει στο χρήστη να κάνει αποδοτικότερη χρήση των υπολογιστικών πόρων του συστήματός του είναι η ομάδα λειτουργικών συστημάτων Unix. Η σύγ-

[1] `http://mycourses.ntua.gr/courses/SEMFE1079/` (Προγραμματισμός με Εφαρμογές στην Επιστήμη του Μηχανικού), `http://www.physics.ntua.gr/ph36/` (Υπολογιστική Φυσική Ι).

[2] Ο συγγραφέας ποτέ δεν μπόρεσε να κατανοήσει γιατί άλλα δημοφιλή λειτουργικά συστήματα θεωρούνται...απλούστερα.

χρονη, δημοφιλής και ελεύθερα διαθέσιμη έκδοση τέτοιου συστήματος είναι το GNU/Linux[3], μια προσπάθεια η οποία πραγματοποιήθηκε χάρη στην εθελοντική δουλειά εκατομμυρίων προγραμματιστών παγκοσμίως και που βασίστηκε στην ιδέα του Ελεύθερου Λογισμικού (όχι με την έννοια "τσάμπα" αλλά με την έννοια της ελεύθερης διακίνησης ιδεών στο λογισμικό) που θεμελίωσε ο Richard Stallman[4].

Η γλώσσα προγραμματισμού που θα διαλέξουμε είναι η Fortran 77. Μερικοί λόγοι για την επιλογή είναι ότι η γλώσσα (ή οι εξελίξεις αυτής Fortran 90, 95, ...) αυτή είναι προσανατολισμένη σε αριθμητικές εφαρμογές και χρησιμοποιείται ευρέως σε επιστημονικές και μηχανικές συνεργασίες. Είναι απλή και οι μεταγλωττιστές κάνουν βελτιστοποίηση, παραλληλοποίηση και διανυσματοποίηση αποτελεσματικότερα. Υπάρχουν πολλές, καλές και δοκιμασμένες βιβλιοθήκες με μαθηματικό λογισμικό από τις οποίες μερικές είναι ελεύθερα διαθέσιμες. Φυσικά η γλώσσα αυτή δεν προσφέρεται για πολύπλοκες διεργασίες που έχουν σχέση με το λειτουργικό σύστημα (διαχείριση αρχείων, επεξεργασία δεδομένων κλπ) και επεξεργασία κειμένου αλλά το κενό καλύπτεται εύκολα με το συνδυασμό χρήσης των εργαλείων του συστήματος. Επίσης είναι απλή στη δομή της, οπότε ο αναγνώστης δε θα δυσκολευτεί να κάνει απλούς υπολογισμούς ακόμα και αν δεν έχει προηγούμενη εμπειρία προγραμματισμού. Τέλος είναι μαθηματικά προσανατολισμένη: Έχει απλή, κτισμένη μέσα της, χρήση μιγαδικών αριθμών και μαθηματικών συναρτήσεων, βιβλιοθήκες διαθέσιμες για υπολογισμούς διαφορετικής ακρίβειας και αποτελεσματικότερη διαχείριση της μνήμης του υπολογιστή. Μπορεί κανείς εύκολα να διαχειριστεί αριθμητικά δεδομένα σε ψηφιακή μορφή (unformatted) που είναι γρηγορότερο και διατηρεί την ακρίβεια των πραγματικών αριθμών. Η απλότητά της και η ... ηλικία της κάνει τους αντίστοιχους μεταγλωττιστές να κάνουν την καλύτερη διαθέσιμη βελτιστοποίηση και παραλληλοποίηση του κώδικα σε σύγκριση με όλες τις άλλες γλώσσες. Έχει το μειονέκτημα ότι η μνήμη καθορίζεται στατικά και δε διαθέτει pointers, κάτι όμως που δεν αποτελεί συνήθως σοβαρό εμπόδιο σε αριθμητικούς υπολογισμούς. Είναι γλώσσα δομημένου (procedural) και όχι αντικειμενοστραφούς (object oriented) προγραμματισμού, κάτι όμως που δεν είναι μειονέκτημα σε αριθμητικούς υπολογισμούς καθώς ο πολύπλοκος αντικειμενοστραφής προγραμματισμός μπορεί να οδηγήσει εύκολα σε προγραμματιστικά λάθη ως προς τη βελτιστοποίηση εκτέλεσης του προγράμματος από τον προγραμματιστή ή/και τον μεταγλωττιστή (compiler). Γλώσσες αντικειμενοστραφείς

[3] www.gnu.org

[4] www.stallman.org

όπως οι C++/Java θα προτιμηθούν σε προγράμματα που ο χρόνος/μνήμη δεν είναι σημαντικοί περιορισμοί αλλά όπου ο χρόνος προγραμματισμού λόγω μεγέθους του προγράμματος ή/και της ομάδας προγραμματισμού ή λόγω φορητότητας (portability) σε διαφορετικές πλατφόρμες είναι σημαντικότερος.

Η Fortran77 όπως και οι Fortran90, C, C++, Java είναι γλώσσες που *μεταγλωττίζονται* από ένα μεταγλωττιστή. Μια άλλη κατηγορία γλωσσών προγραμματισμού είναι οι ερμηνευόμενες (interpreted) όπως είναι οι perl, Basic, awk, shell programming, Macsyma, Mathematica, Matlab, Octave, Maple, ... Οι *ερμηνευτές* των γλωσσών αυτών ερμηνεύουν το πρόγραμμα γραμμή-γραμμή κάτι που δεν επιτρέπει την ανάλυση του προγράμματος που κάνει ο μεταγλωττιστής που οδηγεί σε βελτιστοποιήσεις που κάνουν το πρόγραμμα να τρέχει γρηγορότερα. Οι γλώσσες αυτές είναι απλούστερες στη χρήση (λ.χ. με μία εντολή `Inverse[A]` ή `1/A` παίρνουμε τον αντίστροφο ενός πίνακα κάτι που χρειάζεται περισσότερη δουλειά σε μία γλώσσα όπως η Fortran, C, ...) αλλά γίνονται απαγορευτικά αργές για απαιτητικά προβλήματα. Ο χρόνος προγραμματισμού τους όμως είναι πολύ μικρότερος και ο προγραμματιστής θα πρέπει να θεωρήσει αν μπορεί να λύσει το πρόβλημά του με τη βοήθειά τους προτού αρχίσει να σχεδιάζει ένα πρόγραμμα σε μία γλώσσα όπως η Fortran.

Τέλος αρκετές από τις εντολές του λειτουργικού συστήματος που θα συζητήσουμε παρακάτω, ερμηνεύονται έτσι μόνο από το φλοιό tcsh. Αυτή είναι μία ακόμα από τις επιλογές μας και δε θα αναλύσουμε τις διαφορές με άλλους φλοιούς έτσι ώστε η παρουσίαση να μη γίνει πολυπλοκότερη από όσο χρειάζεται.

1.1 Το Λειτουργικό Σύστημα

Έχετε βρεθεί στην κατάσταση να θέλετε να λύστε ένα πρόβλημα και το πολυδιαφημισμένο και ακριβοπληρωμένο λογισμικό σας που "ψήνει και καφέ" να μην μπορεί να κάνει αυτό που αρχικά δεν προβλέψατε ότι θα ήταν αναγκαίο να γίνει? Η λύση σε αυτό το πρόβλημα είναι ένα περιβάλλον όπου οι διεργασίες που απλές ή πολύπλοκες επαναλαμβάνονται συχνά, να καταμερίζονται σε διαφορετικά εργαλεία. Το περιβάλλον αυτό επιτρέπει εύκολα το συνδυασμό των δυνατοτήτων όλων αυτών των εργαλείων οπότε κάθε φορά που θέλετε να κάνετε κάτι καινούργιο αρκεί να συνδυάσετε με διαφορετικό τρόπο τα εργαλεία αυτά για να πετύχετε τον σκοπό σας. Και αν πάλι βρεθείτε στην κατάσταση να σας λείπει ένα εργαλείο τότε να χρειαστείτε απλά να δημιουργή-

σετε/αποκτήσετε μόνο το εργαλείο αυτό και όχι ... ολόκληρο το γκαράζ!

Αυτή είναι η βασική φιλοσοφία των λειτουργικών συστημάτων τύπου Unix. Ένα άλλο χαρακτηριστικό του συστήματος είναι ότι οτιδήποτε στο σύστημα είναι ... αρχείο. Είτε πρόκειται για δεδομένα σε μορφή κειμένου, είτε εκτελέσιμο πρόγραμμα σε γλώσσα μηχανής, είτε σκληρός δίσκος, συσκευή, οθόνη, κάρτα ήχου ... Άρα το πρώτο που πρέπει να κατανοήσουμε είναι πως δομείται το σύστημα αρχείων (filesystem).

1.1.1 Filesystem

Καταρχήν σε κάθε αρχείο μας οδηγεί ένα ... μονοπάτι (path). Υπάρχουν δύο τρόποι να γράψουμε ένα path. Το σχετικό (relative) και το απόλυτο (absolute). Δύο παραδείγματα είναι:

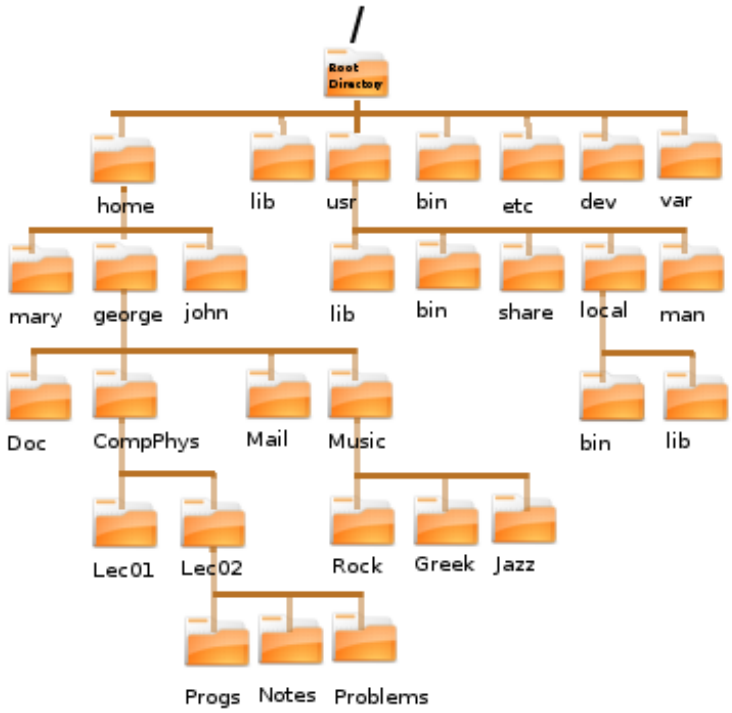
```
bin/RungeKutta/rk.exe
/home/george/bin/RungeKutta/rk.exe
```

Στα παραπάνω και τα δύο μπορεί να αναφέρονται στο ίδιο αρχείο, μπορεί όμως και σε διαφορετικό. Εξαρτάται "που είμαστε". Αν "είμαστε" στον κατάλογο `/home/george/` τότε αναφερόμαστε στο ίδιο αρχείο. Αν είμαστε στον κατάλογο `/home/john/` ή `/home/george/CompPhys/` τότε όχι. Στις τελευταίες περιπτώσεις από το `relative path` γίνεται αναφορά στα αρχεία
`/home/john/bin/RungeKutta/rk.exe` και
`/home/george/CompPhys/bin/RungeKutta/rk.exe` αντίστοιχα. Πώς τα ξεχωρίζουμε? Το `absolute path` αρχίζει πάντα από τον χαρακτήρα `/` ενώ το `relative path` όχι.

Παραπάνω το "είμαστε" αναφέρεται σε μια θέση στο σύστημα των αρχείων που ονομάζεται "τρέχων κατάλογος " (current or working directory). Σε κάθε διεργασία στο λειτουργικό σύστημα αντιστοιχεί ένας τρέχων κατάλογος. Το σύστημα αρχείων στο Unix είναι ενιαίο. Ακόμα και αν πρόκειται για διαφορετικούς σκληρούς δίσκους, συστήματα αρχείων που συνδέονται στον υπολογιστή μας μέσω δικτύου, το CD/DVD, ο εξωτερικός USB δίσκος, τα αρχεία για αλληλεπίδραση με hardware (οθόνη, ποντίκι, modem, ...) όλα αναρτώνται στο ίδιο λογικά σύστημα αρχείων. Ο χρήστης/διαχειριστής έχει απόλυτη ελευθερία να τα βάλει εκεί που αυτή/ός θέλει[5].

[5]Αυτό δίνει μια δυνατή αίσθηση ελευθερίας, από την άλλη είναι η αρχή του ... χάους. Ιστορικά αυτό δημιούργησε ένα πύργο της Βαβέλ για συστήματα Unix που αποτέλεσε και έναν από τους κύριους λόγους που άλλα, σαφώς κατώτερης ποιότητας, λειτουργικά συστήματα επικράτησαν στην αγορά των PC

Το filesystem χτίζεται πάνω στη ρίζα του (root) σαν ένα ανάποδο δέντρο. Το σύμβολο του root είναι η / Δηλ. έχουμε, ξεκινώντας από



Σχήμα 1.1: Το filesystem στο Unix. Στην κορυφή έχουμε τη ρίζα (root directory) του συστήματος αρχείων, τον κατάλογο /. Κάθε κατάλογος περιέχει αρχεία, μεταξύ των οποίων και υποκαταλόγους. Έχει ένα και μοναδικό γονεϊκό κατάλογο (parent directory) που συμβολίζεται με .. (δύο τελείες). Ο / έχει για γονεϊκό κατάλογο τον εαυτό του.

το root φτιάχνουμε καταλόγους και μέσα στους καταλόγους υποκαταλόγους κ.ο.κ. Κάθε κατάλογος χρειάζεται να γνωρίζει το ... γονιό του (parent directory) και τα αρχεία που περιέχει (και από αυτά μερικά μπορεί να είναι υποκατάλογοι - κι αυτοί αρχεία είναι).

Όπως είπαμε στο Unix έχουμε ελευθερία να βάλουμε τα αρχεία μας όπου θέλουμε, αλλά ευτυχώς υπάρχουν μερικές συμβάσεις που μπορούμε να περιμένουμε ότι στα περισσότερα συστήματα θα ακολουθούνται. Έτσι στον κατάλογο `/home` συνήθως βρίσκουμε τις προσωπικές περιοχές (home directories) των χρηστών, στον `/etc` αρχεία παραμετροποίησης λειτουργίας συστήματος (system configuration files), σε καταλόγους με όνομα `bin` τα εκτελέσιμα αρχεία προγραμμάτων binaries, σε καταλόγους με όνομα `lib` βιβλιοθήκες προγραμμάτων.

Μερικές σημαντικές συμβάσεις για θέσεις στο filesystem είναι η . (τελεία = ο τρέχων κατάλογος - current directory), η .. (δύο τελείες = ο "γονεϊκός " κατάλογος - parent directory) και η ~ (περισπωμένη = προσωπική περιοχή χρήστη - home directory). Έστω για παράδειγμα ότι είμαστε ο χρήστης `john` στον τρέχοντα κατάλογο `/home/john/Mail/Kostas`. Τότε τα παρακάτω paths αναφέρονται στο ίδιο αρχείο `/home/john/Books/Comp.doc`:

```
../../Books/Comp.doc
~/Books/Comp.doc
~john/Books/Comp.doc
./../../Books/Comp.doc
```

Εισάγουμε τώρα παρακάτω τις βασικές εντολές για να πλοηγούμαστε στο filesystem[6]. Η εντολή `cd` (change directory) μας αλλάζει τοποθεσία στο filesystem ενώ η `pwd` μας αναφέρει πού βρισκόμαστε:

```
> cd /usr/bin
> pwd
/usr/bin
> cd /usr/local/lib
> pwd
/usr/local/lib
> cd
> pwd
/home/konstant
> cd -
> pwd
/usr/local/lib
> cd ../../
> pwd
/usr
```

Το όρισμα της εντολής `cd` είναι ένα absolute ή relative path στο οποίο (αν είναι σωστό και έχουμε την άδεια πρόσβασης) "μεταβαίνουμε"[7]. Εξαιρέσεις είναι να μη δοθεί όρισμα (πάμε στο home directory) ή ο χαρακτήρας - (πάμε εκεί που βρισκόμασταν πριν). Η εντολή `mkdir` δημιουργεί καινούργιους καταλόγους ενώ η `rmdir` τους σβήνει αν είναι άδειοι. Δοκιμάστε:

[6] Οι εντολές που αρχίζουν με > είναι εντολές που δίνονται από τη γραμμή εντολών και φυσικά ο αρχικός χαρακτήρας > δεν είναι μέρος της εντολής. Οι γραμμές χωρίς > είναι το κείμενο που τυπώνει η εντολή στο stdout (τερματικό)

[7] Δηλαδή αλλάζει τον current directory της διεργασίας.

```
> mkdir new
> mkdir new/01
> mkdir new/01/02/03
mkdir: cannot create directory `new/01/02/03': No such file or directory
> mkdir -p new/01/02/03
> rmdir new
rmdir: `new': Directory not empty
> rmdir new/01/02/03
> rmdir new/01/02
> rmdir new/01
> rmdir new
```

Προσέξτε πως η `mkdir` δεν μπορεί να δημιουργήσει καταλόγους δύο επίπεδα πιο κάτω ενώ η `mkdir -p` μπορεί. Ο "διακόπτης " `-p` αλλάζει τον τρόπο λειτουργίας της εντολής αυτής.

Για να δούμε τα περιεχόμενα ενός καταλόγου χρησιμοποιούμε την εντολή `ls`:

```
> ls
BE.eps  Byz.eps  Programs      srBE_xyz.eps  srB_xyz.eps
B.eps   Bzy.eps  srBd_xyz.eps  srB_xy.eps
> ls Programs
Backup            rk3_Byz.f  rk3.f
plot-commands     rk3_Bz.f   rk3_g.f
```

Με την πρώτη εντολή βλέπουμε τα περιεχόμενα του καταλόγου που βρισκόμαστε, ενώ στη δεύτερη (προφανώς το αρχείο `Programs` είναι υποκατάλογος) τα περιεχόμενα του καταλόγου που βάζουμε στην εντολή σαν όρισμα. Ένας άλλος τρόπος να δώσουμε την εντολή είναι

```
> ls -l
total 252
-rw-r--r--  1 konstant users 24284 May  1 12:08 BE.eps
-rw-r--r--  1 konstant users 22024 May  1 11:53 B.eps
-rw-r--r--  1 konstant users 29935 May  1 13:02 Byz.eps
-rw-r--r--  1 konstant users 48708 May  1 12:41 Bzy.eps
drwxr-xr-x  4 konstant users  4096 May  1 23:38 Programs
-rw-r--r--  1 konstant users 41224 May  1 22:56 srBd_xyz.eps
-rw-r--r--  1 konstant users 23187 May  1 21:13 srBE_xyz.eps
-rw-r--r--  1 konstant users 24610 May  1 20:29 srB_xy.eps
-rw-r--r--  1 konstant users 23763 May  1 20:29 srB_xyz.eps
```

Ο "διακόπτης " (switch) `-l` κάνει την εντολή `ls` να συμπεριφερθεί διαφορετικά. Μας δίνει τα περιεχόμενα του current directory μαζί με χρήσιμες πληροφορίες για τα αρχεία που περιέχει. Η πρώτη στήλη έχει κωδικοποιημένες τις άδειες χρήσης για κάθε αρχείο (βλ. παρακάτω). Η δεύτερη των αριθμό των συνδέσμων (links) των αρχείων. Η τρίτη το όνομα του χρήστη στον οποίο ανήκουν τα αρχεία. Η τέταρτη την ομάδα (group) του αρχείου[8]. Η πέμπτη το μέγεθος του αρχείου σε bytes = 8 bits. Οι επόμενες 3 το χρόνο τελευταίας μετατροπής του αρχείου. Και τέλος το όνομα του αρχείου.

Οι άδειες πρόσβασης `r`, `w`, `x` είναι άδειες πρόσβασης για **r**`ead`, **w**`rite`, e**x**`ecute`. Όποιος έχει άδεια `r` έχει άδεια να διαβάσει και αντιγράψει ένα αρχείο. Όποιος έχει άδεια `w` μπορεί να μεταβάλλει τα περιεχόμενα ενός αρχείου. Όποιος έχει άδεια `x` μπορεί να εκτελέσει ένα αρχείο ως πρόγραμμα[9]. Ειδικά για τους καταλόγους, για να μπορεί ο χρήστης/ομάδα/κόσμος να "μπει" σε έναν κατάλογο με την εντολή `cd` πρέπει να έχει άδεια `x`. Για να μπορέσει να σβήσει ένα αρχείο πρέπει να έχει άδεια `w` στον *κατάλογο* που ανήκει.

Οι άδειες χωρίζονται σε τρεις ομάδες: Ο χρήστης (user- θέσεις 2-4), η ομάδα (group- θέσεις 5-7) και ο υπόλοιπος κόσμος (others-θέσεις 8-10). Έτσι για παράδειγμα

```
-rw-r--r--
-rwxr-----
drwx--x--x
```

Στην πρώτη περίπτωση ο χρήστης έχει άδεια **r**`ead`, **w**`rite` αλλά όχι e**x**`ecute` και η ομάδα/κόσμος έχει μόνο άδεια **r**`ead`. Στη δεύτερη ο χρήστης έχει άδεια **r**`ead`, **w**`rite`, e**x**`ecute`, η ομάδα άδεια **r**`ead` και ο κόσμος τίποτα. Στην τρίτη ο χρήστης έχει άδεια **r**`ead`, **w**`rite`, e**x**`ecute`, η ομάδα/κόσμος άδεια e**x**`ecute`. Ειδικά στην τρίτη βρίσκουμε το χαρακτήρα `d` στην πρώτη θέση που δηλώνει ότι το αρχείο είναι κατάλογος (directory). Η πρώτη αυτή θέση όταν είναι "κατειλημμένη" δηλώνει αρχείο ειδικού τύπου.

Οι άδειες πρόσβασης αλλάζουν με την εντολή `chmod`:

```
> chmod u+x  file
> chmod og-w file1 file2
> chmod a+r  file
```

[8]Ενας χρήστης μπορεί να ανήκει σε πολλές ομάδες για να διευκολύνεται η συνεργασία με διαφορετικές ομάδες χρηστών. Φυσικά κάθε ομάδα μπορεί να έχει πολλούς χρήστες για μέλη.

[9]Φυσικά το αν θα μπορέσει να εκτελεστεί σωστά είναι ευθύνη του χρήστη

Με την πρώτη εντολή ο χρήστης (u≡ user) παίρνει (+) άδεια x στο αρχείο file. Με τη δεύτερη ο κόσμος (o ≡ others) και η ομάδα (g≡ group) χάνουν (-) άδεια w ενώ στην τρίτη όλοι (a≡ all) αποκτούν άδεια πρόσβασης r.

Τελειώνουμε την παράγραφο αυτή αναφέροντας μερικές ακόμα βασικές εντολές που αναφέρονται στη διαχείριση των αρχείων. Η εντολή cp (copy) φτιάχνει αντίγραφα αρχείων:

```
> cp file1.f file2.f
> cp file1.f file2.f file3.f Programs
```

Η πρώτη εντολή αντιγράφει τα δεδομένα του αρχείου file1.f σε ένα καινούργιο αρχείο file2.f αν αυτό δεν υπάρχει ήδη, ή αντικαθιστά το αρχείο file2.f από ένα καινούργιο με τα περιεχόμενα του file1.f. Η δεύτερη αντιγράφει τα αρχεία file1.f file2.f file3.f στον κατάλογο Programs (αν δεν είναι κατάλογος εισπράττουμε ... παράπονα).

Η εντολή mv (move) "μετακινεί" ή μετονομάζει αρχεία:

```
> mv file1.f file2.f
> mv file1.f file2.f file3.f Programs
```

Η πρώτη εντολή έχει ως αποτέλεσμα να μετονομάσει το αρχείο file1.f σε file2.f. Η δεύτερη εντολή μετακινεί τα αρχεία file1.f file2.f file3.f στον κατάλογο Programs

Τέλος η εντολή rm (remove) διαγράφει αρχεία[10]. Η εντολή αυτή δε "χαρίζει κάστανα". Όταν το αρχείο διαγράφεται, το λειτουργικό σύστημα δεν μπορεί να το επαναφέρει. Προσοχή λοιπόν

```
> ls
file1.f  file2.f  file3.f  file4.csh
> rm file1.f file2.f file3.f
> ls
file4.csh
```

τα αρχεία file1.f file2.f file3.f δεν υπάρχουν πια για το λειτουργικό σύστημα[11]. Για να είμαστε πιο προσεκτικοί μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το διακόπτη -i. Τότε η εντολή ζητάει επιβεβαίωση πριν την καταστροφή:

[10]Στην πραγματικότητα αφαιρεί "links" (συνδέσεις στο filesystem μιάς διαμέρισης-partition) αρχείων. Ένα αρχείο μπορεί να έχει ένα ή περισσότερα links στην ίδια διαμέριση ενός filesystem. Ένα αρχείο θεωρείται διαγραμμένο όταν αφαιρεθούν όλα τα links του.

[11]Αυτό δε σημαίνει ότι τα δεδομένα τους δεν υπάρχουν πια στο δίσκο...

```
> rm -i *
rm: remove regular file `file1.f'? y
rm: remove regular file `file2.f'? y
rm: remove regular file `file3.f'? y
rm: remove regular file `file4.csh'? n
> ls
file4.csh
```

Στην τελευταία γραμμή απαντήσαμε αρνητικά και έτσι το αρχείο `file4.csh` δεν διαγράφτηκε.

Η εντολή `rm` δε διαγράφει καταλόγους. Χρησιμοποιήστε την εντολή `rmdir` για τη διαγραφή άδειων καταλόγων. Για να διαγράψετε καταλόγους με περιεχόμενα χρησιμοποιήστε την εντολή[12] `rm -r`. Λ.χ. έστω ότι έχουμε στους καταλόγους `dir1` και `dir1/dir2` τα αρχεία:

```
./dir1
./dir1/file2.f
./dir1/file1.f
./dir1/dir2
./dir1/dir2/file3.f
```

Οι εντολές

```
> rm dir1
rm: cannot remove `dir1': Is a directory
> rm dir1/dir2
rm: cannot remove `dir1/dir2': Is a directory
> rmdir dir1
rmdir: dir1: Directory not empty
> rmdir dir1/dir2
rmdir: dir1/dir2: Directory not empty
> rm -r dir1
```

Με την τελευταία εντολή όλα τα παραπάνω αρχεία διαγράφονται.

1.1.2 Εντολές

Οι εντολές στο Unix είναι, όπως είπαμε, αρχεία με άδεια πρόσβασης `x` (e**x**ecute). Όταν στη γραμμή εντολών γράψουμε μία πρόταση λ.χ.

```
> ls -l test.f test.dat
```

[12] Ενα `rm -r *` και τα δεδομένα σας αποτελούν ιστορία...

ο φλοιός (το πρόγραμμα με το οποίο ο χρήστης αλληλεπιδρά με το λειτ. σύστημα) την ερμηνεύει ως εξής: Η πρόταση χωρίζεται σε λέξεις και πρώτη λέξη (`ls`) ερμηνεύεται ως εντολή. Οι υπόλοιπες περνάνε στην εντολή ως τα ορίσματά της. Κατά σύμβαση, λέξεις που αρχίζουν από το χαρακτήρα - (λ.χ. `-l`, `--help`, `--version`, `-O3`) έχουν συνήθως ειδική ερμηνεία και ονομάζονται "διακόπτες" (options, switches) και κάνουνε το πρόγραμμα να εκτελείται με διαφορετικό τρόπο ανάλογα με τις τιμές τους. Είδαμε ήδη τη διαφορά με το πρόγραμμα `ls` που ανάλογα με το αν το καλούμε ως "`ls`" ή "`ls -l`" τα αποτελέσματα τυπώνονται με διαφορετικό τρόπο.

Για να εκτελεστεί η εντολή `ls` ο φλοιός αναζητεί ένα αρχείο με το όνομα `ls` που να έχει άδεια πρόσβασης `x`. Για να καταλάβουμε πώς γίνεται η αναζήτηση αυτή πρέπει να εξηγήσουμε τι είναι οι μεταβλητές φλοιού και οι μεταβλητές περιβάλλοντος. Αυτές έχουν ένα όνομα που δίνεται από μια ακολουθία χαρακτήρων και οι τιμές τους λαμβάνονται προτάσσοντας το χαρακτήρα $ στο όνομά τους. Έτσι η μεταβλητή με το όνομα `PATH` έχει τιμή `$PATH`. Οι τιμές των μεταβλητών περιβάλλοντος τίθενται με την εντολή[13] `setenv` για τις μεταβλητές περιβάλλοντος και με την εντολή `set` για τις μεταβλητές φλοιού:

```
> setenv MYVAR test-env
> set myvar = test-shell
> echo $MYVAR $myvar
test-env test-shell
```

Δύο μεταβλητές των οποίων αναλαμβάνει ο φλοιός να τις ορίσει σωστά στο περιβάλλον του χρήστη είναι οι `PATH` και `path`:

```
>echo $path
/usr/local/bin /usr/bin /bin /usr/X11/bin
>echo $PATH
/usr/local/bin:/usr/bin:/bin:/usr/X11/bin
```

Βλέπουμε ότι η τιμή τους (που ο χρήστης μπορεί να αλλάξει!) αποτελείται από συνιστώσες που είναι διαδρομές στο σύστημα αρχείων. Στην πρώτη περίπτωση οι συνιστώσες χωρίζονται από κενό ενώ στη δεύτερη από : (άνω-κάτω τελεία).

Έτσι, επιστρέφοντας στην ερώτηση πώς βρίσκει ο φλοιός την εντολή `ls`, θα είναι ήδη φανερό πως ψάχνει κάθε συνιστώσα της τιμής της μεταβλητής `path` μέχρι να τη βρει. Αν είστε περίεργοι, δώστε τις εντολές

[13] Η εντολή `setenv` είναι ειδική για το φλοιό `tcsh`. Στο φλοιό `bash` αρκεί να καθορίσετε την τιμή με ένα =: `MYVAR=test-env`.

```
> which ls
/bin/ls
> ls -l /bin/ls
-rwxr-xr-x 1 root root 93560 Sep 28  2006 /bin/ls
```

από όπου είναι προφανές ότι το ζητούμενο αρχείο είναι το `/bin/ls`. Αν η διαδικασία αποτύχει, ο φλοιός δίνει μήνυμα σφάλματος. Αν πετύχει, το πρόγραμμα φορτώνεται από το λειτουργικό σύστημα στη μνήμη για εκτέλεση. Τα ορίσματα περνάνε στην εντολή ώστε αυτή να τα ερμηνεύσει όπως έχει προγραμματιστεί. Στην εντολή

```
> ls -l test.f test.dat
```

το όρισμα `-l` είναι διακόπτης που ερμηνεύεται από την εντολή να δώσει long listing των αρχείων. Τα ορίσματα `test.f` και `test.dat` ερμηνεύονται από την εντολή ως τα αρχεία που θα αναζητήσει για να μας δώσει πληροφορίες.

Μία σημαντική πληροφορία στην ερμηνεία των ορισμάτων είναι η χρήση "μπαλαντέρ" (wildcard):

```
> ls -l *.f *.dat
```

θα κάνει το φλοιό να αναπτύξει τα αστεράκια *πριν* να περάσει τα ορίσματα στο πρόγραμμα σε οποιαδήποτε ακολουθία χαρακτήρων δίνει ένα υπάρχον αρχείο. Έτσι αν ο κατάλογος που βρισκόμαστε περιέχει τα αρχεία `test.f, test1.f, myprog.f, test.dat, hello.dat` η εντολή που θα "δει" το λειτουργικό είναι

```
> ls -l myprog.f test1.f test.f hello.dat test.dat
```

Αυτό συμβαίνει για οποιαδήποτε άλλη εντολή.

Σε κάθε εντολή συναρτάται η καθιερωμένη είσοδος `stdin` (standard input) η καθιερωμένη έξοδος `stdout` (standard output) και η καθιερωμένη έξοδος σφαλμάτων `stderr` (standard error). Αυτές είναι συμβάσεις για αρχεία στα οποία το πρόγραμμα μπορεί να διαβάζει ή να τυπώνει δεδομένα. Όταν ο χρήστης δουλεύει σε ένα τερματικό, όλες οι παραπάνω θεωρούνται αρχικά να είναι το τερματικό[14]. Δηλ. μια εντολή που διαβάζει δεδομένα από το `stdin`, αυτά ο χρήστης θα τα εισάγει μέσω του τερματικού τυπώνοντάς τα με το πληκτρολόγιο. Αν μια εντολή τυπώνει στο stdout ή στο stderr αυτά τυπώνονται στο τερματικό.

Η δυνατότητα που δίνει μεγάλη ευελιξία στο χρήστη να χειριστεί τις εντολές είναι η δυνατότητα *επαναορισμού* των παραπάνω αρχείων. Ο χρήστης μπορεί να τα ορίσει να είναι *οποιοδήποτε αρχείο*. Ο επαναορισμός του `stdout` γίνεται με το σύμβολο $>$.

[14] Σας θυμίζουμε ότι για το Unix τα πάντα είναι αρχεία.

```
> ls
file1.f  file2.f  file3.f  file4.csh
> ls > results
> ls
file1.f  file2.f  file3.f  file4.csh  results
```

Στην πρώτη εντολή βλέπουμε τα περιεχόμενα του καταλόγου. Στη δεύτερη επαναορίζουμε το stdout να είναι το αρχείο results. Μετά την εκτέλεση της εντολής παρατηρούμε τη δημιουργία του αρχείου results το οποίο περιέχει σα δεδομένα τα ονόματα των αρχείων file1.f file2.f file3.f file4.csh. Αν το αρχείο results δεν υπάρχει δημιουργείται, αν υπάρχει τα περιεχόμενα του καταστρέφονται και αντικαθίστανται από το stdout της εντολής. Για να επισυνάψουμε (append) τα δεδομένα του stdout στο τέλος ενός ήδη υπάρχοντος αρχείου, χρησιμοποιούμε το σύμβολο $\gg$. Έτσι αν μετά από τις παραπάνω εντολές εκτελέσουμε

```
> ls >> results
```

τότε τα περιεχόμενα του αρχείου results θα είναι

```
file1.f  file2.f  file3.f  file4.csh
file1.f  file2.f  file3.f  file4.csh  results
```

Ο επαναορισμός του stdin γίνεται με το σύμβολο $<$ ενώ του stderr με το σύμβολο >&[15]. Σχετικά παραδείγματα θα δούμε στη παράγραφο 1.2.

Είναι δυνατόν το stdin/stdout μιας εντολής να οριστεί να είναι το stdout/stdin μιας άλλης εντολής. Με τον τρόπο αυτό μπορούν να συνδυαστούν οι λειτουργίες διαφορετικών εντολών έτσι ώστε να παράγουν αποτελέσματα για τα οποία θα χρειαζόταν να γράψουμε ένα αρκετά πολύπλοκο πρόγραμμα για να τα πάρουμε. Η διαδικασία αυτή λέγεται "διασωλήνωση" (piping) και χρησιμοποιείται κυρίως για τη δημιουργία ισχυρών φίλτρων. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται το σύμβολο |

```
> cmd1 | cmd2 | cmd3 | ... | cmdN
```

Με την παραπάνω πρόταση το stdout της εντολής cmd1 γίνεται stdin της εντολής cmd2, το stdout της εντολής cmd2 γίνεται stdin της εντολής cmd3 κοκ. Σχετικά παραδείγματα θα δούμε στη παράγραφο 1.2.

[15] Το >& ισχύει μόνο για το φλοιό tcsh. Για άλλους φλοιούς (bash,sh,...) διαβάστε τη σχετική βοήθεια.

1.1.3 Αναζητώντας Βοήθεια

Το Unix απέκτησε τη φήμη λειτουργικού συστήματος μη φιλικού προς το χρήστη. Τίποτα δεν απέχει περισσότερο από την πραγματικότητα. Παρόλο που έχει μια αρχική δυσκολία, η οποία λύνεται αν ο χρήστης μεθοδικά διαβάσει και εξασκηθεί στις βασικές εντολές του συστήματος, στη συνέχεια όλες οι πληροφορίες για να κάνει ο χρήστης *οτιδήποτε* είναι διαθέσιμη online[16].

Το κλειδί για άνετη πλεύση σε αυτό το ταξίδι είναι να μάθει ο χρήστης να χρησιμοποιεί το σύστημα βοήθειας που παρέχεται εντός και εκτός συστήματος. Οι περισσότερες εντολές παρέχουν βασικές πληροφορίες από μόνες τους. Από τη γραμμή εντολών, για τυχαία εντολή `cmd` δοκιμάστε:

```
> cmd --help
> cmd -h
> cmd -help
> cmd -\?
```

Για παράδειγμα δώστε την εντολή `ls --help`. Αν είναι εφαρμογή παραθυρική αρχίστε από το σχεδόν πάντοτε διαθέσιμο menu "Help". Μη φοβηθείτε να διαβάσετε...

Ας υποθέσουμε πως έχουμε ακούσει κάτι για μια εντολή που λέγεται `printf` ή κάτι τέτοιο τέλος πάντων. Το πρώτο σύστημα βοήθειας είναι τα man pages. Αυτό είναι ένα σύστημα από help files που τις αναζητούμε με την εντολή `man`:

```
> man printf
```

Η εντολή `info` δίνει περισσότερες πληροφορίες σε μορφή "βιβλίου" με βασικές δυνατότητες ξεφυλλίσματος (browsing).

```
> info printf
```

οι εντολές

```
> man -k printf
> whatis printf
```

μας πληροφορούν ότι υπάρχουν και άλλες, πιθανώς σχετιζόμενες εντολές `fprintf`, `fwprintf`, `wprintf`, `sprintf`.... Ειδικά το αποτέλεσμα της δεύτερης το παραθέτουμε γιατί είναι διδακτικό:

[16] Σε αντίθεση με άλλα δημοφιλή λειτουργικά συστήματα τα οποία είναι "μαύρα κουτιά".

```
> whatis printf
printf               (1)  - format and print data
printf               (1p)  - write formatted output
printf               (3)  - formatted output conversion
printf               (3p)  - print formatted output
printf [builtins]    (1)  - bash built-in commands, see bash(1)
```

Η δεύτερη στήλη είναι το "τμήμα" (section) των man pages στο οποίο αναφέρεται η εντολή. Η πρόσβαση στα τμήματα γίνεται δίνοντας το σαν όρισμα στην εντολή:

```
> man 1  printf
> man 1p printf
> man 3  printf
> man 3p printf
> man bash
```

δίνει πρόσβαση στις αντίστοιχες πληροφορίες. Στο τμήμα ένα βρίσκουμε το `printf` ως "κοινή εντολή", στο τμήμα 3 ως συνάρτηση της γλώσσας C. Άλλα τμήματα είναι το 2 (εντολές διαχείρισης συστήματος), 4, 5, 8 κλπ. Περιηγηθείτε στον κατάλογο `/usr/share/man/` για να δείτε με τα μάτια σας περισσότερα.

Δίνοντας την εντολή

```
> printf --help
```

παίρνουμε πάλι αρκετή πληροφορία. Η εντολή

```
> locate printf
```

μας δείχνει πολλά σχετικά αρχεία στο σύστημα. Οι εντολές

```
> which printf
> where printf
```

μας δίνει πληροφορία για το πού βρίσκονται τα αρχεία-προγράμματα που εκτελούνται όταν δίνεται η εντολή `printf`.

Μια άλλη σημαντική ευκολία που μας προσφέρει ο φλοιός είναι η "συμπλήρωση εντολών". Μπορούμε να γράψουμε μέρος του ονόματος μιας εντολής και να πατήσουμε το συνδυασμό πλήκτρων `[Ctrl-d]`[17] (δηλ. ταυτόχρονα το πλήκτρο `Ctrl` και το πλήκτρο `d`). Τότε ο φλοιός θα μας συμπληρώσει όλες τις εντολές των οποίων το όνομα αρχίζει με τα γράμματα που έχουμε ήδη γράψει[18]:

[17] Στο φλοιό `bash` πατήστε ένα ή δύο `[Tab]`.

[18] Με τον ίδιο τρόπο γίνεται και συμπλήρωση ονομάτων αρχείων. Γράψτε μερικώς το όνομα ενός αρχείου στο όρισμα μιας εντολής και πατήστε `[Tab]` ή `[Ctrl-d]`.

```
> pri[Ctrl-d]
printafm    printf  printenv   printnodetest
```

Δοκιμάστε λ.χ. την εντολή `x[Ctrl-d]` και θα μάθετε (σχεδόν) τα πάντα για τις εντολές διαθέσιμες στο παραθυρικό σύστημα X: `xterm, xeyes, xclock, xcalc, ....`

Τέλος, μεγάλη πηγή πληροφοριών είναι το διαδίκτυο. Google your blues... και θα εκπλαγείτε πόσοι άλλοι έχουν ασχοληθεί με το πρόβλημά σας.

1.2 Εργαλεία Επεξεργασίας Κειμένου – Φίλτρα

Για την ανάλυση των δεδομένων που θα παράγουμε χρειαζόμαστε εργαλεία τα οποία να επεξεργάζονται ευέλικτα αρχεία κειμένου. Μερικά εργαλεία που μπορούν να φτιάξουν περίπλοκα και ισχυρά φίλτρα είναι τα προγράμματα `cat, less, head, tail, grep, sort` και `awk`. Ας αναφέρουμε και τα προγράμματα `perl` και `sed` για τον αναγνώστη που ενδιαφέρεται να πλουτίσει το οπλοστάσιό του παρόλο που δε θα τα περιγράψουμε εδώ λόγω χώρου.

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε το αρχείο με δεδομένα με όνομα `data` με τα περιεχόμενα μιας αποθήκης τροφίμων και το κοστολόγιό τους:

```
bananas  100 pieces 1.45
apples   325 boxes  1.18
pears     34 kilos  2.46
bread     62 kilos  0.60
ham       85 kilos  3.56
```

Η εντολή

```
> cat data
```

απλά τυπώνει τα περιεχόμενα στο `stdout`. Η εντολή παίρνει τα αρχεία από το όρισμα της εντολής ή αν δε δοθούν το `stdin` και τυπώνει τα περιεχόμενά τους στο `stdout`. Αφού αυτά μπορεί να επαναοριστούν η εντολή

```
> cat <  data > data1
```

παίρνει τα περιεχόμενα του αρχείου `data` από το `stdin` και τα τυπώνει στο `stdout` που εδώ έχει επαναοριστεί να είναι το αρχείο data1. Η εντολή έχει ισοδύναμο αποτέλεσμα με την

```
> cp data data1
```

Η εντολή

```
> cat data data1 > data2
```

τυπώνει πρώτα τα περιεχόμενα του data και μετά του data1 μέσα στο αρχείο data2.

Η εντολή

```
> less data
```

τυπώνει στο stdout τα περιεχόμενα του data σελίδα-σελίδα. Φυσικά εδώ τα αρχείο είναι μικρό, δοκιμάστε με ένα μεγαλύτερο του οποίου τα περιεχόμενα δεν χωρούν σε μια οθόνη του τερματικού. Πατήστε [space] για να προχωρήστε μια σελίδα, [b] για να γυρίστε πίσω μια σελίδα και τα πάνω/κάτω βελάκια για να προχωρήστε μια γραμμή. Με [g] πάτε στην αρχή του αρχείου και με [G] στο τέλος. Με [h] παίρνετε βοήθεια και με [q]... αναχωρείτε (quit).

Με τις εντολές

```
> head -n 1 data
bananas  100 pieces 1.45
> tail -n 2 data
bread     62 kilos  0.60
ham       85 kilos  3.56
> tail -n 2 data | head -n 1
bread     62 kilos  0.60
```

παίρνουμε την πρώτη γραμμή του αρχείου data, τις δύο τελευταίες και την δεύτερη από το τέλος αντίστοιχα. Προσέξτε πώς με piping των δύο εντολών τις συνδυάσαμε για να φτιάξουμε το φίλτρο "τύπωσε τη δεύτερη γραμμή από το τέλος ".

Η εντολή sort τυπώνει τα περιεχόμενα του αρχείου κατά αύξουσα διάταξη των γραμμών, όπου η σύγκριση γίνεται χαρακτήρα–χαρακτήρα (όχι αριθμητικά):

```
> sort data
apples   325 boxes  1.18
bananas  100 pieces 1.45
bread     62 kilos  0.60
ham       85 kilos  3.56
pears     34 kilos  2.46
```

Για αντίστροφη διάταξη δοκιμάστε την εντολή `sort -r data`. Για να διατάξουμε τα περιεχόμενα συγκρίνοντας τους αριθμούς στη δεύτερη στήλη χρησιμοποιούμε το διακόπτη `-k 2` (=δεύτερη στήλη) και `-n` (=αριθμητική – numerical – διάταξη):

```
> sort -k 2 -n data
pears     34 kilos  2.46
bread     62 kilos  0.60
ham       85 kilos  3.56
bananas  100 pieces 1.45
apples   325 boxes  1.18
```

Αν αμελήσω το διακόπτη `-n` οι γραμμές συγκρίνονται με βάση τους χαρακτήρες της λέξης στη δεύτερη στήλη:

```
> sort -k 2 data
bananas  100 pieces 1.45
apples   325 boxes  1.18
pears     34 kilos  2.46
bread     62 kilos  0.60
ham       85 kilos  3.56
```

Η τελευταία στήλη έχει αριθμούς με υποδιαστολή (όχι ακεραίους). Για να κάνουμε τη διάταξη με βάση την αξία τέτοιων αριθμών βάζουμε το διακόπτη `-g`:

```
> sort -k 4 -g data
bread     62 kilos  0.60
apples   325 boxes  1.18
bananas  100 pieces 1.45
pears     34 kilos  2.46
ham       85 kilos  3.56
```

Η εντολή `grep` αναλύει ένα αρχείο κειμένου γραμμή–γραμμή αναζητώντας μια ακολουθία χαρακτήρων που έχουμε ζητήσει. Κάθε τέτοια γραμμή που βρίσκει την τυπώνει στο `stdout`:

```
> grep kilos data
pears     34 kilos  2.46
bread     62 kilos  0.60
ham       85 kilos  3.56
```

τυπώνει κάθε γραμμή που έχει το "kilos". Αν θέλουμε να τυπώνει κάθε γραμμή που *δεν* περιέχει το kilos προσθέτουμε το διακόπτη `-v`:

```
> grep -v kilos data
bananas  100 pieces 1.45
apples   325 boxes  1.18
```

Η ακολουθία χαρακτήρων που αναζητούμε μπορεί να είναι ένα regular expression. Για να περιγράψουμε τα θηρία αυτά, θέλουμε μισό βιβλίο... Μερικά παραδείγματα:

```
> grep ^b data
bananas  100 pieces 1.45
bread     62 kilos  0.60
> grep '0$' data
bread     62 kilos  0.60
> grep '3[24]' data
apples   325 boxes  1.18
pears     34 kilos  2.46
```

Η πρώτη τυπώνει τις γραμμές που *αρχίζουν* από b (αγνοεί την 2η γραμμή), η δεύτερη αυτές που *τελειώνουν* σε 0 (αγνοεί την πρώτη γραμμή) ενώ η τρίτη γραμμές που περιέχουν τις ακολουθίες χαρακτήρων 32 ή 34 (αγνοεί την τελευταία γραμμή).

Το πιο δυνατό όμως εργαλείο για ανάλυση είναι το πρόγραμμα awk. Στην πιο απλή του χρήση, αναλύει το αρχείο γραμμή–γραμμή και ορίζει μεταβλητές $1, $2, ... στις οποίες αποθηκεύει την τιμή της πρώτης, δεύτερης, ... λέξης της γραμμής. Στη μεταβλητή $0 αποθηκεύει όλη τη γραμμή ενώ η μεταβλητή NF μετράει τον αριθμό των λέξεων στη γραμμή. Η μεταβλητή NR μετράει τις γραμμές που έχει επεξεργαστεί μέχρι στιγμής.

Ένα πρόγραμμα awk μπορεί να γραφτεί στη γραμμή εντολών. Είναι εντολές που περικλείονται ανάμεσα σε αγκύλες { ... } εκτελούνται για κάθε γραμμή του αρχείου. Ειδική περίπτωση αποτελούν οι εντολές που γράφονται μέσα στο κατασκεύμασμα BEGIN{ ... } και END{ ... } που είναι εντολές που εκτελούνται μια φορά πριν την επεξεργασία και μετά την επεξεργασία των γραμμών του αρχείου. Για παράδειγμα η εντολή:

```
> awk '{print $1,"total value= ",$2*$4}' data
bananas total value=  145
apples  total value=  383.5
pears   total value=  83.64
bread   total value=  37.2
ham     total value=  302.6
```

τυπώνει το είδος (1η στήλη= $1) και την συνολική αξία του ποσότητα (2η στήλη= $2) × αξία μονάδας (4η στήλη= $4). Άλλα παραδείγματα είναι

```
> awk '{value += $2*$4}END{print "Total= ",value}' data
Total=  951.94
> awk '{av += $4}END{print "Average Price= ",av/NR}' data
Average Price=  1.85
> awk '{print $2^2 * sin($4) + exp(-$4)}' data
```

Στην πρώτη εντολή υπολογίζουμε τη συνολική αξία των προϊόντων: Σε κάθε γραμμή προσθέτουμε (+=) στη μεταβλητή `value` την συνολική αξία του προϊόντος. Στο τέλος (END{ ... }) τυπώνουμε το άθροισμα που συσσωρεύσαμε στο τέλος του αρχείου. Η δεύτερη εντολή τυπώνει τη μέση τιμή των τιμών. Με τον ίδιο τρόπο προσθέτουμε στη μεταβλητή `av` την τιμή κάθε προϊόντος (2η στήλη= $2) και στο τέλος τυπώνουμε το σύνολο δια τον αριθμό των προϊόντων (=αρ. γραμμών = `NR`). Η τελευταία εντολή κάνει μια αυθαίρετη αριθμητική πράξη: Τυπώνει το τετράγωνο της δεύτερης στήλης επί το ημίτονο της τέταρτης και προσθέτει το εκθετικό της -4ης στήλης.

Οι δυνατότητες των παραπάνω εργαλείων δεν εξαντλείται σε ένα μικρό κεφάλαιο. Διαβάστε τις man και info pages και θα μάθετε να τις κάνετε να ψήνουν και ... καφέ!

1.3 Ο Καλύτερος Φίλος του Ανθρώπου

Όχι, δεν είμαστε της φιλοζωικής, για editors[19] μιλάμε... Δεν υπερβάλλουμε όμως, για έναν προγραμματιστή που προγραμματίζει αρκετές ώρες κάθε μέρα, το περιβάλλον και τα εργαλεία επεξεργασίας του κειμένου των εντολών προγραμματισμού καθορίζουν κατά ένα σημαντικό ποσοστό τη συνολική ...ποιότητα της ζωής του/της. Και όπως βλέπετε είμαστε αρκετά προσεκτικοί στη διατύπωση: Δε μιλάμε για προγράμματα επεξεργασίας κειμένου εγγράφων (λ.χ. Open Office[20]) που δίνουν έμφαση στη φόρμα του κειμένου αλλά για επεξεργαστές απλού κειμένου που αποτελείται από σκέτους (χωρίς φόρμα) χαρακτήρες που "διαβάζονται". Παραδείγματα απλών τέτοιων επεξεργαστών στο Linux είναι οι επεξεργαστές gedit, vi, pico, nano κλπ που θα μπορούσε κανείς να χρησιμοποιήσει εναλλακτικά για την επεξεργασία του κώδικα

[19] editor= πρόγραμμα επεξεργασίας κειμένου

[20] Υπάρχει κι άλλο?

στα προγράμματα που παρουσιάζουμε στο μάθημα. Με αυτούς μπορεί κάποιος εύκολα να επεξεργαστεί απλά προγράμματα έχοντας βασικές λειτουργίες επεξεργασίας κειμένου (editing). Υπάρχουν λειτουργίες σε ένα επεξεργαστή κειμένου που κάνει τον προγραμματισμό ανετότερο και βοηθά στην ... υγιεινή κρατώντας μακριά τα ενοχλητικά ... έντομα! Λ.χ. η αναγνώριση από τον επεξεργαστή των εντολών της γλώσσας προγραμματισμού, των μεταβλητών, των δομικών στοιχείων επιτρέπει την "όμορφη" παρουσίασή τους με κατάλληλο χρωματισμό ή/και font, επισημαίνει σφάλματα όταν δεν κλείνουν παρενθέσεις ή οι εντολές δεν μπαίνουν στο σωστό σημείο στο αρχείο του προγράμματος κλπ. Ένας "πολύγλωσσος" και "πολυμορφικός" επεξεργαστής κειμένου με πολλές δυνατότητες και ευκολίες για τον προγραμματιστή είναι ο GNU Emacs editor[21]. Ο Emacs είναι ανοιχτό λογισμικό, διατίθεται ελεύθερα και μπορεί να εγκατασταθεί σε λειτουργικό σύστημα Linux, Mac και MS Windows. Ο χρήστης μπορεί να τον προγραμματίσει[22] να εκτελεί απλές αλλά και σύνθετες λειτουργίες της αρεσκείας του/της καθώς και να έχει μια σχεδόν ολοκληρωμένη αλληλεπίδραση με το λειτουργικό σύστημα και πολλές από τις εφαρμογές που βρίσκονται σε αυτό. Ο πιο προχωρημένος χρήστης μπορεί λ.χ. να επεξεργαστεί ένα αρχείο σε γλώσσα Fortran να το μεταγλωττίσει και να το διορθώσει με τη βοήθεια του debugger δίνοντας εντολές μέσα από τον Emacs.

Για τον προγραμματισμό πολύπλοκων προγραμμάτων με πολλές χιλιάδες γραμμές κώδικα και πολύπλοκο συσχετισμό διεργασιών είναι συνηθισμένο να χρησιμοποιούνται εξειδικευμένα περιβάλλοντα προγραμματισμού. Αυτά προσφέρουν στον προγραμματιστή ολοκληρωμένες λύσεις για τον προγραμματισμό σε μια γλώσσα (λ.χ. C++, Java κλπ) ενσωματώνοντας σε ένα απλό interface και τις λειτουργίες μεταγλωττισμού, debugging, βοήθειας κλπ. Το μειονέκτημα σε αυτά είναι η εξειδίκευση που περιορίζει την ελευθερία του προγραμματιστή ως προς την επιλογή γλώσσας, βιβλιοθηκών, λειτουργικού συστήματος και συνήθως έχουν ακριβές άδειες χρήσης. Είναι επίσης δύσχρηστη η μεταφορά των εργασιών ενός προγραμματιστή από έναν υπολογιστή σε έναν άλλο και φυσικά η επεξεργασία του προγράμματος από διαφορετικά περιβάλλοντα προγραμματισμού. Η πολύπλοκη και εξειδικευμένη παραμετροποίησή τους συνήθως "δένει" τον προγραμματιστή και το πρόγραμμα

[21] `http://www.gnu.org/software/emacs/` (main site), `http://www.emacswiki.org/` (expert tips), `http://en.wikipedia.org/wiki/Emacs` (general info)

[22] Ο Emacs είναι γραμμένος σε μια διάλεκτο της γλώσσας προγραμματισμού Lisp που λέγεται Elisp. Για προγραμματισμό απλών λειτουργιών δεν απαιτείται λεπτομερής γνώση της γλώσσας αυτής.

με το συγκεκριμένο πακέτο περιβάλλοντος προγραμματισμού.

1.3.1 Καλώντας τον Emacs

Στη γραμμή εντολών πληκτρολογήστε:

```
> emacs &
```

Προσέξτε το χαρακτήρα & στο τέλος της εντολής. Χωρίς αυτόν το prompt του φλοιού δεν επιστρέφει και δεν μπορούμε να δώσουμε άλλη εντολή από το φλοιό. Με αυτόν η εντολή (όπως και κάθε εντολή την οποία τελειώνουμε με το &) πάει στο "υπόβαθρο" (background) δηλ. ξεκινάει μία διεργασία ανεξάρτητη από το φλοιό η οποία λειτουργεί ακόμα και αν η διεργασία του φλοιού τερματιστεί.

Τα παραπάνω ισχύουν όταν έχουμε παραθυρικό περιβάλλον και τότε ο Emacs ξεκινάει στο δικό του ανεξάρτητο παράθυρο. Μπορούμε όμως να τρέχουμε τον Emacs και σε ένα απλό τερματικό, είτε για γρήγορη επεξεργασία κειμένου είτε γιατί δε διαθέτουμε παραθυρικό περιβάλλον[23] αλλά μόνο κονσόλα. Στην τελευταία περίπτωση απλά παραλείπουμε το & στο τέλος της εντολής, ενώ αν έχουμε παραθυρικό περιβάλλον και θέλουμε ο Emacs να τρέξει στην κονσόλα δίνουμε την εντολή

```
> emacs -nw
```

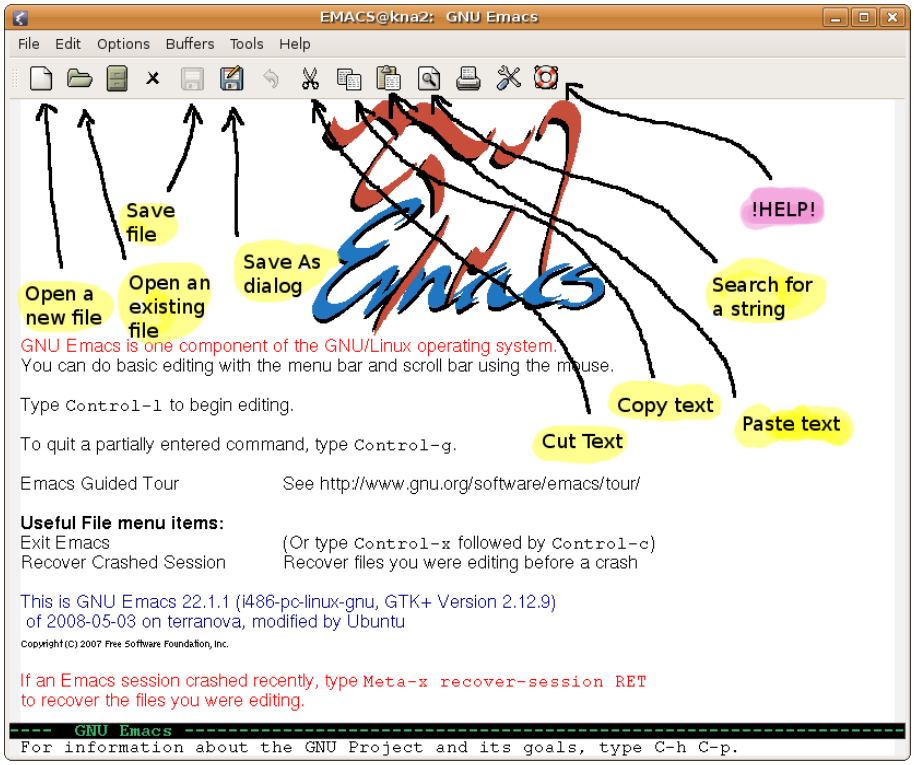
και ο Emacs θα ξεκινήσει μέσα στην κονσόλα.

1.3.2 Αλληλεπιδρώντας με τον Emacs

Με τον Emacs αλληλεπιδρούμε με διάφορους τρόπους. Οι "νεοσύλλεκτοι" θα προτιμήσουν τα κουμπιά και τα μενού που προσφέρει που συνήθως έχουν διαισθητική μορφή και ονόματα που συναντά στους περισσότερους επεξεργαστές κειμένου. Αλλά για να χρησιμοποιήσει κανείς τις προχωρημένες δυνατότητες του Emacs είναι καλό να συνηθίσει τις άλλες μορφές αλληλεπίδρασης που είναι συντομεύσεις πλήκτρων και εκτέλεση εντολών με το όνομά τους από τη γραμμή εντολών του Emacs, το minibuffer[24].

[23] Αυτό μπορούμε να το καταλάβουμε δίνοντας την εντολή `echo $DISPLAY` και αν πάρουμε το μήνυμα σφάλματος `DISPLAY: Undefined variable.` τότε δεν έχουμε σύνδεση με παραθυρικό περιβάλλον (X server). Αλλιώς θα πάρουμε την τιμή `:0.0` , `localhost:10.0` κλπ.

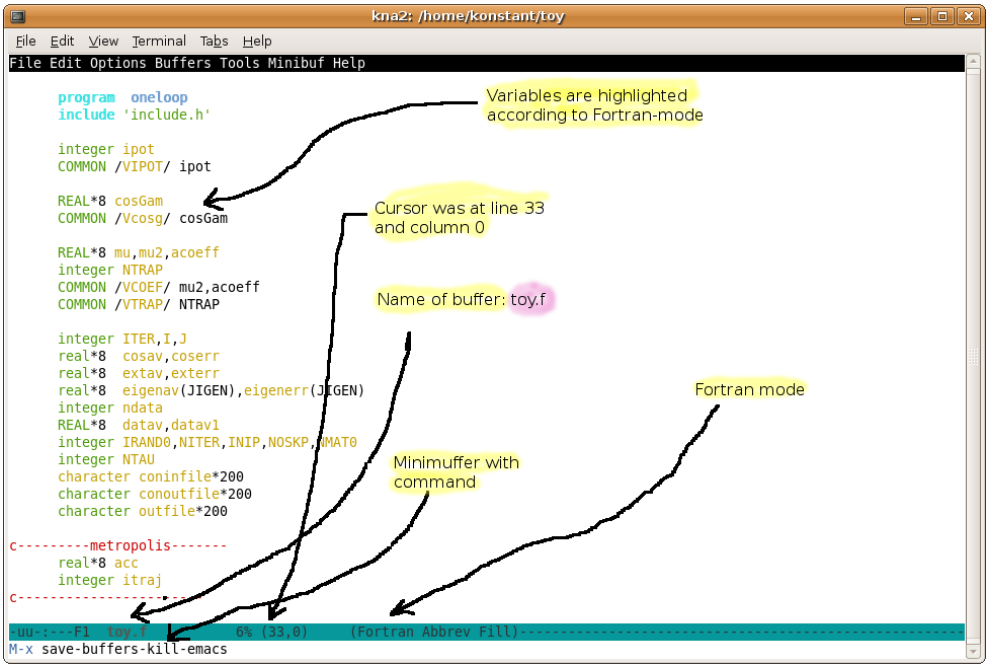
[24] Είναι και ο πιο απλός τρόπος αλληλεπίδρασης όταν καλούμε τον Emacs στην κονσόλα.



Σχήμα 1.2: Το παράθυρο του Emacs σε ένα παραθυρικό περιβάλλον. Φαίνονται και επεξηγούνται τα βασικά κουμπιά λειτουργίας του.

Η εντολές που δίνονται με συντομεύσεις από το πληκτρολόγιο είναι συνδυασμός πλήκτρων που πατά κάποιος σε συνδυασμό με τα πλήκτρα `Ctrl` (`Control key`) και `Alt`. Θα ακολουθήσουμε την εξής σύμβαση: Όταν γράφουμε ένα συνδυασμό πλήκτρων αρχίζοντας με `C-` θα εννοούμε ότι τα πλήκτρα που ακολουθούν πατιούνται ταυτόχρονα με το Control key, ενώ αν γράφουμε `M-` θα εννοούμε ότι τα πλήκτρα που ακολουθούν πατιούνται ταυτόχρονα με το Alt key[25]. Μερικές εντολές συντομεύονται από μια ακολουθία από δύο η παραπάνω χαρακτήρες. Λ.χ. πατώντας `C-x C-c` (δηλ. κρατάμε πατημένο το Ctrl key και ταυτόχρονα πατάμε το `x` και μετά κρατώντας πατημένο το Ctrl key πατάμε το `c`) δίνουμε την εντολή να βγούμε από τον Emacs ενώ πατώντας `C-x 2` (δηλ. κρατάμε

[25]Στη γλώσσα του Emacs το `M-` είναι το "Meta" key το οποίο βρίσκεται εκτός από το Alt και στο Esc (Escape key). Στην περίπτωση αυτή, σε αντίθεση με το Alt, το Esc το πατάμε πρώτα και το αφήνουμε και μετά πατάμε τα επόμενα πλήκτρα. Αυτό μπορεί να είναι και η πιο απλή μας επιλογή σε ορισμένα "χαζά" τερματικά. Αν και αυτό δε δουλεύει – μάλλον σπάνιο στην εποχή μας – δοκιμάστε το `C-[`

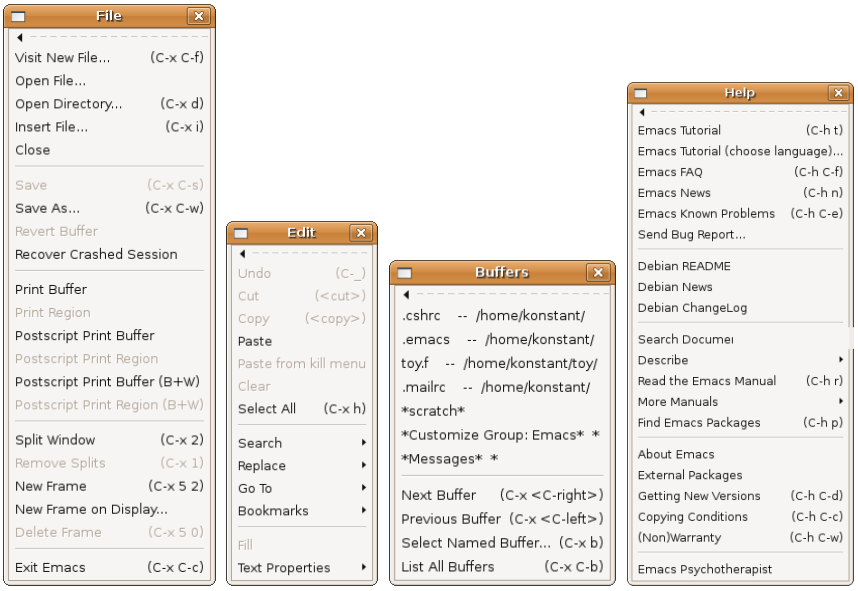


Σχήμα 1.3: Ο Emacs στην κονσόλα. Στην εικόνα έχουμε μεταβεί στο minibuffer πληκτρολογώντας `M-x` και έχουμε γράψει την εντολή `save-buffers-exit-emacs` η οποία τερματίζει τον Emacs αφού σώσει τα μεταβληθέντα από την επεξεργασία buffers. Η ίδια εντολή δίνεται ισοδύναμα πληκτρολογώντας `C-x C-c`. Φαίνεται η mode line στην οποία, ανάμεσα σε άλλα, είναι γραμμένο το όνομα του αρχείου/buffer (toy.f), το ποσοστό του buffer που είναι ορατό στο παράθυρο (6%), η γραμμή και η στήλη που βρίσκεται το σημείο που επεξεργαζόμαστε (33,0) και το editing mode που βρίσκεται ο buffer (`Fortran mode (Fortran)`, `Abbreviation mode (Abbrev)`, `Auto Fill mode (Fill)`).

πατημένο το Ctrl key και ταυτόχρονα πατάμε το x και μετά *αφήνουμε* το Ctrl key και πατάμε το 2) δίνουμε την εντολή να χωριστεί το παράθυρο του buffer που βρισκόμαστε σε δύο ίσα μέρη.

Οι πιο χρήσιμες συντομεύσεις είναι οι `M-x` (πατάμε το Alt και κρατώντας το πατημένο πατάμε το x) και η `C-g`. Η πρώτη μας οδηγεί στο minibuffer από όπου μπορούμε να δώσουμε μία εντολή με το όνομά της. Για παράδειγμα δώστε την εντολή `save-buffers-exit-emacs` που απλά θα τερματίσει τη συνεδρία του Emacs. Η δεύτερη είναι το "κουμπί SOS" που διακόπτει οτιδήποτε κάνει ο Emacs (λ.χ. αν κάποια εντολή κολλήσει, δώσουμε λάθος εντολή κλπ): Πατώντας `C-g` ο Emacs σταματάει οποιαδήποτε διεργασία κάνει και επιστρέφει στο buffer που εργαζόμαστε. Λ.χ. αν πατήστε κατά λάθος `M-x` και βρεθείτε στο minibuffer χωρίς να το θέλετε πατήστε `C-g` για να ακυρώσετε τη διαδικασία και

να επιστρέψετε στο buffer που επεξεργαζόσαστε.



Σχήμα 1.4: Τα βασικά μενού που συναντά κανείς στον Emacs σε παραθυρικό περιβάλλον. Βλέπουμε τις βασικές εντολές και σε παρένθεση μας υπενθυμίζεται η αντίστοιχη συντόμευση πληκτρολογίου. Λ.χ. η εντολή `File` → `Visit New File` μπορεί να δοθεί από το πληκτρολόγιο πληκτρολογώντας `C-x C-f`. Σημειώστε τις εντολές `File` → `Visit New File` (άνοιγμα αρχείου), `File`→`Save` (εγγραφή αλλαγών του buffer στο αντίστοιχο αρχείο, `File`→`Exit Emacs` (κλείσιμο Emacs), File → Split Window (χωρισμός παραθύρου στα δύο), `File`→`New Frame` (άνοιγμα νέου παραθύρου) και φυσικά τις γνωστές εντολές `Cut`, `Copy`, `Paste`, `Undo` από το `Edit` menu. Από το μενού `Buffers` μπορούμε να επιλέξουμε διαφορετικά buffers με τα περιεχόμενα των άλλων αρχείων που επεξεργαζόμαστε. Στους καινούργιους χρήστες συστήνουμε να δουν το `Emacs Tutorial` και `Read Emacs Manual` στο `Help` menu.

Είναι επίσης χρήσιμο να ορίσουμε συμβάσεις που να υποδηλώνουν τι κάνουμε με το ποντίκι. Με `Mouse-1`, `Mouse-2`, `Mouse-3` υποδηλώνουμε ένα απλό κλικ με το αριστερό, μεσαίο[26], και δεξί κουμπί αντίστοιχα. Με `Drag-Mouse-1` υποδηλώνουμε ότι κρατάμε το αριστερό κουμπί διαρκώς κρατημένο και ταυτόχρονα σέρνουμε το ποντίκι.

Ανακεφαλαιώνουμε συνοψίζοντας τους δυνατούς τρόπους να δίνουμε μία εντολή στον Emacs. Θεωρούμε λ.χ. την εντολή που ανοίγει ένα καινούργιο αρχείο σε ένα buffer:

- Από το εικονίδιο που μοιάζει με λευκό χαρτί επάνω αριστερά στη γραμμή των κουμπιών του Σχήματος 1.2

[26] Αν το ποντίκι δεν έχει μεσαίο κουμπί πατάμε τη ροδέλα. Αν δεν έχει ροδέλα τότε το αριστερό και το δεξί κουμπί ταυτόχρονα.

- Από την εντολή μενού `File→Visit New File`.
- Από τη συντόμευση πληκτρολογίου `C-x C-f`
- Από εντολή στο minibuffer: `M-x find-file`

Ο πρώτος τρόπος είναι διαθέσιμος για τις πολύ βασικές εντολές, ο δεύτερος για περισσότερες, ο τρίτος για τις περισσότερες (αλλά όχι όλες) και ο τέταρτος για όλες τις εντολές που είναι διαθέσιμες για διαδραστική χρήση.

1.3.3 Βασική Επεξεργασία Κειμένου

Για να επεξεργαστούμε ένα αρχείο, ο Emacs τοποθετεί τα περιεχόμενά του σε ένα buffer. Το buffer είναι ένα κομμάτι της μνήμης όπου *αντιγράφονται* τα περιεχόμενα ενός αρχείου και όχι το ίδιο το αρχείο. Για να καταγραφούν οι αλλαγές στα περιεχόμενα ενός buffer πρέπει να τις "σώσουμε", δηλ. ο Emacs να γράψει το buffer πίσω στο αρχείο. Μέχρι να γίνει αυτό το αρχικό αρχείο μένει ανέπαφο[27]. Ο Emacs μπορεί να έχει ανοιχτά πολλά buffers τα οποία όταν συνδέονται με ένα αρχείο έχουν από προεπιλογή το ίδιο όνομα του αρχείου[28]. Το όνομα ενός buffer φαίνεται στη mode line του Emacs όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.3. Ο κύκλος επεξεργασίας ενός αρχείου συνοψίζεται στα εξής σημεία:

- Διάβασμα των περιεχομένων του αρχείου σε ένα buffer.
- Αλλαγή από το χρήστη των περιεχομένων του buffer.
- Εγγραφή των δεδομένων του buffer πίσω στο αρχείο.

Φυσικά αν το αρχείο δεν υπάρχει και δημιουργείται εξ' αρχής, το πρώτο βήμα παραλείπεται.

Το σημείο στο οποίο βρισκόμαστε νοητά και εισάγουμε κείμενο λέγεται "το σημείο" (point). Αυτό καταδεικνύεται από το δρομέα (cursor)

[27] Αν χάσουμε μία συνεδρία του Emacs είναι δυνατόν να ανακτήσουμε μέρος των αλλαγών που κάναμε. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την εντολή `M-x recover-file` ή να αναζητήσουμε ένα αρχείο στο δίσκο με όνομα ίδιο με αυτό του αρχείου που επεξεργαζόμαστε ανάμεσα σε δύο #. Λ.χ. το buffer του αρχείου `file.f` σώζεται αυτόματα και περιοδικά στο αρχείο `#file.f#`

[28] Αυτό δεν είναι αναγκαστικό. Μπορεί ο χρήστης να αλλάξει το όνομα ενός buffer χωρίς να αλλάξει το αρχείο με το οποίο συνδέεται. Επίσης αν ανοίξουμε αρχεία που έχουν το ίδιο όνομα (λ.χ. `index.html`) που βρίσκονται σε διαφορετικούς καταλόγους, τότε αυτά ονομάζονται από προεπιλογή `index.html`, `index.html<2>`, `index.html<3>`, ...

που τυπικά είναι ένα κόκκινο τετραγωνάκι που αναμοσβήνει[29]. Κάθε buffer έχει μία θέση που ονομάζεται "το σημάδι" (the mark) το οποίο μαζί με το σημείο ορίζει σε κάθε παράθυρο την "περιοχή" (the region). Αυτή είναι μια νοητή περιοχή κειμένου σε κάθε παράθυρο όπου μπορούν να δράσουν οι συναρτήσεις του Emacs (λ.χ. αποκοπή, αντιγραφή, αλλαγή κεφαλαίων σε μικρά γράμματα, έλεγχος ορθογραφίας κλπ). Την περιοχή τη θέτουμε ορίζοντας το σημάδι (mark) επιλέγοντας ένα σημείο και πληκτρολογώντας `C-SPC`[30] (ή στο minibuffer `M-x set-mark-command`). Μετακινώντας το δρομέα στο σημείο που θέλουμε ορίζουμε την επιθυμητή περιοχή. Εναλλακτικά με το `Drag-Mouse-1` (κρατάμε αριστερό κουμπί ποντικιού πατημένο και σέρνουμε το ποντίκι) μαρκάρουμε μία περιοχή. Το σημάδι μπορεί να τεθεί και με `Mouse-3` δηλ με απλό κλικ του δεξιού πλήκτρου του ποντικιού (άρα `Mouse-1 Mouse-3` ορίζει μία περιοχή θέτοντας πρώτα το σημείο και μετά το σημάδι).

Ανοίγουμε ένα αρχείο με την εντολή `C-x C-f` και πληκτρολογώντας το όνομά του. Αν το αρχείο υπάρχει βλέπουμε τα περιεχόμενά του στο buffer που δημιουργείται, αλλιώς παίρνουμε ένα άδειο buffer. Τότε:

- Πλοηγούμαστε στο buffer με τα βελάκια του πληκτρολόγιου. Εναλλακτικά με τις εντολές `C-n`, `C-p`, `C-f` και `C-b`.
- Αν έχουμε πολλές "σελίδες " προχωράμε μία-μία σελίδα με `Page Up`, `Page Dn` από το πληκτρολόγιο. Εναλλακτικά με τις εντολές `C-v`, `M-v`
- Εισάγουμε κείμενο απλά πληκτρολογώντας το.
- Σβήνουμε τους χαρακτήρες που βρίσκονται πίσω από το σημείο με το `Backspace` και αυτούς που είναι μπροστά με το `Delete`. Με την εντολή `C-d` σβήνουμε τον μπροστινό χαρακτήρα.
- Σβήνουμε ολόκληρη τη γραμμή που είναι μπροστά από το σημείο με `C-k`
- Ανοίγουμε μια καινούργια γραμμή με `Enter` ή `C-o`
- Πάμε στην αρχή της γραμμής με το πλήκτρο `Home` και στο τέλος της με το πλήκτρο `End`. Εναλλακτικά με `C-a` και `C-e` αντίστοιχα.

[29] Το σημείο είναι πάντα *μεταξύ* χαρακτήρων όχι πάνω σε αυτούς. Ο δρομέας είναι πάνω στο χαρακτήρα αμέσως δεξιά από το σημείο. Κάθε παράθυρο έχει ένα σημείο οπότε κάθε buffer μπορεί να έχει περισσότερα από ένα σημεία αν εμφανίζεται σε διαφορετικά παράθυρα.

[30] Πατάμε ταυτόχρονα το `Control key` και το `Space bar`

- Πάμε στην αρχή του buffer με το πλήκτρο `C-Home` και στο τέλος με `C-End`. Εναλλακτικά με τις εντολές στο minibuffer: `M-x beginning-of-buffer` και `M-x end-of-buffer`.

- Πάμε σε μια γραμμή που θέλουμε με `M-x goto-line`. Στην προτροπή της εντολής δίνουμε τον αριθμό της γραμμής που θέλουμε να πάμε.

- Αναζητούμε κείμενο μπροστά από το σημείο με την εντολή `C-s`. Πληκτρολογούμε το κείμενο μέχρι να το βρούμε. Για να βρούμε το ίδιο κείμενο ξανά (και ξανά) πληκτρολογούμε `C-s` όσες φορές χρειαστεί. Το ίδιο κάνουμε με το `C-r` για να αναζητήσουμε κείμενο *πίσω* από το σημείο.

- Αν θέλουμε να γράψουμε Ελληνικά, διαβάζουμε την Παράγραφο 1.3.10, σελ. 36

Μόλις τελειώσουμε σώζουμε τις αλλαγές που κάναμε με την εντολή `C-s` ή από το εικονίδιο "δισκέτα" ή από το μενού `File`→`Save`. Επίσης η εντολή στο minibuffer είναι `M-x save-buffer`.

1.3.4 Κόβοντας και ράβοντας

Για πιο προχωρημένη επεξεργασία ακολουθούμε τις παρακάτω οδηγίες:

- SOS: Undo!. Πολλές από τις παρακάτω αλλαγές μπορεί να είναι καταστροφικές. Ο Emacs έχει επαναλαμβανόμενο undo με μεγάλη μνήμη. Πατώντας `C-/` επανειλημμένα προσεγγίζουμε την προηγούμενη κατάσταση που βρισκόμαστε. Εναλλακτικά με `C-x u` και από το μενού `Edit`→`Undo`. Θυμίζουμε ότι το `C-g` σταματάει οποιαδήποτε λειτουργία του Emacs και έτσι μπορεί να μας γλυτώσει από μέρος μίας καταστροφής αν διακόψουμε το έγκλημα κατά τη διάρκεια που εκτελείται.

- Αποκοπή κειμένου με το ποντίκι: Κάνουμε κλικ `Mouse-1` στην αρχή του κειμένου που θέλουμε να αποκόψουμε μετά κλικ `Mouse-3` στο τέλος του κειμένου. Αμέσως μετά ένα δεύτερο κλικ `Mouse-3` και ... πάει (στην πραγματικότητα το κείμενο αντιγράφεται στο Kill ring[31] και είναι διαθέσιμο για επικόλληση).

[31] Ας πούμε το clipboard του Emacs

- Αποκοπή κειμένου από το πληκτρολόγιο: Επιλέγουμε το αρχικό σημείο και θέτουμε το σημάδι (mark) με `C-SPC`. Μετακινούμε το δρομέα αμέσως μετά το σημείο που θέλουμε να θέσουμε ως τέλος της περιοχής. Πληκτρολογούμε `C-w`.

- Αντιγραφή κειμένου με το ποντίκι: Σέρνουμε το ποντίκι `Drag-Mouse-1` από την αρχή ως το τέλος. Η περιοχή "φωτίζεται". Εναλλακτικά όπως στην αποκοπή χωρίς το δεύτερο κλικ στο τέλος: `Mouse-1` στην αρχή και `Mouse-3` στο τέλος.

- Αντιγραφή κειμένου με το πληκτρολόγιο: `C-SPC` στην αρχή, μετακινούμαστε το τέλος της περιοχής και μετά `M-w`.

- Επικόλληση κειμένου με το ποντίκι: Στο σημείο που θέλουμε να κάνουμε την εισαγωγή, πατάμε το μεσαίο κουμπί[32].

- Επικόλληση κειμένου με το πληκτρολόγιο: Στο σημείο που θέλουμε να κάνουμε εισαγωγή `C-y`

- Επικόλληση κειμένου που είχαμε αντιγράψει παλιότερα: Μία εύκολη επιλογή είναι από το μενού `Edit→Paste from kill menu` και επιλέγουμε το κείμενο που θέλουμε να επικολλήσουμε. Από το πληκτρολόγιο όπως πριν `C-y` και αμέσως μετά `M-y` επανειλημμένα μέχρι να εμφανιστεί το κείμενο που θέλουμε.

- Εισαγωγή ολόκληρου αρχείου: Αν θέλουμε να εισάγουμε τα περιεχόμενα ενός ολόκληρου αρχείου πληκτρολογούμε `C-x i` στο σημείο που θέλουμε να γίνει η εισαγωγή. Εναλλακτικά με την εντολή `M-x insert-file`.

- Εισαγωγή ολόκληρου buffer: Αν θέλουμε να εισάγουμε τα περιεχόμενα ενός ολόκληρου buffer το κάνουμε με την εντολή `M-x insert-buffer`.

- Αντικατάσταση κειμένου: Με την εντολή `M-x query-replace` αντικαθιστούμε διαδραστικά μία ακολουθία χαρακτήρων με μία άλλη. Στην ερώτηση αν θέλουμε να γίνει η αντικατάσταση απαντούμε y (ναι), n (όχι), q (στοπ). Με , (κόμμα) γίνεται μία αντικατάσταση και σταματάει. Αν είμαστε σίγουροι ότι θέλουμε να γίνουν όλες οι αντικαταστάσεις εκτελούμε την εντολή `M-x replace-string`.

[32] Αν δεν έχει, τη ροδέλα ή αριστερό και δεξί ταυτόχρονα.

- Αντικατάσταση κεφαλαίων-μικρών γραμμάτων: Επιλέγουμε μία περιοχή που θέλουμε να γίνει η αλλαγή και εκτελούμε μία από τις εντολές `M-x upcase-region`, `M-x capitalize-region`, `M-x downcase-region`.

Το `Edit` μενού έχει πολλές από τις παραπάνω λειτουργίες για τους νεοσύλλεκτους.

Τίποτα επίσης δε μας εμποδίζει οι αποκοπές, αντιγραφές, επικολλήσεις να γίνονται από το ένα παράθυρο στο άλλο ακόμα και αν πρόκειται για buffer συνδεδεμένα με διαφορετικά αρχεία.

1.3.5 Παράθυρα

Πολλές φορές είναι βολικό να επεξεργαζόμαστε το ίδιο ή διαφορετικά αρχεία σε διαφορετικά παράθυρα. Το "παράθυρο" (window) στον Emacs αναφέρεται σε διαφορετικές περιοχές του *ίδιου* παράθυρου με την έννοια που δίνουμε σε ένα παραθυρικό περιβάλλον. Ο Emacs μπορεί να χωρίσει ένα παράθυρο σε ένα ή περισσότερα παράθυρα οριζόντια ή κάθετα. Μελετήστε το Σχήμα 1.5 στη σελίδα 63 στο οποίο επεξηγούνται οι βασικές έννοιες. Επίσης μπορεί να ανοίξει ένα διαφορετικό παράθυρο με την έννοια του παραθυρικού περιβάλλοντος τα οποία λέγονται "πλαίσια" (frames)[33]. Θα κρατήσουμε αυτή την ορολογία όταν αναφερόμαστε στον Emacs.

- Τοποθέτηση δρομέα στο κέντρο παραθύρου και καθαρισμός παράθυρου από σκουπίδια: `C-l`
- Χωρισμός παράθυρου στα δύο οριζόντια: `C-x 2`
- Χωρισμός παράθυρου στα δύο κάθετα: `C-x 3`
- Κατάργηση των άλλων παράθυρων: `C-x 1`
- Κατάργηση του τρέχοντος παράθυρου: `C-x 0`
- Μετακίνηση δρομέα σε άλλο παράθυρο: Με `Mouse-1` ή `C-x o`
- Αλλαγή μεγέθους παράθυρων: Με το ποντίκι `Drag-Mouse-1` στις διαχωριστικές γραμμές τους. Με το πληκτρολόγιο `C-^` αλλάζει την οριζόντια διάσταση και `C-}` την κάθετη.

[33] Να σημειώσουμε πως όταν θέλετε να επεξεργαστείτε ένα ή περισσότερα αρχεία είναι καλό να ανοίγετε καινούργια πλαίσια στην *ίδια* συνεδρία του Emacs και όχι να ξεκινάτε κάθε φορά τον Emacs από την αρχή. Μια καινούργια διαδικασία Emacs τραβάει πόρους από το σύστημά σας και δεν επικοινωνεί με μία άλλη.

- Καινούργιο πλαίσιο: `C-x 5 2`
- Κατάργηση πλαισίου: `C-x 5 0`
- Μετακίνηση δρομέα σε άλλο πλαίσιο: Με το ποντίκι `Mouse-1` ή με `C-x 5 o`.

Διαφορετικά παράθυρα μπορείτε να έχετε και όταν ο Emacs τρέχει στην κονσόλα, κάτι που μπορεί να είναι η μεγαλύτερη ευλογία για προχωρημένη επεξεργασία κειμένου όταν δε βρίσκεστε σε παραθυρικό περιβάλλον. Φυσικά τότε δεν μπορείτε να έχετε διαφορετικά πλαίσια.

1.3.6 Αρχεία και Buffers

- Άνοιγμα αρχείου: `C-x C-f` ή `M-x find-file`.
- Σώσιμο αλλαγών του buffer σε αρχείο: `C-x C-s` ή `M-x save-buffer`. Αν θέλουμε ταυτόχρονα να βγούμε από τον Emacs `C-x C-c` ή `M-x save-buffers-kill-emacs` (στο μενού `File`→`Save` ή εικονίδιο με δισκέτα).
- Σώσιμο αλλαγών σε buffer σε άλλο αρχείο: `C-x C-w` ή `M-x write-file` (στο μενού `File`→`Save As` ή στο εικονίδιο με δισκέτα και μολύβι).
- Σώσιμο όλων των buffers στα αρχεία τους: `C-x s` ή `M-x save-some-buffers`.
- Σύνδεση ενός buffer με ένα (άλλο) αρχείο: `M-x set-visited-file-name`.
- Κατάργηση buffer: `C-x k`
- Αλλαγή buffer στο παράθυρο που βρισκόμαστε: `C-x b`
- Προβολή λίστας buffer: Από το μενού Buffers ή με την εντολή `C-x C-b`. Στη δεύτερη περίπτωση πατώντας `Enter` δίπλα σε ένα buffer το εμφανίζουμε στο παράθυρο. Υπάρχουν εντολές διαχείρισης των buffers που μπορείτε να βρείτε από τη βοήθεια του Emacs (αν βάλετε το δρομέα στο παράθυρο αυτό πληκτρολογήστε `C-h m`)
- Ανάκτηση δεδομένων από επεξεργασμένο buffer: Αν χάσατε τη συνεδρία ενός Emacs μην απελπίζεστε. Στην καινούργια συνεδρία πληκτρολογήστε `M-x recover-file` και ακολουθήστε τις οδηγίες. Η εντολή `M-x recover-session` επαναφέρει όλα τα αρχεία που επεξεργαζόσαστε μαζί.

- Αρχεία ασφαλείας: Όταν σώζετε ένα buffer σε ένα αρχείο, το παλιό αρχείο γίνεται αντίγραφο ασφάλειας. Αν το αρχείο έχει όνομα `myfile` το αντίγραφο ασφαλείας έχει όνομα myfile~. Είναι δυνατόν να παραμετροποιήσετε τον Emacs να κρατάει πολλές "εκδόσεις" (versions) των αλλαγών που κάνετε. Σας παραπέμπουμε στην τεκμηρίωση.

- Πλοήγηση και δράσεις σε καταλόγους: `C-x d` ή `M-x dired`. Μπορείτε να δράσετε στα αρχεία του καταλόγου (άνοιγμα, διαγραφή, αλλαγή ονομασίας, αντιγραφή κλπ) με τις ανάλογες εντολές (μέσα από το παράθυρο του `dired` δώστε την εντολή `C-h m` και διαβάστε τη σχετική τεκμηρίωση).

1.3.7 Modes

Σε κάθε buffer που επισκεπτόμαστε ο Emacs μπορεί να βρίσκεται σε διαφορετικά modes (όχι ένα, αλλά πολλά). Σε διαφορετικά modes οι συντομεύσεις των εντολών από το πληκτρολόγιο μπορεί αν είναι διαφορετικές, ο χρωματισμός των δομικών στοιχείων του buffer διαφορετικός κλπ. Υπάρχουν major modes που είναι μοναδικές για κάθε buffer αλλά και minor modes που μπορεί να συνυπάρχουν αρμονικά μαζί με άλλες major και minor modes. Ο Emacs μπορεί να ξεκινά αυτόματα μία major και μία ή περισσότερες minor modes ανάλογα με το όνομα ή/και το περιεχόμενο του αρχείου που επισκεπτόμαστε. Μπορούμε όμως και εμείς ρητά να επιλέξουμε και να επιβάλλουμε τις modes που επιθυμούμε με τις κατάλληλες εντολές.

Οι modes οι οποίες είναι ενεργές σε ένα buffer σημειώνονται μέσα σε παρένθεση στη mode line (βλ. Σχήμα 1.3 και 1.5).

- `M-x fortran-mode`: Μας ενδιαφέρει ιδιαίτερα στο μάθημα αυτό. Αφορά αρχεία με εντολές στη γλώσσα Fortran και τα πιο χρήσιμα χαρακτηριστικά τις είναι η τοποθέτηση του δρομέα στο κατάλληλο σημείο πατώντας το πλήκτρο `TAB`, ο χρωματισμός των εντολών και των μεταβλητών, η αναγνώριση των δομικών στοιχείων του προγράμματος (subroutines, if, do loops, comments, statement labels κλπ). Μια άλλη ενδιαφέρουσα λειτουργία είναι να πάρει τις εντολές μιας ολόκληρης περιοχής και να τις κάνει σχόλια (comments) δηλ. ανενεργές.

- `M-x c-mode`: Για κώδικα γραμμένο στη γλώσσα C. Ανάλογες modes για γλώσσες προγραμματισμού είναι οι java-mode, perl-mode, awk-

mode, python-mode, makefile-mode, octave-mode, mathematica-mode και άλλες.

- `M-x latex-mode`: Για την επεξεργασία αρχείων που έχουν κείμενο σε LaTeX.

- `M-x text-mode`: Για την επεξεργασία απλών (`.txt`) αρχείων κειμένου.

- `M-x fundamental-mode`: Η βασική mode, όταν δεν υπάρχει καλύτερη...

Minor modes που παρουσιάζουν ενδιαφέρον είναι οι

- `M-x auto-fill-mode`: Όταν μία γραμμή γίνεται πολύ μακριά την κόβει αυτόματα. Σχετική είναι η εντολή `M-x fill-paragraph`.

- `M-x overwrite-mode`: Αντί να εισάγονται οι χαρακτήρες ανάμεσα στους υπάρχοντες, γράφονται από πάνω τους. Δίνοντας την εντολή ξανά αλλάζουμε στην προηγούμενη κατάσταση.

- `read-only mode`: Όταν θέλουμε να επισκεφτούμε ένα πολύτιμο αρχείο που δε θέλουμε να αλλάξουμε κατά λάθος τα περιεχόμενά του μπαίνοντας σε αυτή τη mode ο Emacs απαγορεύει τις αλλαγές. Αυτό μπορεί να γίνει ανοίγοντας ένα αρχείο με την εντολή `C-x C-r` (`M-x find-file-read-only`) ή/και να εναλλάσσουμε τη mode με την εντολή C-x C-q (M-x toggle-read-only). Βλέπε Σχήμα 1.5, το buffer `jack.c` που σημειώνεται στο mode line με %%.

- `M-x flyspell-mode`: Άμεσος έλεγχος ορθογραφίας.

- `M-x font-lock-mode`: Χρωματισμός δομικών στοιχείων του buffer. Συνήθως είναι η προεπιλογή, αν όχι την ενεργοποιούμε (ή την απενεργοποιούμε) με την εντολή.

Σε παραθυρικό περιβάλλον έχουμε τη δυνατότητα να επιλέξουμε modes από την mode line. Με το `Mouse-3` πάνω στο όνομα μιας mode μας δίνονται επιλογές για την (απ)ενεργοποίηση minor modes. Με το Mouse-1 μπορούμε να (απ)ενεργοποιήσουμε την read-only mode κάνοντας κλικ αριστερά στο :%% ή :-- αντίστοιχα. Βλέπε Σχήμα 1.5.

1.3.8 Βοήθεια στον Emacs

Ο Emacs έχει πολύ λεπτομερή online τεκμηρίωση. Στους νέους χρήστες συστήνεται να ακολουθήσουν τις οδηγίες στο emacs tutorial το οποίο εκπαιδεύει το χρήστη στης βασικές εντολές χρήσης και επεξεργασίας κειμένου. Αυτό γίνεται με την εντολή `C-h t` ή από το μενού `Help→Emacs Tutorial`. Αφεθείτε στις οδηγίες και είναι ... διασκεδαστικό. Η man page του (εντολή `man emacs`) έχει συνοπτικές πληροφορίες, κυρίως για τον τρόπο που καλείται ο Emacs από τη γραμμή εντολών.

Πολύ εκτενής τεκμηρίωση βρίσκεται στις `info pages`[34]. Η χρήση του `info` είναι κεφάλαιο βιβλίου από μόνη της, αλλά στο παραθυρικό περιβάλλον του Emacs είναι σχετικά απλή. Με την εντολή `C-h r` (μενού `Help→Read the Emacs Manual`) ανοίγουμε απευθείας τη σελίδα του Emacs. Πατώντας τα πλήκτρα `SPC` και `Backspace` διαβάζουμε την τεκμηρίωση σελίδα–σελίδα. Αλλά στο info έχουμε υπερσυνδέσμους όπως στην πλοήγηση στο διαδίκτυο. Με `Mouse-1` επιλέγετε ένα σύνδεσμο και με τα βελάκια στα εικονίδια μπορείτε να πάτε στον προηγούμενο/επόμενο σύνδεσμο όπως και στην προηγούμενη θέση που είσαστε. Πατώντας πλήκτρα δίνετε εντολές στο info, λ.χ. πατώντας `d` βρίσκεστε στον κεντρικό κατάλογο του info και μπορείτε να δείτε όλες τις εφαρμογές που έχουν info τεκμηρίωση. Με την εντολή `g (info)` (πληκτρολογήστε τους χαρακτήρες όπως τους βλέπετε με τις παρενθέσεις) βρίσκεστε στην τεκμηρίωση του info και εκεί μπορείτε να μάθετε την προχωρημένη χρήση της για να διαβάζετε αποτελεσματικά την τεκμηρίωση των εφαρμογών.

Ο Emacs είναι δομημένος διαισθητικά και φιλικά προς το χρήστη. Τα περισσότερα θα τα μάθετε όχι από προσεκτική μελέτη του εγχειρίδιου χρήσης αλλά από τα ίδια τα ονόματα των εντολών και τη συνοπτική τεκμηρίωσή τους. Όλες οι εντολές του Emacs αποτελούνται από ολόκληρες λέξεις που χωρίζονται με ένα - που σχεδόν σχηματίζουν πλήρεις προτάσεις.

- auto completion εντολών: Οι εντολές αυτοσυμπληρώνονται στο minibuffer πατώντας το πλήκτρο `TAB`. Για παράδειγμα, μεταβείτε στο minibuffer πληκτρολογώντας `M-x`. Πληκτρολογήστε λ.χ. `capi[TAB]` και η εντολή συμπληρώνεται σε `capitalize-`. Πατώντας το `[TAB]` άλλη μια φορά ανοίγει ένα buffer με τις δυνατές επιλογές: `capitalize-region` και `capitalize-word`. Πληκτρολογήστε `r[TAB]` και η εντολή συμπληρώνεται στη μοναδική `capitalize-region`. Για να δείτε όλες

[34] Αν προτιμάτε έγγραφα–βιβλία σε μορφή PDF επισκεφτείτε την ιστοσελίδα του Emacs `www.gnu.org/software/emacs/` και επιλέξτε `Documentation`. Αυτός ο σύνδεσμος τώρα είναι ο `www.gnu.org/software/emacs/manual/emacs.html` από όπου μπορείτε να κατεβάσετε το εγχειρίδιο χρήσης των 600 περίπου σελίδων!

της εντολές που αρχίζουν από s (...πολλές) πληκτρολογήστε M-x s[TAB][TAB]. Επιλέξτε με το ποντίκι το buffer *Completions* και πλοηγηθείτε στις δυνατότητες. Από τα ονόματα των εντολών θα πάρετε ιδέες. Αν έχετε χρόνο πληκτρολογήστε M-x [TAB][TAB] και όλες οι διαθέσιμες εντολές θα είναι στο ... buffer σας!

- Τεκμηρίωση συντομεύσεων πληκτρολογίου: Δεν ξέρετε τι κάνει η εντολή C-s? Κανένα πρόβλημα... Πληκτρολογήστε C-h k και μετά C-s. Αντίστροφα, ξεχάσατε με ποια πλήκτρα συντομεύεται η εντολή save-buffers? Πληκτρολογήστε C-h w και μετά την εντολή.

- Τεκμηρίωση συναρτήσεων: Ψάχνετε μια εντολή λ.χ. save-κάτι-που-ξέχασα? Πληκτρολογήστε C-h f και μετά save-[TAB] να δείτε τις επιλογές. Με Mouse-2 επιλέξτε την εντολή που σας ενδιαφέρει ή πληκτρολογήστε/συμπληρώστε με [TAB] το υπόλοιπο όνομα (λ.χ. save-buffers-kill-emacs) και στο buffer *Help* θα διαβάσετε την τεκμηρίωση της εντολής.

- Τεκμηρίωση μεταβλητών: Με C-h v μπορείτε να μάθετε την τιμή και τη λειτουργία των μεταβλητών στον Emacs.

- Τεκμηρίωση apropos: Δεν θυμάστε ακριβώς το όνομα της εντολής? Κανένα πρόβλημα... Πληκτρολογήστε C-h a και μια λέξη (λ.χ. save) και θα δείτε όλες τις εντολές που περιέχουν τη λέξη αυτή. Περισσότερες πληροφορίες θα πάρετε με C-h d

- Τεκμηρίωση modes: Πληκτρολογώντας C-h m μέσα από ένα buffer παίρνετε πληροφορίες για τις modes που είναι ενεργοποιημένες για το buffer. Θα δείτε εκεί τις ειδικές εντολές που δένονται με τις συντομεύσεις πληκτρολογίου.

- Τεκμηρίωση info: C-h i

- Ξεχάσατε τα παραπάνω ή θέλετε να μάθετε και άλλα? Πληκτρολογήστε C-h ? και πλοηγηθείτε στις επιλογές που σας δίνονται.

1.3.9 Παραμετροποίηση του Emacs

Ο Emacs έχει δυνατότητα παραμετροποίησης σε οποιοδήποτε βάθος: Από την απλή σύνδεση πλήκτρων με εντολές που θέλουμε να συντομεύσουμε μέχρι τον προγραμματισμό πολύπλοκων λειτουργιών στη γλώσσα Elisp. Ο πιο διαδεδομένος τρόπος για τον μέσο χρήστη είναι να εισάγει

τις κατάλληλες εντολές στο αρχείο ∼/.emacs στην προσωπική του περιοχή. Ο Emacs διαβάζει και εκτελεί τις εντολές αυτές πριν ξεκινήσει. Παράδειγμα ενός τέτοιου αρχείου με ενδεικτικές λειτουργίες είναι το παρακάτω:

```
; Define F1 key to save the buffer
(global-set-key [f1]    'save-buffer)
; Define Control-c s to save the buffer
(global-set-key "\C-cs" 'save-buffer)
; Define Meta-s (Alt-s) to interactively search forward
(global-set-key "\M-s"  'isearch-forward)
; Define M-x is         to interactively search forward
(defalias       'is     'isearch-forward)
; Define M-x fm         to set fortran-mode for the buffer
(defun fm()    (interactive) (fortran-mode))
; Define M-x sign       to sign my name
(defun sign()  (interactive) (insert "Konstantinos Anagnostopoulos"))
```

Στα περιεχόμενα του παραπάνω αρχείου τα ελληνικά ερωτηματικά ; ορίζουν το υπόλοιπο της γραμμής να είναι σχόλια. Οι πρώτες τρεις εντολές δεσμεύουν τα πλήκτρα F1, C-c s και M-s σε συγκεκριμένες συναρτήσεις-εντολές. Η επόμενη δείχνει πώς να ορίσουμε ψευδώνυμο (alias) μιας εντολής που χρησιμοποιούμε συχνά. Οι τελευταίες δύο ορίζουν δύο πολύ απλές συναρτήσεις (fm) και (sign) που μπορούμε να τις καλέσουμε από το minibuffer όπως αναφέρεται στα σχετικά σχόλια.

Για περισσότερα παραδείγματα αναζητήστε στο Google: "emacs .emacs file" για να δείτε τα αρχεία που χρησιμοποιούν άλλοι χρήστες.

Επίσης είναι δυνατόν να παραμετροποιήσετε τον Emacs από το μενού Options → Customize Emacs.

Για τη σε βάθος εκμάθηση της γλώσσας Elisp σας παραπέμπουμε στο Emacs Lisp Reference Manual στη διεύθυνση www.gnu.org/software/emacs/manual/elis

1.3.10 Ελληνικά στον Emacs

Με πολλή συντομία περιγράφουμε πώς γίνεται να επεξεργαστούμε αρχεία με ελληνικούς χαρακτήρες. Εδώ ο χρήστης πρέπει να προσδιορίσει αν οι ελληνικοί χαρακτήρες θα αναπαρίστανται από τους 8-bit χαρακτήρες του συστήματος iso8859-7[35] ή από τους πιο διαδεδομένους 16-bit Unicode χαρακτήρες.

[35] Χρήσιμοι σε προγράμματα όπως το LaTeXμε τη χρήση του Babel.

Για να μπορέσουμε να *διαβάσουμε* αρχεία με χαρακτήρες Unicode πρέπει ο Emacs σε ένα παραθυρικό περιβάλλον να ξεκινήσει με μία κατάλληλη γραμματοσειρά Unicode (UTF)[36]. Αν αυτό δεν είναι η προεπιλογή επιλέγουμε εμείς μία γραμματοσειρά[37]. Μια επιλογή δίνεται από την παρακάτω εντολή:

```
> emacs -fn -misc-fixed-medium-r-normal--18-120-100-100-c-90-iso10646-1 &
```

Στη συνέχεια μπορούμε να εισάγουμε ελληνικούς χαρακτήρες χρησιμοποιώντας την αλλαγή της μεθόδου πληκτρολογίου του παραθυρικού περιβάλλοντος (λ.χ. πληκτρολογώντας `Alt-Shift`) όπως και σε οποιαδήποτε άλλη εφαρμογή. Εναλλακτικά (αν λ.χ. δεν είμαστε σε UTF περιβάλλον) με την εντολή `C-\` (`M-x toggle-input-method`) και εισάγοντας –μόνο την πρώτη φορά – "greek" στο minibuffer εναλλάσσουμε από αγγλικά σε ελληνικά.

Για τους 8-bit χαρακτήρες τύπου ISO8859-7 καλούμε τον Emacs με την ανάλογη γραμματοσειρά. Μία επιλογή είναι

```
emacs -fn -misc-fixed-medium-r-normal--18-120-100-100-c-90-iso8859-7 &
```

Αφού ανοίξουμε το αρχείο που επιθυμούμε σε ένα buffer μπορούμε από το μενού να διαλέξουμε περιβάλλον γλώσσας `Options->Mule(Multilingual environment)->Set Language Environment->Greek` (ή στο minibuffer `M-x set-language-environment`) και επιλέγει μέθοδο εισαγωγής χαρακτήρων `Options->Mule(Multilingual environment)->Select Input Method-> ``greek''` (ή στο minibuffer `M-x toggle-input-method`). Στη συνέχεια με τη συντόμευση εντολής `C-\` εναλλάσσουμε από αγγλικά σε ελληνικά.

1.4 Η Γλώσσα Προγραμματισμού: Fortran 77

Στην παράγραφο αυτή θα αναφέρουμε τα απολύτως απαραίτητα που χρειάζεται να ξέρετε προκειμένου να αρχίσετε να γράφετε και να τρέχετε προγράμματα σε γλώσσα Fortran 77. Δεν πρόκειται για συστηματική εκμάθηση της γλώσσας, αλλά για μια πρακτική προσέγγιση μέσω παραδειγμάτων.

[36] Αν καλούμε τον Emacs στην κονσόλα, θα πρέπει η κονσόλα να εμφανίζει χαρακτήρες Unicode

[37] Με την εντολή `xlsfonts | grep iso10646 |less` βλέπουμε τις διαθέσιμες γραμματοσειρές Unicode ενώ με την εντολή `xlsfonts | grep iso8859-7|less` τις διαθέσιμες ελληνικές 8-bit γραμματοσειρές ISO8859-7.

Για να ωφεληθεί ο/η αναγνώστης/τρια από το κεφάλαιο αυτό πρέπει απαραίτητα να γράφει τα προγράμματα και να τα εκτελεί στον υπολογιστή του/της.

1.4.1 Τα Στοιχειώδη

Το πρώτο πρόγραμμα που γράφει κανείς σε μια καινούργια γλώσσα ή/και υπολογιστικό περιβάλλον, είναι ένα "Hello World" πρόγραμμα, το οποίο απλά τυπώνει στο `stdout` αυτή τη φράση. Καταφέρνοντας να δει τη φράση αυτή τυπωμένη, έχει κάνει τη μισή δουλειά που χρειάζεται για να προγραμματίσει στο περιβάλλον αυτό. Το εν λόγω πρόγραμμα σε Fortran 77 το γράφουμε σε ένα αρχείο `hello.f` ως εξής:

```
      program hello_world

C     print a message
      print *,'Hello world!'

      end                           !this is the end
```

Οι εντολές στη Fortran 77 είναι ακολουθίες χαρακτήρων που γράφουμε από την 7η μέχρι και την 72η στήλη. Η γλώσσα αυτή έχει στο συντακτικό της αυτή την ιδιομορφία[38] όπου είναι σημαντικό σε ποια στήλη γράφουμε κάτι. Οτιδήποτε γραφτεί μετά την 72η στήλη αγνοείται. Αν γράψετε το χαρακτήρα[39] `C` στην πρώτη στήλη, τότε όλη η γραμμή αγνοείται από το μεταγλωττιστή και μπορείτε να γράψετε οτιδήποτε ως σχόλιο (comment). Η τρίτη σειρά του παραπάνω προγράμματος είναι ένα σχόλιο σύμφωνα με αυτό το συντακτικό. Οι στήλες 2-5 καθώς και η 6η έχουν και αυτές ειδικό ρόλο τον οποίο θα δούμε αργότερα.

Η κύρια είσοδος σε ένα πρόγραμμα καθορίζεται από την εντολή `program name` όπου `name` είναι ό,τι θέλουμε αρκεί να αποτελείται από αλφαριθμητικούς χαρακτήρες και ορισμένους άλλους, όπως ο `_`. Το τέλος του προγράμματος, όπως και κάθε αυτοδύναμης ενότητας του προγράμματος (υπορουτίνες, συναρτήσεις), καθορίζεται από την εντολή `end`. Στη σχετική γραμμή παραπάνω παρατηρούμε ότι γράψαμε `!this is the end`. Αυτός είναι ένας άλλος τρόπος να γράφουμε σχόλια στο πρόγραμμα, οτιδήποτε μετά το `!` αγνοείται οπότε γράφουμε ότι θέλουμε.

Στην τέταρτη γραμμή είναι το "ζουμί": Η εντολή `print` είναι ο απλούστερος τρόπος να τυπώσουμε κάτι στο `stdout`. Προσέξτε το "`*,`" που

[38] Αυτό προέρχεται από την "αρχαιότητα" όπου οι εντολές εισάγονταν στη μνήμη του υπολογιστή γραμμένες σε ξεχωριστές κάρτες με τρύπες!

[39] ή `*`.

είναι μέρος του συντακτικού και φυσικά δεν τυπώνεται... Για τη Fortran 77 τα κεφαλαία/μικρά γράμματα είναι ισοδύναμα και θα μπορούσαμε να γράψουμε `PRINT`, `Print`, ... Η φράση που θέλουμε να τυπώσουμε είναι μια ακολουθία χαρακτήρων που περικλείεται από μονά εισαγωγικά.

Για να τρέξει το πρόγραμμα, πρέπει να μεταφραστεί σε γλώσσα μηχανής. Τη δουλειά αυτή την αναλαμβάνει ο μεταγλωττιστής (compiler)[40]. Σε κάθε σύστημα το πρόγραμμα αυτό μπορεί να έχει διαφορετικό όνομα ή ακόμα και ο προγραμματιστής να έχει περισσότερες από μία επιλογές. Πρέπει να ενημερωθείτε από το διαχειριστή του συστήματος ή τα σχετικά εγχειρίδια. Τυπικά ονόματα τέτοιων προγραμμάτων είναι f77, f90, g77, ifort, gfortran, ... Η πρώτη μας δουλειά είναι να μελετήσουμε με προσοχή τα εγχειρίδια χρήσης. Εκεί μαθαίνουμε πώς να χρησιμοποιήσουμε τις δυνατότητές του με τον καλύτερο τρόπο για το δικό μας πρόγραμμα (λ.χ. βελτιστοποίηση - optimization)

Στο δικό μας σύστημα θα χρησιμοποιήσουμε τον `f77`. Η εντολή που θα δώσουμε για τη μεταγλώττιση είναι[41]

```
> f77 hello.f -o hello
```

Ο διακόπτης `-o` ορίζει ο μεταγλωττισμένος κώδικας να γραφτεί στο αρχείο `hello`. Αν η μεταγλώττιση είναι επιτυχής τότε το πρόγραμμα τρέχει με την εντολή:

```
> ./hello
 Hello world!
```

όπου το ./ το βάλαμε για να προσδιορίσουμε ρητά πως εκτελούμε το πρόγραμμα στο αρχείο `hello` που βρίσκεται στον τρέχοντα κατάλογο (.).

Ας δοκιμάσουμε τώρα να κάνουμε ένα απλό υπολογισμό, την περίμετρο και το εμβαδόν ενός κύκλου ακτίνας `R`. Για το λόγο αυτό θα χρειαστούμε να χρησιμοποιήσουμε μεταβλητές τύπου `REAL`. Στο αρχείο `area_01.f` πληκτρολογούμε

```
C     file: area_01.f
      program circle_area

      PI = 3.14159265358979
```

[40] Στην πραγματικότητα αυτή η δουλειά γίνεται σε διάφορα στάδια και από διαφορετικά προγράμματα. Περισσότερα στην τάξη...

[41] Θυμίζουμε στον αναγνώστη ότι γραμμές που αρχίζουν με > είναι εντολές που δίνουμε στη γραμμή εντολών. Οτιδήποτε άλλο είναι output του προγράμματος.

```
      R  = 4.0
      print *,'Perimeter= ',2.0*PI*R
      print *,'Area=      ',PI*R**2

      end
```

Στο παραπάνω πρόγραμμα ορίσαμε τις τιμές των δύο μεταβλητών `R`, `PI` στη 3η και 4η γραμμή. Το ότι οι μεταβλητές είναι τύπου `REAL` καθορίζεται από το όνομα της μεταβλητής. Η Fortran 77 έχει implicit rules για να το καθορίζει. Σύμφωνα με αυτούς, μεταβλητές που το όνομά τους αρχίζει από `i, j, k, l` είναι τύπου `INTEGER` (ακέραιοι) ενώ κάθε άλλη είναι τύπου `REAL`. Αλλαγή γίνεται μόνο αν δηλώσουμε ρητά τον τύπο μιας μεταβλητής όπως θα δείξουμε αργότερα[42]. Στην 5η και 6η γραμμή κάνουμε τον υπολογισμό $2\pi R$ και πR^2 κατευθείαν στο όρισμα της εντολής `print`. Οι τελεστές πολλαπλασιασμού και δύναμης είναι `*` και `**` αντίστοιχα. Προσέξτε ότι στις σταθερές `2.0` και `4.0` βάλαμε ρητά την υποδιαστολή. Αν τις παραλείψουμε οι σταθερές είναι τύπου `INTEGER` και αν δεν είναι αυτό που θέλουμε το αποτέλεσμα μπορεί να μας ... καταπλήξει[43]. Αν υποθέσουμε ότι το πρόγραμμα είναι αποθηκευμένο στο αρχείο `area_01.f`, οι εντολές μεταγλωττισμού και εκτέλεσης του προγράμματος είναι

```
> f77 area_01.f -o area
> ./area
 Perimeter=    25.13274
 Area=         50.26548
```

Ας δοκιμάσουμε τώρα μια επαναλαμβανόμενη διεργασία. Ας κάνουμε τον παραπάνω υπολογισμό για 10 διαφορετικούς κύκλους ακτίνας $R_i = 1.28 + i, i = 1, \ldots, 10$. Τις ακτίνες θα τις αποθηκεύσουμε σε ένα array `R(10)` τύπου `REAL`. Το αρχείο `area_02.f`:

```
C     file: area_02.f
      program circle_area

      dimension R(10)

      PI    = 3.14159265358979
      R(1)  = 2.28
      do  i = 2, 10
```

[42] Μπορούμε να αλλάξουμε τους κανόνες αυτούς με την εντολή `implicit`.

[43] Δοκιμάστε την εντολή `print *, 2.0/4.0, 2/4` στο παραπάνω πρόγραμμα.

```
       R(i) = R(i-1) + 1.0
      enddo

      do i = 1,10
       perimeter = 2*PI*R(i)
       area      = PI*R(i)**2
     print *,i,') R= ',R(i),' area= ',area,' perimeter= ',perimeter
      enddo

      end
```

Η εντολή `dimension R(10)` ορίζει ένα array με διάσταση 10. Στη Fortran τα στοιχεία arrays αναφέρονται με ένα δείκτη που παίρνει τιμές από 1 μέχρι τη διάσταση του array (εδώ 10). Άρα R(4) είναι το τέταρτο στοιχείο του `R`.

Μεταξύ των εντολών

```
      do  i = 2, 10
      ...
      enddo
```

περιέχονται εντολές που εκτελούνται επαναληπτικά με την ακέραια μεταβλητή `i` να παίρνει τιμή από 2 έως 10 με βήμα 1[44]. Η εντολή

```
       R(i) = R(i-1) + 1.0
```

ορίζει την ακτίνα με δείκτη `i` να είναι κατά 1 μεγαλύτερη από την προηγούμενη. Για να είναι σωστή η επαγωγή θα πρέπει να ορίσουμε την τιμή της `R(1)` πριν αρχίσει το do loop. Μετά από αυτή την εξήγηση, νομίζω πως μπορεί εύκολα να γίνει κατανοητό τι γίνεται στο δεύτερο `do loop` του προγράμματος. Ο αναγνώστης θα πρέπει να δοκιμάσει το παραπάνω πρόγραμμα και να πειραματιστεί κάνοντας μικροαλλαγές.

Ας μετατρέψουμε τώρα το παραπάνω πρόγραμμα έτσι ώστε ο χρήστης να δίνει τις ακτίνες του κύκλου, το πρόγραμμα να υπολογίζει τις ακτίνες και τα εμβαδά και να γράφει το αποτέλεσμα σε ένα αρχείο. Άρα το πρόγραμμα πρέπει να πάρει input από το χρήστη τα μέτρα των ακτίνων $R_i, i = 1, \ldots, 10$. Γράφουμε στο αρχείο `area_03.f`:

```
C     file: area_03.f
      program circle_area
```

[44] Το βήμα μπορεί να αλλάξει λ.χ. `do i=0,12,4` τρέχει για `i=0,4,8,12` και η `do i=10,6,-2` για `i=10,8,6` αντίστοιχα.

```
      implicit none

      integer   N
      real      PI
      parameter(N=10)
      parameter(PI=3.14159265358979)
      real      R(N)
      real      area,perimeter
      integer   i


      do i=1,N
       print*,'Enter radius of circle: '
       read(5,*)R(i)
       print*,'i= ',i,' R(i)= ',R(i)
      enddo

      open(UNIT=13,FILE='AREA.DAT')

      do i = 1,N
       perimeter = 2*PI*R(i)
       area      = PI*R(i)**2
       write(13,*)i,') R= ',R(i),' area= ',area,
     *      ' perimeter= ',perimeter
      enddo

      close(13)

      end
```

Παρατηρήστε τώρα ότι η πρώτη εντολή που δίνουμε είναι η `implicit none`. Αυτό δηλώνει ότι δε θέλουμε να χρησιμοποιήσουμε τους implicit κανόνες της Fortran αλλά θέλουμε να *υποχρεώσουμε* τον εαυτό μας να δηλώσει ρητά κάθε μεταβλητή του προγράμματος. Αυτό σημαίνει πως θα μας πάρει λίγο παραπάνω χρόνο να πληκτρολογήσουμε τους ορισμούς αλλά σας υπόσχομαι ότι αυτός ο κόπος δεν συγκρίνεται με τίποτα με τον πόνο να βρει κάποιος δύσκολα σφάλματα στο πρόγραμμα που οφείλονται σε μικρά ορθογραφικά λάθη στα ονόματα των μεταβλητών[45]. Θα ακολουθήσουμε αυτή την πρακτική σε ολόκληρο το βιβλίο.

[45] Ποια η διαφορά στο όνομα της μεταβλητής `pl1` από την `p11`?

Μετά από αυτή την εντολή ακολουθούν οι δηλώσεις των μεταβλητών. Οι μεταβλητές `N, i` δηλώνονται ως `integer` ενώ οι `PI, area, perimeter, R(N)` ως `real`. Οι `N, PI` δηλώνονται να είναι παράμετροι (`parameter`) των οποίων η τιμή δεν μπορεί να αλλάξει στη ροή του προγράμματος.

Μετά τις δηλώσεις των μεταβλητών ακολουθούν οι εκτελέσιμες εντολές. Το πρώτο `do loop` δεν έχει τίποτα καινούργιο εκτός από την εντολή

```
read(5,*)R(i)
```

Με την εντολή αυτή διαβάζουμε από το stdin την τιμή της μεταβλητής `R(i)`. Ο χρήστης πρέπει να την τυπώσει στο τερματικό και να πατήσει το πλήκτρο [Enter]. Μπορούμε με την ίδια εντολή να διαβάσουμε περισσότερες από μία μεταβλητές.

Για να τυπώσουμε δεδομένα σε ένα αρχείο στο σκληρό δίσκο πρέπει να συναρτήσουμε στο όνομα του αρχείου ένα `UNIT` που μπορεί να είναι οποιοσδήποτε ακέραιος μέσα σε κάποια όρια που καθορίζονται από το σύστημα[46]. Η συνάρτηση αυτή γίνεται με την εντολή `open` και μετά μπορούμε να γράφουμε με την εντολή `write(unit_number,*)...`[47]. Όταν τελειώσουμε κλείνουμε το αρχείο με την εντολή `close` και μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον ίδιο αριθμό για άλλο αρχείο. Η λογική ροή είναι δηλαδή

```
open(UNIT=13,FILE='AREA.DAT')
...
write(13,*) ....
...
close(13)
```

Το όνομα του αρχείου καθορίζεται από το όρισμα `FILE='AREA.DAT'` της εντολής `open`.

Το τελευταίο που παρατηρούμε είναι η γραμμή

```
      write(13,*)i,') R= ',R(i),' area= ',area,
     *      ' perimeter= ',perimeter
```

που μας δείχνει πώς να συνεχίζουμε μια μακριά εντολή στην επόμενη γραμμή. Αρκεί να βάλουμε οποιοδήποτε χαρακτήρα μας αρέσει στην 5η στήλη (εδώ το `*`) και η ζωή ... συνεχίζεται (και μάλιστα όσο μας αρέσει!).

---

[46] Μπορείτε με ασφάλεια να χρησιμοποιήσετε από 10-99. Το 5 είναι το `stdin`, το 6 το `stdout` και το 0 το `stderr`.

[47] Δοκιμάστε τι γίνεται αν γράψετε σε ένα `UNIT` χωρίς να έχετε ανοίξει ένα αρχείο...

Το επόμενο βήμα είναι να μάθουμε πώς να χωρίζουμε το πρόγραμμά μας σε λογικά διαφορετικές διαδικασίες οι οποίες μπορεί να επαναλαμβάνονται πολλές φορές στο πρόγραμμά μας. Θα δείξουμε τη διαδικασία της υπορουτίνας (subroutine) ορίζοντας τον υπολογισμό του εμβαδού και της περιφέρειας του κύκλου να γίνεται από την `subroutine area_of_circle`. Ορίστε τι γράφουμε μέσα στο αρχείο area_04.f:

```
C     file: area_04.f
      program circle_area

      implicit none

      integer   N
      real      PI
      parameter(N=10)
      parameter(PI=3.14159265358979)
      real      R(N)
      real      area,perimeter
      integer   i


      do i=1,N
       print*,'Enter radius of circle: '
       read(5,*)R(i)
       print*,'i= ',i,' R(i)= ',R(i)
      enddo

      open(UNIT=13,FILE='AREA.DAT')

      do i = 1,N
       call area_of_circle(R(i),perimeter,area)
       write(13,*)i,') R= ',R(i),' area= ',area,
     *       'perimeter= ',perimeter
      enddo

      close(13)

      end

      subroutine area_of_circle(R,L,A)
      implicit none
```

```
real R,L,A
real PI,PI2
parameter(PI=3.14159265358979)
parameter(PI2 = 2.0*PI)

L= PI2*R
A= PI*R*R

return
end
```

Οι αλλαγές που κάναμε αφορούν καταρχήν το κυρίως πρόγραμμα. Οι υπολογισμοί της περιμέτρου και του εμβαδού αντικαταστάθηκαν από τη γραμμή

```
call area_of_circle(R(i),perimeter,area)
```

Η εντολή `call` κάνει αυτό που λέει: καλεί τη διαδικασία που ορίζεται στην υπορουτίνα `area_of_circle`. Τα `(R(i),perimeter,area)` είναι τα ορίσματα της υπορουτίνας. Το R(i) είναι μεταβλητή εισόδου η οποία παρέχει δεδομένα για να κάνει τον υπολογισμό η υπορουτίνα. Οι `perimeter,area` είναι οι μεταβλητές εξόδου στις οποίες κατά την έξοδό της η υπορουτίνα μας δίνει τα αποτελέσματα. Ο προγραμματιστής της υπορουτίνας πρέπει να μας δώσει σαφείς οδηγίες για τις μεταβλητές εισόδου/εξόδου έτσι ώστε να χρησιμοποιήσουμε σωστά την υπορουτίνα.

Η υπορουτίνα προγραμματίζεται ανάμεσα στις δηλώσεις

```
subroutine area_of_circle(R,L,A)
...
end
```

Τα ορίσματα `R,L,A` ορίζονται στην υπορουτίνα και τα ονόματά τους δεν είναι αναγκαστικό να είναι τα ίδια με αυτά που χρησιμοποιούμε για να καλέσουμε την υπορουτίνα. Δηλώνονται ρητά με τις δηλώσεις `real R,L,A`. Οι μεταβλητές περνούν by reference το οποίο σε απλά ελληνικά σημαίνει πως οποιαδήποτε αλλαγή στις τιμές τους μέσα στην υπορουτίνα, αλλάζει και τις αντίστοιχες τιμές στο πρόγραμμα που την κάλεσε. Άρα με τις εντολές `L= PI2*R, A= PI*R*R` πετυχαίνουμε αυτό που θέλουμε, δηλ. να επιστρέψουμε στο χρήστη της υπορουτίνας την περίμετρο και το εμβαδόν κύκλου ακτίνας `R`. Τέλος με την εντολή `return` επιστρέφουμε τον έλεγχο στο πρόγραμμα που κάλεσε την υπορουτίνα. Οι μεταβλητές `PI, PI2` είναι "ιδιωτικές " της `area_of_circle` και δεν

"φαίνονται" από το κυρίως πρόγραμμα. Το ίδιο και οι μεταβλητές του κυρίως προγράμματος (`i, N,...`) δεν είναι γνωστές στην υπορουτίνα.

Τέλος ας δώσουμε χωρίς πολλά λόγια και ένα πρόγραμμα `trionymo.f` που υπολογίζει τις ρίζες ενός τριωνύμου:

```
C     file: trionymo.f
C     Program to compute roots of 2nd order polynomial
      program trionymo
      implicit none
      real a,b,c,D
      real x1,x2
      real Discriminant

      print*,'Enter a,b,c:'
      read(5,*)a,b,c

C     Test if we have a well defined polynomial of 2nd degree:
      if( a .eq. 0.0) stop 'trionymo: a=0'

C     Compute the discriminant (= diakrinousa)
      D = Discriminant(a,b,c)
      print *, 'Discriminant: D=  ',D

C     Compute the roots in each case: D>0, D=0, D<0 (no roots)
      if(D .gt. 0.0 )then
       call roots(a,b,c,x1,x2)
       print *,'Roots:        x1= ',x1,' x2= ',x2
      else if (D .eq. 0.0) then
       call roots(a,b,c,x1,x2)
       print *,'Double Root:  x1= ',x1
      else
       print *,'No real roots'
      endif

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C    This is the function that computes the discriminant (diakrinousa)
C     A function returns a value. This value is assigned with the
C     statement:
```

```
C     Discriminant = <value>
C    i.e. we simply assign anywhere in the program a variable with the
C     name  of the function.
C
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      real function Discriminant(a,b,c)
      implicit none
      real a,b,c

      Discriminant = b**2 - 4.0 * a * c

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C     The subroutine that computes the roots.
C
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine roots(a,b,c,x1,x2)
      implicit none
      real a,b,c
      real x1,x2
      real D, Discriminant

      if(a .eq. 0.0) stop 'roots: a=0'

      D = Discriminant(a,b,c)
      if(D.ge.0.0)then
       D = sqrt(D)
      else
       print *,'roots: Sorry, cannot compute roots, D<0=',D
       stop
      endif

      x1 = (-b + D)/(2.0*a)
      x2 = (-b - D)/(2.0*a)

      end
```

Το πρόγραμμα ζητάει τους συντελεστές του τριωνύμου ax^2+bx+c. Ελέγχει ότι είναι καλά ορισμένο $a > 0$ και αν όχι σταματάει το πρόγραμμα με

την εντολή stop. Στη συνέχεια υπολογίζει τη διακρίνουσα (discriminant) $D = b^2 - 4ac$ καλώντας τη συνάρτηση Discriminant(a,b,c). Η συνάρτηση (function) διαφέρει από τη subroutine στο ότι καλείται απευθείας (χωρίς την εντολή call) και επιστρέφει μια τιμή της οποίας ο τύπος πρέπει να δηλωθεί όπως οποιαδήποτε άλλη μεταβλητή (real Discriminant). Στη συνέχεια ξεχωρίζουμε τις γνωστές περιπτώσεις με τη δομή

```
if(D .gt. 0.0 )then
 ...
else if (D .eq. 0.0) then
 ...
else
 ...
endif
```

όπου παρατηρούμε και τους τελεστές σύγκρισης .gt. (greater than-αυστηρά μεγαλύτερο) και .eq. (equal-ίσο)[48].

Η συνάρτηση Discriminant πρέπει να δηλωθεί τι τύπου τιμή επιστρέφει (εδώ real) καθώς και τα ορίσματά της όπως και για τη subroutine. Η τιμή που επιστρέφει καθορίζεται τοποθετώντας την σε μια μεταβλητή με όνομα ίδιο με αυτό της συνάρτησης:

```
real function Discriminant(a,b,c)
...
Discriminant = b**2 - 4.0 * a * c
...
end
```

1.4.2 Οι λεπτομέρειες

Την παράγραφο αυτή μπορείτε να την αγνοήσετε την πρώτη φορά που διαβάζετε αυτό το κεφάλαιο. Σκοπός είναι περισσότερο να χρησιμεύσει σαν αναφορά όταν θα έχετε απορίες στα επόμενα κεφάλαιο.

Ξεκινάμε αναφέροντας και άλλους ενδιαφέροντες τύπους μεταβλητών. Στο παρακάτω πρόγραμμα δείχνουμε πώς να χρησιμοποιήσετε μεταβλητές τύπου CHARACTER, πραγματικούς διπλής ακρίβειας REAL*8 και μιγαδικούς αριθμούς μονής COMPLEX και διπλής ακρίβειας COMPLEX*16:

[48] Παρόμοιοι τελεστές είναι .lt., .ge., .le. (μικρότερο, μεγαλύτερο ή ίσο, μικρότερο ή ίσο) και .ne., .and., .or. (μη ίσο, λογικό και, λογικό ή)

```
      program f77_vars
      implicit none

      character *10 string

      real    x
      real*8  x8  !equivalent to: double precision x8
C     Complex Numbers:
      complex    z
      complex*16 z16 !double precision

C     A string array:
     string = 'Hello World!' !string smaller size than necessary
      print *,'A string: ', string
C     Reals with increasing accuracy: Determine PI
      x   = 4.0  *atan(1.0  )
    x8  = 4.0D0*atan(1.0D0) !Use D for double   precision exponent
      print *,'x4= ',x,' x8= ',x8

C     Complex numbers:
      z = (2.0,1.0)*cexp((3.0,-1.0)) ! z= (2 + i) * e^(3-i)
      print *,'z= ',z,' Re(z)= ',REAL(z),' Im(z)= ',AIMAG(z),
     *     ' |z|= ',ABS(z),' z*= ',CONJG(z)

C     Complex numbers of double precision:
      z16 = (2.0D0,1.0D0)*cdexp((3.0D0,-1.0D0))
    print *,'z= ',z16,' Re(z)= ',DBLE(z16),' Im(z)= ',DIMAG(z16),
     *     ' |z|= ',CDABS(z16),' z*= ',DCONJG(z16)

      end
```

Τα σημεία που πρέπει να προσέξουμε στο παραπάνω πρόγραμμα είναι:

- Οι μεταβλητές τύπου CHARACTER δηλώνονται με το μέγεθός τους, εδώ 10 χαρακτήρες βάζοντας *10. Αν περάσουμε το όριο αυτό οι παραπάνω χαρακτήρες ... κόβονται.

- Όταν χρησιμοποιούμε σταθερές στις μεταβλητές διπλής ακρίβειας βάζουμε πάντα τον εκθέτη έστω και αν είναι 0. Ο εκθέτης υποδηλώνεται με το γράμμα D αντί του E που χρησιμοποιείται για τις μεταβλητές REAL. Αλλιώς η σταθερά χάνει την επιθυμητή ακρίβεια.

- Οι συναρτήσεις για μεταβλητές διπλής ακρίβειας συνήθως παίρνουν ένα έξτρα D στο όνομά τους (exp→dexp, ABS→DABS) ενώ οι αντίστοιχες για μιγαδικούς ένα έξτρα C (DABS→CDABS, exp→cexp κλπ). Τρέξτε το πρόγραμμα και παρατηρήστε την αυξημένη ακρίβεια υπολογισμού του π και του $z = (2+i)\mathrm{e}^{3-i}$ χρησιμοποιώντας μεταβλητές διπλής ακρίβειας.

Ένα άλλο σημαντικό στοιχείο της γλώσσας που παραλείψαμε στην προηγούμενη παράγραφο είναι η κοινή χρήση μεταβλητών από διαφορετικά μέρη του προγράμματος. Μία μεταβλητή που ορίζεται σε ένα υποπρόγραμμα (main program, subroutine, function) είναι τοπική και διαφορετικά υποπρογράμματα δεν μπορούν να έχουν πρόσβαση σε αυτή. Για να αποκτήσουμε πρόσβαση σε κοινό σημείο της μνήμης όπου αποθηκεύουμε τις τιμές των μεταβλητών χρησιμοποιούμε την εντολή COMMON. Δείτε το παρακάτω παράδειγμα:

```
C --------------------------------------
      program f77_common
      implicit none
      real k1,k2,k3
      common /CONSTANTS/k1,k2

      k1=1.0
      k2=1.0
      k3=1.0
      print *,'main: k1= ',k1,' k2= ',k2,' k3= ',k3
      call s1 !prints k1 and k2 but not k3
      call s2 !changes the value of k2 but not k3
      print *,'main: k1= ',k1,' k2= ',k2,' k3= ',k3

      end
C --------------------------------------
      subroutine s1()
      implicit none
      real k1,k2,k3
      common /CONSTANTS/k1,k2

      print *,'s1: k1= ',k1,' k2= ',k2,' k3= ',k3
      end
C --------------------------------------
      subroutine s2()
      implicit none
```

```
real k1,k2,k3
common /CONSTANTS/k1,k2

k2 = 2.0
k3 = 2.0
end
```

Το COMMON block εδώ έχει το όνομα CONSTANTS και μπορούμε να αναφερόμαστε σε αυτό από οποιαδήποτε υπορουτίνα ή συνάρτηση του προγράμματος. Στην πραγματικότητα δείχνει σε ένα συγκεκριμένο σημείο της μνήμης και εδώ δεσμεύουμε το χώρο για δύο μεταβλητές τύπου REAL τις k1, k2. Οι μεταβλητές αυτές διαβάζονται και αλλάζουν τιμές από τις υπορουτίνες s1 και s2 ενώ η k3 παρόλο που έχει κοινό όνομα και στο κύριο πρόγραμμα και στις υπορουτίνες, αναφέρεται σε διαφορετικές μεταβλητές κάθε φορά. Το προγράμματος τυπώνει:

```
 main: k1=    1.000000      k2=    1.000000      k3=    1.000000
 s1:   k1=    1.000000     k2=    1.000000     k3= -2.8117745E-05
 main: k1=    1.000000      k2=    2.000000      k3=    1.000000
```

Ένα από τα αδύναμα σημεία της Fortran είναι η περιορισμένη δυνατότητα να χειριστούμε ευέλικτα το Input/Output (I/O). Για το λόγο αυτό θα χρησιμοποιήσουμε άλλα προγράμματα όπως awk, perl ή προγράμματα στη γλώσσα C. Ακόμα όμως και η Fortran έχει χειρισμό του I/O αλλά όντας επιστημονικά προσανατολισμένη αυτός αφορά κυρίως την ακρίβεια παρουσίασης των αριθμών. Αν έχετε να χειρισθείτε κείμενο καλύτερα διαλέξτε μια άλλη γλώσσα προγραμματισμού... Μέχρι στιγμής οι μόνες εντολές που χρησιμοποιήσαμε για I/O είναι οι προκαθορισμένες χρησιμοποιώντας print *, write(,*), read(,*). Αλλά το * μπορεί να αντικατασταθεί με εντολές φορμά σύμφωνα με το παρακάτω παράδειγμα:

```
program f77_format
implicit none
integer i
real    x, a(10)
real*8  x8

i  = 123456
x  = 2.0  *atan2(1.0,0.0)
print '(A5,I6,F12.7)','x,i= ',i,x
x8 = 2.0D0*atan2(1.0D0,0.0D0)
```

```
      write(6,'(F18.16,E24.17,G24.17,G24.17)') x8,x8,
     *     1.0D15*x8,1.0D18*x8
      write(6,'(3F20.16)') x8,x8/2.0,cos(x8)
      write(6,'(200F12.6)')(a(i), i=1,10)
      end
```

Προσέξτε τις παρενθέσεις μέσα στα εισαγωγικά: `(A5,I6,F12.7)` είναι εντολή φορμά για την εντολή `print` και δίνει οδηγίες για την εκτύπωση τριών μεταβλητών: `A` είναι για `CHARACTER`, `I` για `INTEGER` και `F` για `REAL`. Οι αριθμοί αμέσως μετά το γράμμα υποδηλώνουν των αριθμό των χαρακτήρων που θα χρησιμοποιηθούν για την εκτύπωση. Προσοχή! Αν δεν είναι αρκετές οι θέσεις εκτύπωσης η Fortran θα αρνηθεί να κάνει την εκτύπωση και θα τυπώσει μια σειρά από $*$, τα αστεράκια του τρόμου[49]. Και στις θέσεις αυτές πρέπει να συνυπολογίσετε των αριθμό των δεκαδικών ψηφίων, την υποδιαστολή, το πρόσημο, τα ψηφία και το πρόσημο του εκθέτη... Μην είστε τσιγκούνηδες λοιπόν, δώστε άπλετο χώρο και μπορεί να σας χρειαστεί... Εδώ `A5` υποδηλώνει `CHARACTER` που θα τυπωθεί σε 5 θέσεις χαρακτήρων, `I6` `INTEGER` 6 θέσεων και `F12` `REAL` 12 χαρακτήρων. Μετά την υποδιαστολή στο `F12.7` υποδηλώνουμε πόσα δεκαδικά ψηφία θέλουμε να τυπωθούν.

Στην εντολή φορμά `(F18.16,E24.17,G24.17,G24.17)` δίνουμε οδηγίες για την εκτύπωση μιας μεταβλητής διπλής ακρίβειας. Στην καλύτερη περίπτωση έχουμε περίπου 16 δεκαδικά ψηφία ακρίβεια οπότε δεν έχει νόημα να κρατάμε παραπάνω (σε ένα υπολογισμό συνήθως χάνουμε ακρίβεια). Με την εντολή `F` θέλει προσοχή: Αν χρειαστεί εκθέτης για την αναπαράσταση, ο αριθμός δε θα τυπωθεί και συνήθως το αποφεύγουμε εκτός αν είμαστε σίγουροι ότι δε χρειάζεται εκθέτης. Η επιλογή `E` γράφει τον αριθμό πάντα σε επιστημονική μορφή με εκθέτη. Η επιλογή `G` γράφει τον αριθμό χωρίς εκθέτη αν δε χρειάζεται και με εκθέτη αν χρειάζεται. Οι αριθμοί έχουν την ίδια έννοια όπως και πριν. Στην εντολή φορμά `(3F20.16)` δείχνουμε πώς δίνουμε ένα πολλαπλασιαστικό παράγοντα 3 στην εκτύπωση των `REAL*8`. Και στην τελευταία δείχνουμε πώς να τυπώνουμε ένα μεγάλο διάνυσμα σε μία γραμμή: `write(6,'(200F12.6)')(a(i), i=1,10)`. Ο πολλαπλασιαστικός παράγοντας μπορεί να είναι μεγαλύτερος από αυτόν που θα χρησιμοποιήσουμε. Το πρόγραμμα τυπώνει (τη δεύτερη γραμμή τη διπλώσαμε για να φαίνεται):

```
x,i= 123456    3.1415927
```

[49] Σκεφτείτε μετά από ένα επίπονο υπολογισμό να πάτε να δείτε τα πολυπόθητα αποτελέσματα μόνο για να ανακαλύψετε ότι κάνατε λάθος στην εντολή του φορμά...

```
3.1415926535897931 0.31415926535897931E+01  3141592653589793.0
                                          0.31415926535897933E+19
  3.1415926535897931  1.5707963267948966 -1.0000000000000000
    0.000000    0.000000    0.000000 ....
```

Οι εντολές φορμά μπορούν να μοιράζονται με ... παραπομπές. Αν βάλουμε έναν αριθμό 1-99999 από τη 1η έως και την 5η στήλη αυτός είναι μία "ετικέτα" στην εντολή που ακολουθεί (labeled statement). Αν η εντολή αυτή είναι εντολή `FORMAT` τότε μπορούμε να αναφερθούμε σε αυτή με τον αριθμό της από τις εντολές `PRINT`, `WRITE` και `READ`. Έτσι πολλές εντολές `I/O` μπορούν να χρησιμοποιούν την ίδια εντολή `FORMAT` αν τυπώνουν με τον ίδιο τρόπο. Το παρακάτω πρόγραμμα κάνει ακριβώς ό,τι και το παραπάνω με τη μόνη διαφορά ότι χρησιμοποιούμε labeled statements και εντολές `FORMAT`:

```
      program f77_format
      implicit none
      integer i
      real    x, a(10)
      real*8  x8

      i  = 123456
      x  = 2.0  *atan2(1.0,0.0)
      print 100,'x,i= ',i,x
      x8 = 2.0D0*atan2(1.0D0,0.0D0)
      write(6,123) x8,x8,
     *     1.0D15*x8,1.0D18*x8
      write(6,4444) x8,x8/2.0,cos(x8)
      write(6,9999)(a(i), i=1,10)
 100  FORMAT(A5,I6,F12.7)
 123  FORMAT(F18.16,E24.17,G24.17,G24.17)
 4444 FORMAT(3F20.16)
 9999 FORMAT(200F12.6)
      end
```

Τέλος ο/η αναγνώστης/τρια θα πρέπει να μελετήσει τις διαθέσιμες συναρτήσεις της Fortran 77 (intrinsic functions) που δίνονται στον Πίνακα 1.2 της σελίδας 65.

1.5 Κοιτάζοντας τα Αποτελέσματα

Η γραφική απεικόνιση των δεδομένων είναι αναπόσπαστο μέρος της ποιοτικής αλλά και ποσοτικής κατανόησης της πληροφορίας που περιέχουν. Ένα καλό και ελεύθερα διαθέσιμο πρόγραμμα που παράγει γραφήματα υψηλής ποιότητας στις δύο και τρεις διαστάσεις είναι το gnuplot. Τα ειδικότερα πλεονεκτήματά του έναντι άλλων εφαρμογών είναι η ευελιξία στη χρήση του από τη γραμμή εντολών αλλά και μέσα από άλλα προγράμματα και οι μεγάλες δυνατότητες στο χειρισμό και μετασχηματισμό των δεδομένων. Έχει τη δικιά του στοιχειώδη γλώσσα προγραμματισμού του και, όπου αυτή δε φτάνει, πολύπλοκες διαδικασίες μπορούν να γίνουν χρησιμοποιώντας άλλες εφαρμογές. Ο χρήστης έχει απευθείας πρόσβαση σε πολλές μαθηματικές συναρτήσεις και σε συνάρτηση προσαρμογής των δεδομένων (fitting). Διαθέτει διαδραστικά τερματικά όπου με το ποντίκι ο χρήστης μπορεί να μετασχηματίζει τα γραφήματα. Η παράγραφος αυτή είναι εξαιρετικά συνοπτική παρουσιάζοντας τα εργαλεία που είναι απολύτως απαραίτητα για τα παρακάτω κεφάλαια. Για περισσότερες πληροφορίες παραπέμπουμε στην ιστοσελίδα του gnuplot `http://gnuplot.info/` και ειδικότερα στη σελίδα με την Demo Gallery `http://gnuplot.sourceforge.net/demo/` όπου θα βρείτε αμέσως πώς γίνεται η εργασία που σας ενδιαφέρει.

Για να ξεκινήσετε το gnuplot δίνετε την εντολή όπως φαίνεται παρακάτω:

```
> gnuplot

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 2
last modified 31 Aug 2007
System: Linux 2.6.24-16-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type `help` to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to
        <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>
```

```
Terminal type set to 'wxt'
gnuplot>
```

Παραπάνω δείχνεται το μήνυμα καλωσορίσματος και στην τελευταία γραμμή φαίνεται το prompt του προγράμματος από το οποίο περιμένει να του πληκτρολογήσουμε μία εντολή και να τη δώσουμε πατώντας το `Enter`. Στη συνέχεια όταν θα γράφουμε το prompt αυτό θα υπονοούμε πως το ακολουθούν εντολές που δίνονται στο gnuplot.

Το γράφημα μιας συνάρτησης δίνεται απλά με την εντολή `plot`. Το σύμβολο `x` εννοείται πως είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή[50]. Έτσι η εντολή

```
gnuplot> plot x
```

κάνει τη γραφική παράσταση της $y = f(x) = x$ (ευθεία κλίσης 1). Για να κάνουμε ταυτόχρονα τις γραφικές παραστάσεις περισσοτέρων συναρτήσεων απλά τις γράφουμε μαζί ως εξής:

```
gnuplot> plot [-5:5][-2:4] x, x**2, sin(x),besj0(x)
```

Παραπάνω γίνεται το γράφημα των συναρτήσεων x, x^2, $\sin x$, $J_0(x)$. Στις αγκύλες `[:]` βάζουμε τα όρια της γραφικής παράστασης στον άξονα x και y αντίστοιχα. Το `[-5:5]` καθορίζει το x να μεταβάλλεται από -5 έως $+5$, ενώ το `[-2:4]` καθορίζει το y να μεταβάλλεται από -2 έως $+4$. Αν σε κάποιες θέσεις δε βάλουμε αριθμό, τότε το gnuplot βάζει τα όρια αυτόματα: `[1:][:5]` καθορίζει το κάτω όριο το x να είναι το 1 και το άνω όριο στο y να είναι το 5, ενώ τα απροσδιόριστα άνω και κάτω όρια αφήνονται στα ... χέρια του gnuplot.

Συχνά θα θέλουμε να κάνουμε τη γραφική παράσταση δεδομένων που δίνονται από διακριτά ζεύγη (x_i, y_i). Τα δεδομένα αυτά τα τοποθετούμε σε αρχεία σε στήλες. Ας υποθέσουμε πως το αρχείο με τα δεδομένα μας ονομάζεται `data` και τα περιεχόμενά του είναι:

```
# x  y1   y2
0.5 1.0 0.779
1.0 2.0 0.607
1.5 3.0 0.472
2.0 4.0 0.368
2.5 5.0 0.287
3.0 6.0 0.223
```

Η πρώτη γραμμή αρχίζει με το χαρακτήρα # και το gnuplot την αγνοεί (σχόλια για μας). Για να κάνουμε τη γραφική παράσταση της 2ης στήλης συναρτήσει της 1ης δίνουμε απλά την εντολή:

[50] Αλλάζει με την εντολή `set dummy t` για να γίνει λ.χ. `t` η ανεξάρτητη μεταβλητή.

```
gnuplot> plot "data" using 1:2 with points
```

Το όνομα του αρχείου `data` δίνεται ανάμεσα σε εισαγωγικά ενώ μετά την εντολή `using` δίνουμε τις στήλες που θα αντιστοιχούν στον άξονα x και y αντίστοιχα (`1:2`= στήλη 1 τα x_i και στήλη 2 τα y_i). Η εντολή `with points` αναπαριστά τα ζεύγη (x_i, y_i) με σημεία.

Η εντολή

```
gnuplot> plot "data" using 1:3 with lines
```

κάνει τη γραφική παράσταση της 3ης στήλης συναρτήσει της 1ης και τα ζεύγη (x_i, y_i) ενώνονται με ευθύγραμμα τμήματα.

Οι γραφικές παραστάσεις μπορούν να συνδυαστούν:

```
gnuplot> plot "data" using 1:3 with points, exp(-0.5*x)
gnuplot> replot "data" using 1:2
gnuplot> replot 2*x
```

Στην πρώτη γραμμή κάνουμε μαζί τη γραφική παράσταση της 1ης και 3ης στήλης του αρχείου `data` μαζί με τη συνάρτηση $\mathrm{e}^{-x/2}$. Στη δεύτερη γραμμή *προσθέτουμε* με την εντολή `replot` στην ίδια γραφική παράσταση τα σημεία της 1ης και 3ης στήλης. Και στην 3η βάζουμε μαζί και τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $2x$.

Η εντολή `using` έχει πολλές δυνατότητες. Αν αντί για αριθμούς βάλουμε μαθηματικές εκφράσεις ανάμεσα σε παρενθέσεις (δηλ `using (...):(...)`) τότε το gnuplot τις υπολογίζει για κάθε σημείο και βάζει τα αποτελέσματα στη γραφική παράσταση. Για να μπει η τιμή μιας στήλης στη μαθηματική έκφραση χρησιμοποιούμε το ίδιο συντακτικό με την awk, δηλ `$i` αναφέρεται στη στήλη `i=1,2,3,...`. Παραδείγματα:

```
gnuplot> plot "data" using 1:($2*sin($1)*$3) with points
gnuplot> replot 2*x*sin(x)*exp(-x/2)
```

Κάνει τη γραφική παράσταση της 1ης στήλης με την αντίστοιχη τιμή της έκφρασης $y_i sin(x_i) z_i$, όπου x_i, y_i, z_i οι τιμές της 1ης, 2ης και 3ης στήλης αντίστοιχα. Η δεύτερη γραμμή τοποθετεί στο σχήμα και τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $2x \sin(x)\mathrm{e}^{-x/2}$.

```
gnuplot> plot "data" using (log($1)):(log($2**2))
gnuplot> replot 2*x+log(4)
```

Κάνει τη γραφική παράσταση του φυσικού λογάριθμου της 1ης στήλης με το φυσικό λογάριθμο του τετραγώνου της 2ης.

Από το gnuplot μπορούμε να κάνουμε τη γραφική παράσταση των δεδομένων που τυπώνει στο stdout *οποιοδήποτε* πρόγραμμα εκτελείται από το φλοιό. Έστω ότι έχουμε ένα πρόγραμμα με όνομα area που τυπώνει στο stdout την ακτίνα και το εμβαδόν ενός κύκλου:

```
> ./area
R=    3.280000      area=    33.79851
R=    6.280000      area=    123.8994
R=    5.280000      area=    87.58257
R=    4.280000      area=    57.54895
```

Τα δεδομένα είναι στην 2η και 4η στήλη του stdout και μπορούμε να τα δούμε γραφικά από το gnuplot με την εντολή:

```
gnuplot> plot "< ./area" using 2:4
```

Δηλαδή στη θέση του ονόματος του αρχείου βάζουμε το όνομα της εντολής με το χαρακτήρα < να προηγείται. Μπορούμε να συνδυάσουμε εντολές μέσω piping και να παράγουμε πολύπλοκα αποτελέσματα. Λ.χ.

```
gnuplot> plot "< ./area|sort -g -k 2|awk '{print log($2),log($4)}'"\
               using 1:2
```

όπου τα δεδομένα που αναπαρίστανται γραφικά είναι το αποτέλεσμα ενός φίλτρου τριών εντολών: Αυτή που παράγει τα δεδομένα ακτίνα–εμβαδόν όπως παραπάνω, η δεύτερη sort που τα διατάσσει ανάλογα με την αριθμητική τιμή της 2ης στήλης και η τρίτη awk που τυπώνει το λογάριθμο της 2ης στήλης και το λογάριθμο της 4ης. Παρατηρήστε πώς τώρα χρησιμοποιούμε την εντολή using 1:2 αφού η τελευταία εντολή τυπώνει τα δεδομένα σε δύο μόνο στήλες.

Για να σώσουμε τις γραφικές μας παραστάσεις σε αρχεία που μπορούμε να φυλάξουμε και πιθανώς να δημοσιεύσουμε, πρέπει να αλλάξουμε το "terminal" που χρησιμοποιεί ο gnuplot σε ένα οδηγό που μεταφράζει τη γραφική παράσταση σε μία γλώσσα που καταλαβαίνουν άλλα προγράμματα που δείχνουν εικόνες (λ.χ. PDF, postscript, jpeg, png, gif κλπ). Κατευθύνοντας την "έξοδο" του terminal σε ένα αρχείο πετυχαίνουμε το ζητούμενο. Για παράδειγμα

```
gnuplot> plot "data" using 1:3
gnuplot> set terminal jpeg
gnuplot> set output "data.jpg"
gnuplot> replot
gnuplot> set output
gnuplot> set terminal wxt
```

Η πρώτη γραμμή κάνει τη γραφική παράσταση στο τερματικό ώστε να τη δούμε. Η δεύτερη καθορίζει πως το γράφημα θα σωθεί σε μορφή JPEG και η τρίτη το όνομα του αρχείου που θα το αποθηκεύσουμε. Στην τέταρτη επαναλαμβάνουμε το τελευταίο γράφημα (εδώ αυτό της 1ης γραμμής) και στην πέμπτη κλείνουμε το αρχείο `data.jpg` (μην το ξεχάσετε!). Η τελευταία γραμμή επιβάλλει η επόμενη γραφική παράσταση να γίνει πάλι στο τερματικό.

Συνήθως γραφικές παραστάσεις υψηλής ποιότητας αποθηκεύονται στη γλώσσα Postscript. Επιλέξτε `set terminal postscript` και `set output "data.ps"` στην περίπτωση αυτή.

Λίγα λόγια για τις τρισδίαστατες γραφικές παραστάσεις. Οι επόμενες εντολές δείχνουν πώς με την εντολή `splot` μπορείτε να δείτε τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $f(x,y) = \mathrm{e}^{-x^2-y^2}$. Με το ποντίκι μπορείτε να την περιστρέψετε και να τη δείτε υπό διαφορετική γωνία.

```
gnuplot> set pm3d
gnuplot> set hidden3d
gnuplot> set size ratio 1
gnuplot> set isosamples 50
gnuplot> splot [-2:2][-2:2] exp(-x**2-y**2)
```

Αν έχετε δεδομένα στη μορφή (x_i, y_i, z_i) και θέλετε να τα αναπαραστήσετε γραφικά στη μορφή $z_i = f(x_i, y_i)$ τακτοποιήστε τα σε ένα αρχείο της μορφής

```
-1 -1 2.000
-1  0 1.000
-1  1 2.000

 0 -1 1.000
 0  0 0.000
 0  1 1.000

 1 -1 2.000
 1  0 1.000
 1  1 2.000
```

Προσέξτε πώς βάζουμε μία κενή γραμμή κάθε φορά που αλλάζει η τιμή του x. Αν ονομάσετε το αρχείο αυτό `data3`, δείτε τη γραφική παράσταση με τις εντολές:

```
gnuplot> set pm3d
gnuplot> set hidden3d
```

```
gnuplot> set size ratio 1
gnuplot> splot "data3" with lines
```

Κλείνουμε με δύο λόγια για τη γραφική παράσταση που δίνεται από παραμετρικές εξισώσεις. Στις δύο διαστάσεις θεωρούμε τις καμπύλες $(x(t), y(t))$ και στις τρεις επιφάνειες $(x(u,v), y(u,v), z(u,v))$. Με τις παρακάτω εντολές κάνουμε τη γραφική παράσταση του κύκλου $(\sin t, \cos t)$ και της σφαίρας $(\cos u \cos v, \cos u \sin v, \sin u)$:

```
gnuplot> set parametric
gnuplot> plot sin(t),cos(t)
gnuplot> splot cos(u)*cos(v),cos(u)*sin(v),sin(u)
```

1.6 Turbo: Σενάρια Φλοιού

Η γλώσσα Fortran θα φανεί σε κάποιον που έχει συνηθίσει κάποια γλώσσα με περισσότερες δυνατότητες (C, C++, Java, ...) πως είναι δύσχρηστη όταν κάποιος θέλει να κάνει πολύπλοκες διαδικασίες που αφορούν το σύστημα και δε θα είχε άδικο. Όταν όμως χρησιμοποιήσει τα προγράμματα που γράφει σε Fortran σε συνδυασμό με τα πανίσχυρα εργαλεία που του παρέχει το λειτουργικό σύστημα τα προβλήματα αυτά ξεπερνιόνται και έτσι μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει τα πλεονεκτήματα της γλώσσας χωρίς να ανησυχεί για διαχειριστικές και συχνά τετριμμένες εργασίες.

Για να αποφύγει κανείς την επαναλαμβανόμενη διαδικασία εκτέλεσης των ίδιων εντολών (που εμπεριέχει και τον κίνδυνο σφάλματος), μπορεί τις εντολές που θέλει να δώσει να τις κωδικοποιήσει μέσα σε ένα αρχείο. Αυτό ονομάζεται σενάριο φλοιού (shell script) και την πιο απλή μορφή του μπορεί να είναι απλά μια σειρά από εντολές. Γράφουμε στο αρχείο `script01.csh`:

```
#!/bin/tcsh -f
f77 area_01.f -o area
./area
f77 area_02.f -o area
./area
f77 area_03.f -o area
./area
f77 area_04.f -o area
./area
```

Η πρώτη γραμμή (ακριβώς!!) αρχίζει με `#!/bin/tcsh -f` που ερμηνεύεται από το λειτουργικό σύστημα ώστε να εκτελεστούν οι εντολές από το φλοιό `/bin/tcsh`. Στη συνέχεια απλά γράφουμε τις εντολές μεταγλώττισης και εκτέλεσης των προγραμμάτων που μελετήσαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Για να τρέχουμε τις εντολές στο αρχείο αυτό δίνουμε τις εντολές:

```
> chmod u+x script01.csh
> ./script.csh
```

Την πρώτη εντολή τη δίνουμε μόνο την πρώτη φορά που γράφουμε το αρχείο έτσι ώστε να δώσουμε άδεια πρόσβασης εκτελέσιμου αρχείου στο χρήστη. Όλα ωραία, εκτός του ότι πρέπει να δίνουμε τις 10 ακτίνες του κύκλου στα προγράμματα που τις ζητούν. Μια λύση είναι να γράψουμε τα δεδομένα σε ένα αρχείο `Input` και να δίνουμε την εντολή

```
./area < Input
```

οπότε δεν χρειάζεται να παρέχουμε τα δεδομένα διαδραστικά. Υπάρχει και πιο συμπαγής λύση, να βάλουμε τα περιεχόμενα των δεδομένων σε ένα "Here Document", ένα αρχείο το οποίο ο χρήστης μπορεί να φανταστεί ότι υπάρχει αλλά δεν χρειάζεται να ανησυχεί για τη διαχείρησή του. Το συντακτικό, λίγο στρυφνό για αρχή αλλά συνηθίζεται (και γίνεται και εθισμός...) είναι ως εξής (στο αρχείο `script02.csh`):

```
#!/bin/tcsh -f
f77 area_04.f -o area
./area <<EOF
1.0
2.0
3.0
4.0
5.0
6.0
7.0
8.0
9.0
10.0
EOF
```

δηλ. το πρόγραμμα `./area` παίρνει `stdin` από τα περιεχόμενα μεταξύ των γραμμών[51]:

[51] Το `EOF` μπορεί να είναι οποιαδήποτε ακολουθία χαρακτήρων.

```
./area <<EOF
...
EOF
```

Η δύναμη του shell scripting είναι οι ικανότητες προγραμματισμού που παρέχει: Ορισμός μεταβλητών, loops, conditionals, ... Οι μεταβλητές ορίζονται όπως οι μεταβλητές φλοιού που αναφέραμε στην παράγραφο 1.1.2. Η τιμή μιας μεταβλητής `name` είναι `$name` και μπορούμε να τη θέσουμε με την εντολή `set name = value`. Ένα array μπορεί να οριστεί με την εντολή

```
set R = (1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0 10.0)
```

και η πρόσβαση στα δεδομένα γίνεται με το συντακτικό `$R[1] ... $R[10]`

Ας δούμε τώρα ένα πιο ... προχωρημένο σενάριο:

```
#!/bin/tcsh -f

set files = (area_01.f  area_02.f  area_03.f  area_04.f)
set R     = (1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0 10.0)

echo "Hello $USER Today is " `date`
foreach file ($files)
 echo "# ----------- Working on file $file "
 f77 $file -o area
 ./area <<EOF
$R[1]
$R[2]
$R[3]
$R[4]
$R[5]
$R[6]
$R[7]
$R[8]
$R[9]
$R[10]
EOF
 echo "# ----------- Done "
 if( -f AREA.DAT ) cat AREA.DAT
end
```

Οι πρώτες γραμμές με τις εντολές set θέτουν τις τιμές των μεταβλητών files (4 τιμές) και R (10 τιμές). Η εντολή echo απλά "αντηχεί" στο stdout το όρισμά της. Εδώ ο φλοιός αναπτύσσει στο όρισμα "Hello $USER Today is " `date` την τιμή της μεταβλητής USER η οποία είναι μεταβλητή περιβάλλοντος που το λειτουργικό σύστημα θέτει να είναι το όνομα χρήστη. Στη συνέχεια στη το `date` αντικαθίσταται από το stdout της εντολής date, λ.χ. Thu May 24 22:01:40 EEST 2007.

Στη συνέχεια αρχίζει το foreach loop:

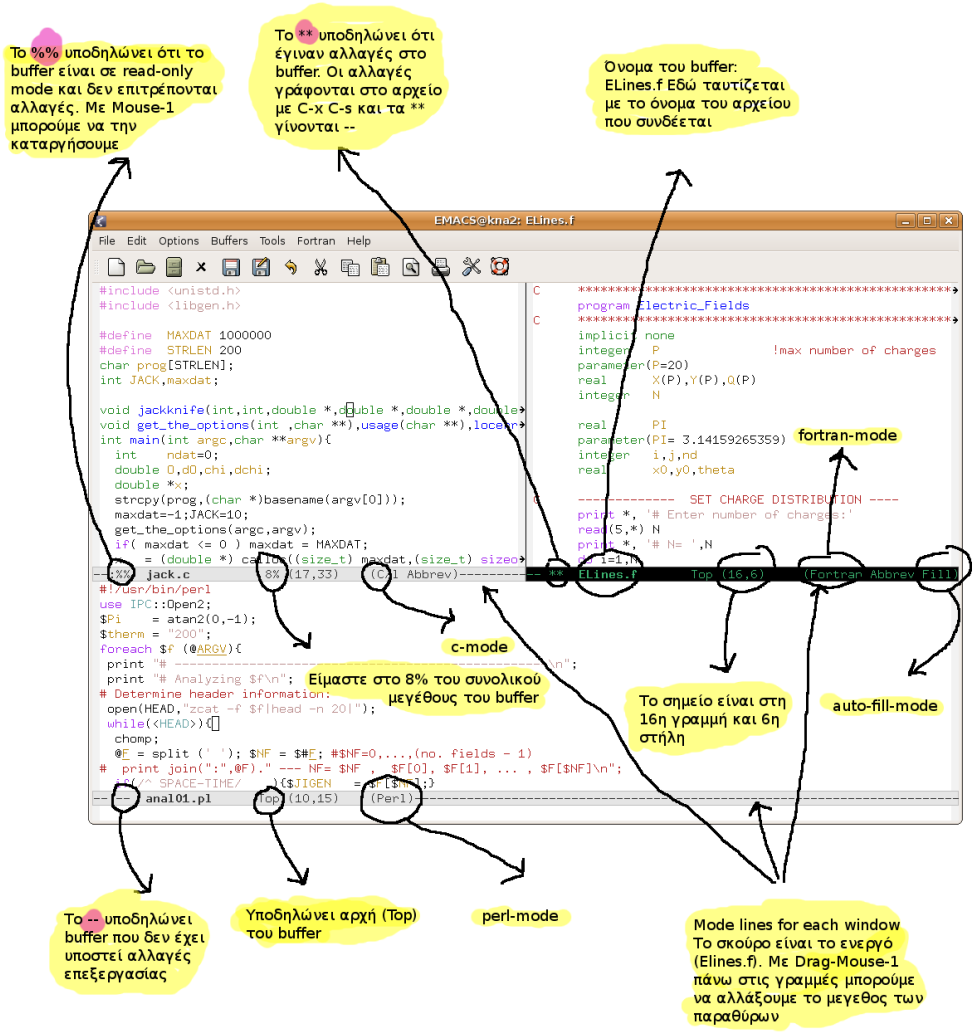
```
foreach file ($files)
 ...
end
```

Η μεταβλητή $files αναπτύσσεται στις 4 τιμές της (τα ονόματα των αρχείων Fortran area_01.f, area_02.f, area_03.f, area_04.f) και ο βρόχος εκτελείται μια φορά για κάθε τιμή. Κάθε φορά η τιμή της μεταβλητής file είναι η εκάστοτε τιμή της files. Άρα η εντολή f77 $file -o area θα μεταγλωττίσει κάθε φορά ένα από τα παραπάνω 4 αρχεία και στη συνέχεια θα εκτελέσει το *εκάστοτε* πρόγραμμα ./area.

Η τελευταία γραμμή στο βρόχο

```
if( -f AREA.DAT ) cat AREA.DAT
```

είναι ένα if-conditional: Εκτελεί την εντολή cat AREA.DAT μόνο αν η συνθήκη -f AREA.DAT είναι αληθής, δηλ. το αρχείο AREA.DAT υπάρχει.



Σχήμα 1.5: Το παράθυρο του Emacs χωρίστηκε εδώ σε τρία παράθυρα. Ο χωρισμός έγινε πρώτα οριζόντια (`C-x 2`) και μετά κάθετα (`C-x 3`). Σέρνοντας το ποντίκι `Drag-Mouse-1` πάνω στις οριζόντιες (mode lines) και κάθετη διαχωριστικές γραμμές μπορούμε να αλλάξουμε τα μεγέθη των παραθύρων. Τονίζουμε τις χρήσιμες πληροφορίες που βρίσκει κανείς στο mode line κάθε παράθυρου. Κάθε παράθυρο έχει το σημείο του (point) και ο δρομέας (cursor) βρίσκεται στο ενεργό παράθυρο (εδώ στο `ELines.f`). Παρατηρήστε πώς σημειώνεται το ανέπαφο buffer (`--`), το επεξεργασμένο (`**`) και αυτό που είναι σε read only mode (`%%`). Με κλικ με `Mouse-1` πάνω στα `%%` τα αλλάζουμε σε `--` και το αντίστροφο. Με δεξί κλικ `Mouse-3` πάνω στο όνομα της mode μπορούμε να ενεργοποιήσουμε επιλογή από minor modes. Με αριστερό κλικ `Mouse-1` έχουμε πρόσβαση σε εντολές σχετικές με την mode.

`awk`	search for and process patterns in a file,
`cat`	display, or join, files
`cd`	change working directory
`chmod`	change the access mode of a file
`cp`	copy files
`date`	display current time and date
`df`	display the amount of available disk space
`diff`	display the differences between two files
`du`	display information on disk usage
`echo`	echo a text string to output
`find`	find files
`grep`	search for a pattern in files
`gzip`	compress files in the gzip (.gz) format (gunzip to uncompress)
`head`	display the first few lines of a file
`kill`	send a signal (like KILL) to a precess
`locate`	search for files stored on the system (faster than find)
`less`	display a file one screen at a time
`ln`	create a link to a file
`lpr`	print files
`ls`	list information about files
`man`	search information about comman in man pages
`mkdir`	create a directory
`more`	display a file one screen at a time
`mv`	move and/or rename a file
`ps`	report information on the processes run on the system
`pwd`	print the working directory
`rm`	remove (delete) files
`rmdir`	remove (delete) a directory
`sort`	sort and/or merge files
`tee`	copy stdout to one or more files
`tail`	display the last few lines of a file
`tar`	store or retrieve files from an archive file
`top`	dynamic real-time view of processes
`wc`	counts lines, words and characters in a file
`whatis`	list man page entries for a command
`where`	show where a command is located in the path (alternatively: whereis)
`which`	locate an executable program using ”path”
`who`	report who is logged in and what processes are running
`zip`	create compressed archive in the zip format (.zip)
`unzip`	get contents of zip archive

Πίνακας 1.1: Περίληψη βασικών εντολών στο Unix.

Πίνακας 1.2: Βασικές συναρτήσεις (intrinsic functions) της Fortran 77. Η δεύτερη και τρίτη στήλη του πίνακα αναφέρονται στον τύπο μεταβλητής που δέχεται/επιστρέφει η συνάρτηση αντίστοιχα. Το C αντιστοιχεί σε μεταβλητή τύπου CHARACTER, το D αντιστοιχεί σε μεταβλητή τύπου REAL*8, το I αντιστοιχεί σε μεταβλητή τύπου INTEGER, το L αντιστοιχεί σε μεταβλητή τύπου LOGICAL, το R αντιστοιχεί σε μεταβλητή τύπου REAL, το X αντιστοιχεί σε μεταβλητή τύπου COMPLEX. Αν είναι πολλά γράμματα μαζί σημαίνει ότι μπορεί να έχουμε περισσότερους από ένα τύπους μεταβλητής. Αν τα γράμματα χωρίζονται με κόμμα, τότε η συνάρτηση παίρνει περισσότερα του ενός ορίσματα. Έτσι λ.χ. η συνάρτηση ABS παίρνει σαν όρισμα REAL*8, INTEGER ή REAL (DIR), και το αποτέλεσμα είναι αντίστοιχα REAL*8, INTEGER, REAL (DIR). Η συνάρτηση CMPLX όταν παίρνει δύο ορίσματα τύπου REAL*8, INTEGER ή REAL (DIR,DIR), επιστρέφει στην έξοδο έναν COMPLEX (X). Όταν παίρνει ένα όρισμα τύπου REAL*8, INTEGER, REAL ή COMPLEX (DIRX), επιστρέφει στην έξοδο έναν COMPLEX (X). Από την ιστοσελίδα http://www.obliquity.com/computer/fortran/intrinsic.html.

Συνάρτηση	Όρισμα(τα)	Αποτέλεσμα	Περιγραφή
ABS	X	R	modulus of a complex number
ABS	DIR	DIR	absolute value of a number
ACOS	DR	DR	arccosine of a number
AIMAG	X	R	imaginary part of a complex number
AINT	DR	DR	truncates fractional part but preserves data type
ANINT	DR	DR	rounds to nearest whole number but preserves data type
ASIN	DR	DR	arcsine of a number
ATAN	DR	DR	arctangent of a number
ATAN2	DR,DR	DR	arctangent of arg1 divided by arg2 resolved into the correct quadrant
CMPLX	DIRX	X	converts to the COMPLEX data type
CMPLX	DIR,DIR	X	converts to the COMPLEX data type arg1 + i arg2
CONJG	X	X	complex conjugate of a complex number
COS	DRX	DRX	cosine of an angle in radians
COSH	DR	DR	hyperbolic cosine
DBLE	DIRX	D	converts to the DOUBLE PRECISION data type
DIM	DIR,DIR	DIR	if arg1 > arg2, then returns arg1 - arg2; otherwise 0

Συνεχίζεται στην επόμενη σελίδα...

Πίνακας 1.2: Συνέχεια...

Συνάρτηση	Όρισμα(τα)	Αποτέλεσμα	Περιγραφή
DPROD	R,R	D	double precision product of two single precision numbers
EXP	DRX	DRX	exponential
INT	DIRX	I	converts to the INTEGER data type by truncation
LOG	DRX	DRX	natural logarithm
LOG10	DRX	DRX	common logarithm
MAX	DIR,DIR,...	DIR	maximum value of arguments
MIN	DIR,DIR,...	DIR	minimum value of arguments
MOD	DIR,DIR	DIR,DIR	arg1 modulo arg2
NINT	DR	I	converts to the INTEGER data type by rounding
REAL	X	R	real part of a complex number
REAL	DIR	R	converts to the REAL data type
SIGN	DIR,DIR	DIR	if arg2 < 0, then returns -arg1; else +arg1
SIN	DRX	DRX	sine of an angle in radians
SINH	DR	DR	hyperbolic sine
SQRT	DRX	DRX	square root
TAN	DR	DR	tangent of an angle in radians
TANH	DR	DR	hyperbolic tangent

Πίνακας 1.3: Περίληψη βασικών εντολών στο Emacs.

Leaving Emacs		
suspend Emacs (or iconify it under X)	`C-z`	
exit Emacs permanently	`C-x C-c`	
Files		
read a file into Emacs	`C-x C-f`	
save a file back to disk	`C-x C-s`	
save **all** files	`C-x s`	
insert contents of another file into this buffer	`C-x i`	
replace this file with the file you really want	`C-x C-v`	
write buffer to a specified file	`C-x C-w`	
toggle read-only status of buffer	`C-x C-q`	
Getting Help		
The help system is simple. Type `C-h` (or `F1`) and follow the directions. If you are a first-time user, type `C-h t` for a **tutorial**.		
remove help window	`C-x 1`	
scroll help window	`C-M-v`	
apropos: show commands matching a string	`C-h a`	
describe the function a key runs	`C-h k`	
describe a function	`C-h f`	
get mode-specific information	`C-h m`	
Error Recovery		
abort partially typed or executing command	`C-g`	
recover files lost by a system crash	`M-x recover-session`	
undo an unwanted change	`C-x u`, `C-_` or `C-/`	
restore a buffer to its original contents	`M-x revert-buffer`	
redraw garbaged screen	`C-l`	
Incremental Search		
search forward	`C-s`	
search backward	`C-r`	
regular expression search	`C-M-s`	
exit incremental search	`RET`	
abort current search	`C-g`	
Use `C-s` or `C-r` again to repeat the search in either direction. If Emacs is still searching, `C-g` cancels only the part not matched.		
Motion		
entity to move over	**backward**	**forward**
character	`C-b`	`C-f`

Συνεχίζεται στην επόμενη σελίδα...

Πίνακας 1.3: Συνέχεια...

word	M-b	M-f
line	C-p	C-n
go to line beginning (or end)	C-a	C-e
sentence	M-a	M-e
paragraph	M-{	M-}
page	C-x [	C-x]
sexp	C-M-b	C-M-f
function	C-M-a	C-M-e
go to buffer beginning (or end)	M-<	M->
scroll to next screen	C-v	
scroll to previous screen	M-v	
scroll left	C-x <	
scroll right	C-x >	
scroll current line to center of screen	C-u C-l	
Killing and Deleting		
entity to kill	**backward**	**forward**
character (delete, not kill)	DEL	C-d
word	M-DEL	M-d
line (to end of)	M-0 C-k	C-k
kill **region**	C-w	
copy region to kill ring	M-w	
yank back last thing killed	C-y	
replace last yank with previous kill	M-y	
Marking		
set mark here	C-@ or C-SPC	
exchange point and mark	C-x C-x	
mark **paragraph**	M-h	
mark **page**	C-x C-p	
mark entire **buffer**	C-x h	
Query Replace		
interactively replace a text string	M-% *or* M-x query-replace	
using regular expressions	M-x query-replace-regexp	
Valid responses in query-replace mode are:		
replace this one, go on to next	SPC	
replace this one, don't move	,	
skip to next without replacing	DEL	

Συνεχίζεται στην επόμενη σελίδα...

Πίνακας 1.3: Συνέχεια...

replace all remaining matches	`!`	
exit query-replace	`RET`	
Buffers		
select another buffer	`C-x b`	
list all buffers	`C-x C-b`	
kill a buffer	`C-x k`	
Multiple Windows		
When two commands are shown, the second is a similar command for a frame instead of a window.		
delete all other windows	`C-x 1`	`C-x 5 1`
split window, above and below	`C-x 2`	`C-x 5 2`
delete this window	`C-x 0`	`C-x 5 0`
split window, side by side	`C-x 3`	
scroll other window	`C-M-v`	
switch cursor to another window	`C-x o`	`C-x 5 o`
select buffer in other window	`C-x 4 b`	`C-x 5 b`
display buffer in other window	`C-x 4 C-o`	`C-x 5 C-o`
find file in other window	`C-x 4 f`	`C-x 5 f`
find file read-only in other window	`C-x 4 r`	`C-x 5 r`
run Dired in other window	`C-x 4 d`	`C-x 5 d`
find tag in other window	`C-x 4 .`	`C-x 5 .`
grow window taller	`C-x ^`	
shrink window narrower	`C-x {`	
grow window wider	`C-x }`	
Formatting		
indent current **line** (mode-dependent)	`TAB`	
insert newline after point	`C-o`	
fill paragraph	`M-q`	
set fill column	`C-x f`	
Case Change		
uppercase word	`M-u`	
lowercase word	`M-l`	
capitalize word	`M-c`	
uppercase region	`C-x C-u`	
lowercase region	`C-x C-l`	
The Minibuffer		

Συνεχίζεται στην επόμενη σελίδα...

Πίνακας 1.3: Συνέχεια...

The following keys are defined in the minibuffer.	
complete as much as possible	`TAB`
complete up to one word	`SPC`
complete and execute	`RET`
show possible completions	`?`
fetch previous minibuffer input	`M-p`
fetch later minibuffer input or default	`M-n`
abort command	`C-g`
Type `C-x ESC ESC` to edit and repeat the last command that used the minibuffer. Type `F10` to activate menu bar items on text terminals.	
Spelling Check	
check spelling of current word	`M-$`
check spelling of all words in region	`M-x ispell-region`
check spelling of entire buffer	`M-x ispell-buffer`
Shells	
execute a shell command	`M-!`
run a shell command on the region	`M-|`
filter region through a shell command	`C-u M-|`
start a shell in window `*shell*`	`M-x shell`
Info – Getting Help Within Emacs	
enter the Info documentation reader	`C-h i`
find specified function or variable in Info	`C-h S`
Moving within a node:	
scroll forward	`SPC`
scroll reverse	`DEL`
Moving between nodes:	
next node	`n`
previous node	`p`
move **up**	`u`
select menu item by name	`m`
follow cross reference (return with `l`)	`f`
return to last node you saw	`l`
return to directory node	`d`
go to top node of Info file	`t`
go to any node by name	`g`
Other:	

Συνεχίζεται στην επόμενη σελίδα...

Πίνακας 1.3: Συνέχεια...

run Info **tutorial**	`h`
look up a subject in the indices	`i`
search nodes for regexp	`s`
quit Info	`q`

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Περιγραφή της Κίνησης

Στο κεφάλαιο αυτό θα δείξουμε πώς να προγραμματίσουμε απλές εξισώσεις τροχιάς ενός σωματιδίου και πώς να κάνουμε βασική ανάλυση των αριθμητικών αποτελεσμάτων. Χρησιμοποιούμε απλές μεθόδους απεικόνισης των τροχιών. Στην παράγραφο 2.3 μελετάμε την επίδραση των συστηματικών σφαλμάτων που υπεισέρχονται σε απλά αριθμητικά πρότυπα της κίνησης σωματιδίου που σκεδάζεται πάνω σε σκληρά και αμετακίνητα εμπόδια.

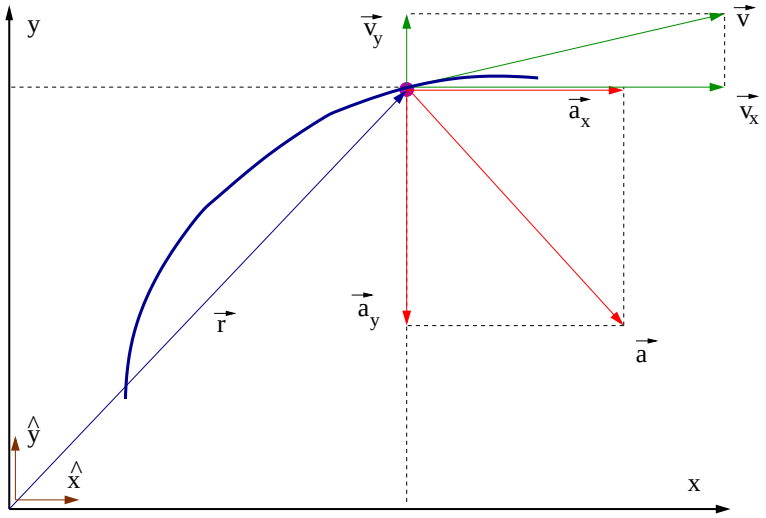
2.1 Κίνηση στο Επίπεδο

Σωματίδιο κινείται στο επίπεδο και η θέση του περιγράφεται σε ένα καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων από τις συντεταγμένες $(x(t), y(t))$ η οποία σα συνάρτηση του χρόνου δίνει την εξίσωση της τροχιάς του σωματιδίου. Το διάνυσμα θέσης του σωματιδίου είναι το $\vec{r}(t) = x(t)\,\hat{x} + y(y)\,\hat{y}$, όπου $\hat{x}$ και $\hat{y}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα στους άξονες x και y αντίστοιχα. Το διάνυσμα της ταχύτητας είναι το $\vec{v}(t) = v_x(t)\,\hat{x} + v_y(t)\,\hat{y}$ όπου

$$\begin{aligned} \vec{v}(t) &= \frac{d\vec{r}(t)}{dt} \\ v_x(t) = \frac{dx(t)}{dt} \qquad & v_y(t) = \frac{dy(t)}{dt}\,, \end{aligned} \tag{2.1}$$

Η επιτάχυνση $\vec{a}(t) = a_x(t)\,\hat{x} + a_y(t)\,\hat{y}$ δίνεται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \vec{a}(t) = \frac{d\vec{v}(t)}{dt} &= \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} \\ a_x(t) = \frac{dv_x(t)}{dt} = \frac{d^2x(t)}{dt^2} \qquad & a_y(t) = \frac{dv_y(t)}{dt} = \frac{d^2y(t)}{dt^2}\,. \end{aligned} \tag{2.2}$$

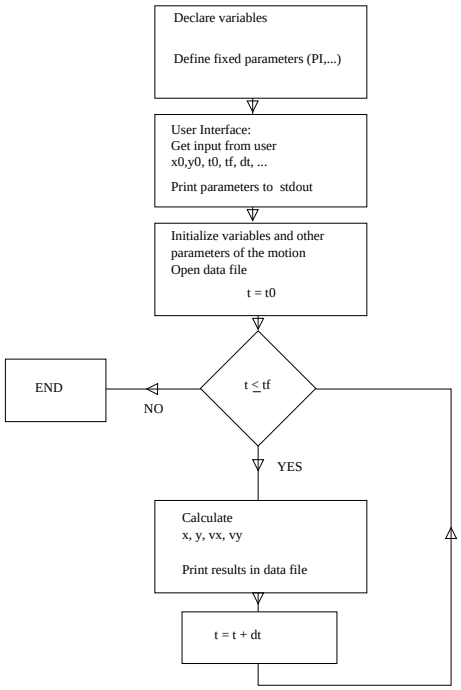


Σχήμα 2.1: Τροχιά κινητού υλικού σημείου στο επίπεδο. Φαίνονται τα διανύσματα θέσης $\vec{r}$, ταχύτητας $\vec{v}$ και επιτάχυνσης $\vec{a}$ και οι αντίστοιχες καρτεσιανές συντεταγμένες στο επιλεγμένο σύστημα αναφοράς σε ένα σημείο της τροχιάς.

Στην παράγραφο αυτή θα υποθέσουμε ότι μας δίνονται οι συναρτήσεις $(x(t), y(t))$. Από αυτές, παραγωγίζοντας σύμφωνα με τις παραπάνω σχέσεις, μπορούμε να πάρουμε την ταχύτητα και την επιτάχυνση. Σκοπός μας είναι να γράφουμε απλά προγράμματα τα οποία θα υπολογίζουν τις *τιμές* των συναρτήσεων αυτών σε ένα χρονικό διάστημα $[t_0, t_f]$ όπου t_0 η αρχική χρονική στιγμή και t_f η τελική. Η συνεχείς συναρτήσεις $x(t), y(t), v_x(t), v_y(t)$ θα προσεγγίζονται από μια διακριτή ακολουθία τιμών των συναρτήσεων στις χρονικές στιγμές $t_0, t_0+\delta t, t_0+2\delta t, t_0+3\delta t, \ldots$ έτσι ώστε όλες οι τιμές $t_0 + n\delta t \leq t_f$[1].

Αρχίζουμε σχεδιάζοντας το πρότυπο (template) ενός προγράμματος που θα κάνει τον παραπάνω υπολογισμό. Κάνοντας αυτό το σχεδιασμό προσεκτικά, το μόνο που θα μας απασχολεί κάθε φορά που θέλουμε να μελετήσουμε την κίνηση ενός άλλου κινητού θα είναι η ειδική εφαρμογή των εξισώσεων κίνησης. Στο Σχήμα 2.2 φαίνεται το *λογικό διάγραμμα* των βασικών λειτουργιών του προγράμματος. Αυτό μας βοηθάει να έχουμε μία εποπτική εικόνα όταν προγραμματίζουμε τις λεπτομέρειες και μας βοηθάει να ελέγξουμε τη βασική λογική του αλγόριθμου που θα χρησιμοποιήσουμε. Στα ορθογώνια παραλληλόγραμμα σκιαγρα-

[1]Μπορεί η μεγαλύτερη από τις τιμές αυτές να είναι μικρότερη από t_f και η t_f να μη συμπεριλαμβάνεται στην ακολουθία.



Σχήμα 2.2: Λογικό διάγραμμα ενός τυπικού προγράμματος των εξισώσεων κίνησης.

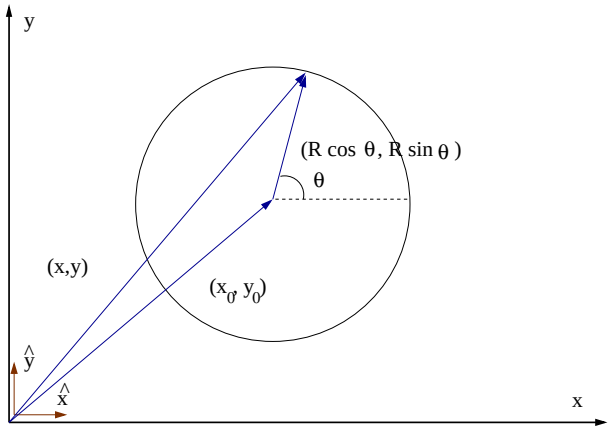
φούμε τις σημαντικές εντολές των δομικών στοιχείων του προγράμματος ενώ στους ρόμβους σημειώνουμε τις *διακλαδώσεις* (branching points) του προγράμματος που προκύπτουν από τις δυνατές τιμές μιας λογικής πρότασης. Με γραμμές ενώνουμε τη λογική σειρά με την οποία εκτελούνται οι διαδικασίες.

Το πρώτο κομμάτι του προγράμματος κάνει τις απαραίτητες δηλώσεις των τύπων των μεταβλητών που θα χρησιμοποιήσουμε. Αν υπάρχουν παράμετροι που παραμένουν σταθερές κατά τη διάρκεια της εκτέλεσης του προγράμματος (λχ. $\pi = 3.1459\ldots$, $g = 9.81$, κλπ) τις ορίζουμε εδώ. Στη συνέχεια το πρόγραμμα αλληλεπιδρά με το χρήστη (user interface) και ζητάει τις μεταβλητές παραμέτρους που καθορίζει ο χρήστης: x_0, y_0, t_0, t_f, $\delta t \ldots$. Το πρόγραμμα τυπώνει αυτές τις τιμές στο `stdout` για να μπορεί ο χρήστης να τις ελέγξει ως προς την ορθότητα και να τις αποθηκεύσει για αναφορά στα δεδομένα του. Πριν τον κύριο υπολογισμό, ο χρήστης πρέπει να δώσει τις κατάλληλες αρχικές τιμές σε ορισμένες μεταβλητές, ειδικά στο χρόνο $t = t_0$.

Ο κύριος υπολογισμός γίνεται σε ένα *βρόχο* (loop) ο οποίος εκτελείται όσο ο χρόνος $t \leq t_f$. Υπολογίζονται οι τιμές της θέσης και της ταχύτητας $x(t), y(t), v_x(t), v_y(t)$ και τυπώνονται μαζί με το χρόνο t σε ένα

αρχείο. Εδώ θα κάνουμε τη σημαντική για μας σύμβαση στο φορμά της εξόδου. Αυτό είναι σημαντικό ώστε να έχουμε ενιαίο λογισμικό ανάλυσης των αποτελεσμάτων. Ορίζουμε σε κάθε γραμμή του αρχείου αυτού οι πρώτες πέντε στήλες να είναι οι τιμές t, x, y, vx, vy. Μπορούν να υπάρχουν και άλλες στήλες αν χρειαστεί στο ειδικό πρόβλημα που θα μελετάμε, αλλά οι πρώτες πέντε θα είναι πάντα αυτές.

Αφού γίνει αυτό ειδικευόμαστε στο πρόβλημα που θα μελετήσουμε. Ας θεωρήσουμε αρχικά την περίπτωση ενός υλικού σημείου το οποίο εκτελεί ομαλή κυκλική κίνηση. Θεωρούμε το κέντρο του κύκλου (x_0, y_0), την ακτίνα R και τη γωνιακή ταχύτητα ω να είναι οι βασικές παράμετροι που προσδιορίζουν την κίνηση. Η θέση πάνω στον κύκλο μπορεί τότε να προσδιοριστεί από τη γωνία θ όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.3. Θα ορίσουμε την αρχική χρονική στιγμή t_0 να είναι $\theta = 0$.



Σχήμα 2.3: Η τροχιά του υλικού σημείου που εκτελεί την ομαλή κυκλική κίνηση που υπολογίζει το πρόγραμμα `Circle.f`.

Έτσι οι εξισώσεις που δίνουν τη θέση του κινητού κάθε χρονική στιγμή είναι

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + R\cos\left(\omega(t-t_0)\right) \\ y(t) &= y_0 + R\sin\left(\omega(t-t_0)\right) \ . \end{aligned} \tag{2.3}$$

Παραγωγίζοντας ως προς t παίρνουμε την ταχύτητα

$$\begin{aligned} v_x(t) &= -\omega R\sin\left(\omega(t-t_0)\right) \\ v_y(t) &= \omega R\cos\left(\omega(t-t_0)\right) \ , \end{aligned} \tag{2.4}$$

και την επιτάχυνση

$$\begin{aligned} a_x(t) &= -\omega^2 R\cos\left(\omega(t-t_0)\right) = -\omega^2(x(t)-x_0) \\ a_y(t) &= -\omega^2 R\sin\left(\omega(t-t_0)\right) = -\omega^2(y(t)-y_0)\,. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Από τις παραπάνω εξισώσεις παρατηρούμε τις γνωστές γεωμετρικές σχέσεις $\vec{R}\cdot\vec{v}=0$ ($\vec{R}\equiv\vec{r}-\vec{r}_0$, $\vec{v}\perp\vec{R}$, $\vec{v}$ εφαπτόμενο στην τροχιά) και $\vec{a}=-\omega^2\vec{R}$ ($\vec{R}$ και $\vec{a}$ αντιπαράλληλα, $\vec{a}\perp\vec{v}$).

Μπορούμε τώρα να σχεδιάσουμε τη δομή των δεδομένων για το πρόγραμμα που θα γράψουμε, η οποία στην περίπτωσή μας είναι πολύ απλή. Η σταθερή γωνιακή ταχύτητα ω του υλικού σημείου αποθηκεύεται στην πραγματική (`REAL`) μεταβλητή `omega`. Το κέντρο του κύκλου (x_0, y_0), η ακτίνα R και η γωνία θ αντιστοιχούν στις `REAL` μεταβλητές `x0, y0, R, theta`. Οι χρονικές στιγμές που υπολογίζουμε τη θέση και ταχύτητα του κινητού καθορίζονται από τις παραμέτρους $t_0, t_f, \delta t$ που αντιστοιχούν στο πρόγραμμα στις `REAL` μεταβλητές `t0, tf, dt`. Η τρέχουσα θέση του κινητού $(x(t), y(t))$ υπολογίζεται και αποθηκεύεται στις `REAL` μεταβλητές `x, y` και η στιγμιαία του ταχύτητα $(v_x(t), v_y(t))$ στις `REAL` μεταβλητές `vx, vy`. Οι δηλώσεις αυτές γίνονται στην αρχή του προγράμματος με τις εντολές:

```
real x0,y0,R,x,y,vx,vy,t,t0,tf,dt,PI
real theta,omega
parameter(PI=3.1415927)
```

όπου ορίσαμε και την τιμή[2] του $\pi = 3.1415927$ με την εντολή `parameter`.

Το διαδραστικό με το χρήστη κομμάτι του προγράμματος (user interface) ζητάει από το χρήστη τις τιμές των παραμέτρων που του δίνουμε τη δυνατότητα να προσδιορίζει: `omega, x0, y0, R, t0, tf, dt`. Αρχικά το πρόγραμμα τυπώνει ένα μήνυμα προτροπής (prompt) στο χρήστη προσδιορίζοντας τη μεταβλητή που ζητά να διαβάσει. Αυτό γίνεται με απλές `print` εντολές. Η ανάγνωση των τιμών των παραμέτρων γίνεται από το `stdin` με εντολές `read(5,*)`. Το "5" είναι που προσδιορίζει να διαβαστεί μία γραμμή από το `stdin`. Αφού διαβαστούν οι παράμετροι, το πρόγραμμα τυπώνει τις τιμές που διάβασε στο `stdout`. Αυτό γίνεται για να αποφευχθούν τυπογραφικά λάθη και για να ενημερωθεί ο χρήστης για την τιμή που πραγματικά διάβασε το πρόγραμμα στη μνήμη του υπολογιστή. Επίσης, οδηγώντας το `stdout` σε ένα αρχείο στο σκληρό δίσκο, ο χρήστης μπορεί να αποθηκεύσει τα δεδομένα που εισήγαγε για

[2] Θυμίζουμε στον αναγνώστη ότι οι μεταβλητές `REAL` μονής ακρίβειας (4 bytes) έχουν ακρίβεια περίπου 7 δεκαδικών ψηφίων.

μελλοντική αναφορά και για χρήση στην ανάλυση των αποτελεσμάτων του:

```
print *,'# Enter omega:'
read(5,*)omega
print *,'# Enter center of circle (x0,y0) and radius R:'
read(5,*)x0,y0,R
print *,'# Enter t0,tf,dt:'
read(5,*)t0,tf,dt
print *,'# omega= ',omega
print *,'# x0= ',x0,' y0= ',y0
print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
```

Στη συνέχεια το πρόγραμμα θέτει την απαραίτητη αρχική κατάσταση για να γίνει ο υπολογισμός. Αυτό, εκτός από το να θέσει την τιμή του αρχικού χρόνου `t = t0`, περιλαμβάνει και βασικό έλεγχο για τη νομιμότητα των παραμέτρων που εισήγαγε ο χρήστης. Οι έλεγχοι είναι απαραίτητοι γιατί όταν γράφουμε ένα πρόγραμμα κάνουμε ορισμένες υποθέσεις απαραίτητες για την ορθή λειτουργία του προγράμματος που μπορεί ο χρήστης από σφάλμα ή άγνοια να μην έχει σεβαστεί. Όταν, για παράδειγμα, γράφουμε την έκφραση `2.0*PI/omega` υποθέτουμε ότι η τιμή του `omega` είναι μη μηδενική ώστε να γίνει η διαίρεση χωρίς να προκύψει μοιραίο σφάλμα κατά την εκτέλεση του προγράμματος. Το πρόγραμμά μας για να λειτουργήσει όπως το σχεδιάσαμε θα απαιτήσουμε να έχουμε $R > 0$ και $\omega > 0$. Αυτό θα το ελέγξουμε με μία εντολή `if` και αν δεν πληρούνται οι υποθέσεις σταματάμε τελείως το πρόγραμμα με την εντολή `stop`[3]. Το πρόγραμμα επίσης θα ανοίξει το αρχείο `Circle.dat` στο οποίο θα αποθηκεύσουμε τις υπολογισμένες τιμές της θέσης και ταχύτητας του κινητού.

```
if(R     .le. 0.0) stop 'Illegal value of R'
if(omega .le. 0.0) stop 'Illegal value of omega'
print *,'# T= ',2.0*PI/omega
open(unit=11,file='Circle.dat')
t   =  t0
```

Αν $R \leq 0$ ή $\omega \leq 0$, τότε εκτελούνται οι αντίστοιχες εντολές `stop`. Μετά την εντολή `stop` βάζουμε ένα πληροφοριακό μήνυμα στο χρήστη, ώστε να ξέρει γιατί σταμάτησε το πρόγραμμα, το οποίο τυπώνεται στο `stdout` όταν εκτελείται η εντολή `stop`. Επίσης υπολογίζουμε και τυπώνουμε την

[3]Παρατηρήστε πως δεν ελέγξαμε όλες τις υποθέσεις που κάνουμε στο πρόγραμμα. Προσθέστε εσείς τις αναγκαίες σχετικές εντολές.

περίοδο της κυκλικής κίνησης $T = 2\pi/\omega$. Στην εντολή open επιλέξαμε το unit 11 για να γράφουμε στο Circle.dat. Η επιλογή του αριθμού αυτού είναι ελεύθερη για τον προγραμματιστή που μπορεί αν είναι ήσυχος αν διαλέξει έναν οποιοδήποτε αριθμό από 10 έως 99 που δε χρησιμοποιείται ήδη.

Τώρα είμαστε στη φάση που μπορεί να γίνει ο υπολογισμός. Αυτό θα γίνει με ένα βρόχο της μορφής

```
t   =  t0
do while(t .le. tf)
   .........
 t  =  t + dt
enddo
```

Η πρώτη εντολή (που τη δείξαμε και παραπάνω) θέτει την αρχική τιμή του χρόνου. Οι εντολές που περικλείονται ανάμεσα στο do while(*συνθήκη*) και enddo εκτελούνται όσο η *συνθήκη* είναι αληθής. Προσέξτε τη σημασία της εντολής t = t + dt χωρίς την οποία ο βρόχος θα εκτελείται επ' αόριστον. Στο ειδικό πρόβλημα που μελετάμε, οι εντολές που μπαίνουν στη θέση των ..... υπολογίζουν τη θέση και την ταχύτητα και τις τυπώνουν στο αρχείο Circle.dat:

```
theta = omega * (t-t0)
x  =  x0+R*cos(theta)
y  =  y0+R*sin(theta)
vx =  -omega*R*sin(theta)
vy =   omega*R*cos(theta)
write(11,*)t,x,y,vx,vy
```

Στον υπολογισμό χρησιμοποιούμε τις συναρτήσεις sin και cos που είναι κτισμένες μέσα στη Fortran 77. Χρησιμοποιούμε την ενδιάμεση μεταβλητή theta για να υπολογίσουμε τη φάση $\theta(t) = \omega(t - t_0)$. Με την εντολή write(11,*) γράφουμε στο unit 11 το οποίο συνδέσαμε παραπάνω χρησιμοποιώντας την εντολή open με το αρχείο Circle.dat.

Το πρόγραμμα το πληκτρολογούμε στο αρχείο Circle.f. Η κατάληξη ".f" υποδηλώνει στο μεταγλωττιστή ότι το αρχείο περιέχει κώδικα στη γλώσσα Fortran 77. Για να το μεταγλωττίσουμε και να το τρέξουμε δίνουμε τις εντολές:

```
> f77 Circle.f -o cl
> ./cl
```

Με το διακόπτη `-o cl` δίνουμε την εντολή στο μεταγλωττιστή `f77` να ονομάσει το εκτελέσιμο αρχείο[4] `cl`. Η δεύτερη εντολή (`./cl`) φορτώνει τις μεταγλωττισμένες εντολές στη μνήμη του υπολογιστή για εκτέλεση. Στη συνέχεια το πρόγραμμά μας ζητάει τα δεδομένα και εκτελεί τον υπολογισμό. Μια πλήρης τυπική συνεδρία εκτέλεσης του προγράμματος δείχνεται παρακάτω:

```
> f77 Circle.f -o cl
> ./cl
 # Enter omega:
1.0
 # Enter center of circle (x0,y0) and radius R:
1.0 1.0 0.5
 # Enter t0,tf,dt:
0.0 20.0 0.01
 # omega=   1.
 # x0=   1. y0=   1. R=   0.5
 # t0=   0. tf=   20. dt=   0.00999999978
 # T=   6.28318548
```

Οι γραμμές που αρχίζουν από "#" τυπώνονται από το πρόγραμμα ενώ οι γραμμές με αριθμούς χωρίς "#" είναι οι αριθμητικές τιμές των παραμέτρων που εισάγει ο χρήστης. Αφού πληκτρολογήσει τα δεδομένα, ο χρήστης χρησιμοποιεί το πλήκτρο `Enter` για να τα εισάγει στη μνήμη του υπολογιστή που χρησιμοποιεί το πρόγραμμα. Εδώ $\omega = 1.0$, $x_0 = y_0 = 1.0$, $R = 0.5$, $t_0 = 0.0$, $t_f = 20.0$ και $\delta t = 0.01$.

Το πρόγραμμα μπορείτε να το εκτελέσετε πολλές φορές για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων με τη βοήθεια του editor. Σε ένα αρχείο με όνομα λ.χ. `Circle.in` τυπώστε τα δεδομένα που θέλετε να εισάγετε στο πρόγραμμα:

```
1.0            omega
1.0  1.0 0.5   (x0, y0) , R
0.0 20.0 0.01  t0 tf dt
```

Σε κάθε γραμμή του αρχείου βάζουμε τις τιμές των παραμέτρων που διαβάζει κάθε εντολή `read` με τη σωστή σειρά. Αφού δώσουμε όλες τις παραμέτρους, η Fortran 77 προχωράει στην επόμενη εντολή και η επόμενη εντολή read θα διαβάσει μια νέα σειρά από το αρχείο. Έτσι

[4] Θυμίζουμε ότι αν δε βάλουμε το διακόπτη αυτό το εκτελέσιμο αρχείο θα ονομαστεί από το μεταγλωττιστή `a.out` από προεπιλογή.

δίπλα από τις παραμέτρους βάζουμε σχόλια για το χρήστη που του θυμίζουν τη σειρά που διαβάζονται οι μεταβλητές και που το πρόγραμμα θα αγνοήσει. Το πρόγραμμα τώρα μπορούμε να το τρέξουμε με την εντολή:

```
> ./cl < Circle.in > Circle.out
```

Η εντολή `./cl` τρέχει τις εντολές που περιέχονται στο εκτελέσιμο αρχείο `cl`. Το `< Circle.in` οδηγεί τα περιεχόμενα του αρχείου `Circle.in` στο standard input (`stdin`) του προγράμματος, εξαναγκάζοντας το `cl` να διαβάσει τα δεδομένα από το αρχείο αυτό. Το `> Circle.out` οδηγεί το `stdout` του προγράμματος `cl` στο αρχείο `Circle.out` του οποίου τα περιεχόμενα μπορούμε να τα δούμε, αφού τρέξουμε το πρόγραμμα, με την εντολή `cat`:

```
> cat Circle.out
 # Enter omega:
 # Enter center of circle (x0,y0) and radius R:
 # Enter t0,tf,dt:
 # omega=   1.
 # x0=   1. y0=   1. R=   0.5
 # t0=   0. tf=   20. dt=   0.00999999978
 # T=   6.28318548
```

Κλείνουμε την παράγραφο αυτή παραθέτοντας για διευκόλυνση του αναγνώστη ολόκληρο το πρόγραμμα που πληκτρολογήσαμε στο αρχείο `Circle.f`:

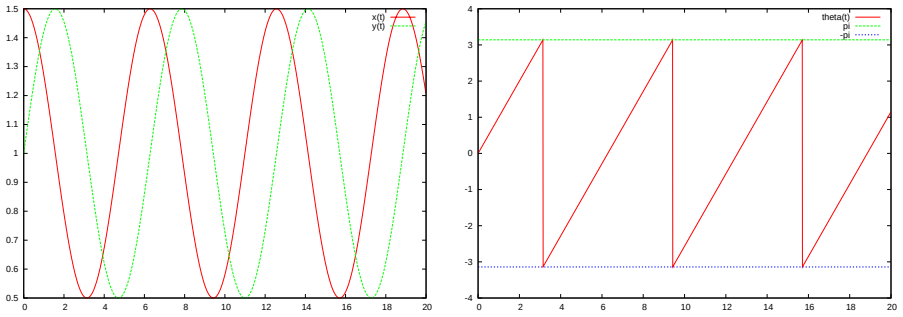
```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File Circle.f
C     Constant angular velocity circular motion
C     Set (x0,y0) center of circle, its radius R and omega.
C     At t=t0, the particle is at theta=0
C    -------------------------------------------------------------
      program Circle
      implicit none
C    -------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real x0,y0,R,x,y,vx,vy,t,t0,tf,dt,PI
      real theta,omega
      parameter(PI=3.1415927)
C    -------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
```

```
      print *,'# Enter omega:'
      read(5,*)omega
      print *,'# Enter center of circle (x0,y0) and radius R:'
      read(5,*)x0,y0,R
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# omega= ',omega
      print *,'# x0= ',x0,' y0= ',y0,' R= ',R
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C     ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      if(R     .le. 0.0) stop 'Illegal value of R'
      if(omega .le. 0.0) stop 'Illegal value of omega'
      print *,'# T= ',2.0*PI/omega
      open(unit=11,file='Circle.dat')
C     ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   =  t0
      do while(t .le. tf)
       theta = omega * (t-t0)
       x  =  x0+R*cos(theta)
       y  =  x0+R*sin(theta)
       vx =  -omega*R*sin(theta)
       vy =   omega*R*cos(theta)
       write(11,*)t,x,y,vx,vy
       t  =  t + dt
      enddo
      close(11)
      end
```

2.1.1 Απεικόνιση των Δεδομένων

Οι γραφικές παραστάσεις των αποτελεσμάτων που πήραμε στην προηγούμενη παράγραφο μελετώνται με τη βοήθεια του προγράμματος gnuplot. Υπενθυμίζουμε ότι τα δεδομένα το πρόγραμμά μας τα αποθηκεύει στο αρχείο Circle.dat σε πέντε στήλες: Η 1η είναι ο χρόνος t, η 2η και 3η οι συντεταγμένες x, y και η 4η και 5η οι συντεταγμένες της ταχύτητας vx, vy. Τα διαγράμματα $x(t)$ και $y(t)$ παράγονται από τις εντολές (που δίνονται μέσα από το gnuplot) και μπορείτε να τα δείτε στο (αριστερό) Σχήμα 2.4:

```
gnuplot> plot   "Circle.dat" using 1:2 with lines title "x(t)"
gnuplot> replot "Circle.dat" using 1:3 with lines title "y(t)"
```



Σχήμα 2.4: Τα διαγράμματα $(x(t), y(t))$ (αριστερά) και $\theta(t)$ (δεξιά) των δεδομένων που παράγονται από το πρόγραμμα `Circle.f` για $\omega = 1.0$, $x_0 = y_0 = 1.0$, $R = 0.5$, $t_0 = 0.0$, $t_f = 20.0$ και $\delta t = 0.01$.

Η δεύτερη εντολή (`replot`) βάζει τη δεύτερη γραφική παράσταση μαζί με την πρώτη.

Ας δούμε τώρα πώς μπορούμε να φτιάξουμε τη γραφική παράσταση της γωνίας $\theta(t)$. Αυτό μπορούμε να το κάνουμε μέσα από το gnuplot, χωρίς να γράψουμε κάποιο καινούργιο πρόγραμμα, από τα δεδομένα μέσα στο αρχείο `Circle.dat`. Παρατηρούμε ότι $\theta(t) = \tan^{-1}\left((y - y_0)/(x - x_0)\right)$. Η συνάρτηση `atan2` (που υπάρχει και στη Fortran) είναι διαθέσιμη στο gnuplot[5]. Για να βρούμε πώς δουλεύει χρησιμοποιούμε τη βοήθεια στο gnuplot:

```
gnuplot> help atan2
 The `atan2(y,x)` function returns the arc tangent (inverse tangent) of the
 ratio of the real parts of its arguments.  `atan2` returns its argument in
 radians or degrees, as selected by `set angles`, in the correct quadrant.
```

Άρα αρκεί να καλέσουμε τη συνάρτηση αυτή με εντολή της μορφής `atan2(y-y0,x-x0)`. Στην περίπτωσή μας `x0=y0=1` ενώ τα `x,y` είναι αντίστοιχα στη 2η και 3η στήλη κάθε γραμμής του αρχείου `Circle.dat`. Θα φτιάξουμε μία κατάλληλη έκφραση στην εντολή `using` στο gnuplot όπως και στη σελίδα 56 όπου `$2` η τιμή της 2ης και `$3` η τιμή της 3ης στήλης:

[5]Όπως και όλες οι μαθηματικές συναρτήσεις που υπάρχουν στη μαθηματική βιβλιοθήκη της γλώσσας C. Δώστε την εντολή `help functions` για να δείτε σχετικά.

```
gnuplot> x0 = 1 ; y0 = 1
gnuplot> plot "Circle.dat" using 1:(atan2($3-y0,$2-x0)) \
                           with lines title "theta(t)",pi,-pi
```

Η δεύτερη εντολή δίνεται σε μία γραμμή την οποία τη σπάσαμε με το χαρακτήρα \ ώστε να χωράει στο κείμενο[6]. Προσέξτε πώς ορίσαμε τις τιμές των μεταβλητών x0,y0 μέσα στο gnuplot και τις χρησιμοποιήσαμε στην έκφραση atan2($3-x0,$2-y0) αντί (ισοδύναμα) να γράφαμε atan2($3-1,$2-1). Επίσης μαζί με τη γραφική παράσταση της $\theta(t)$ κάνουμε και τις γραφικές παραστάσεις των σταθερών συναρτήσεων $f_1(t) = \pi$, $f_2(t) = -\pi$ ώστε να ελέγξουμε τα όρια των τιμών της $\theta(t)$. Η μεταβλητή[7] pi στο gnuplot έχει ορισμένη εσωτερικά την τιμή π. Το αποτέλεσμα μπορείτε να το δείτε στο (δεξί) Σχήμα 2.4.

Οι συνιστώσες των ταχυτήτων $(v_x(t), v_y(t))$ σα συνάρτηση του χρόνου και η τροχιά του υλικού σημείου $\vec{r}(t)$ μπορούν να απεικονιστούν με τις εντολές:

```
gnuplot> plot   "Circle.dat" using 1:4 title "v_x(t)" with lines
gnuplot> replot "Circle.dat" using 1:5 title "v_y(t)" with lines
gnuplot> plot   "Circle.dat" using 2:3 title "x-y"    with lines
```

Η τελευταία εντολή τοποθετεί τα σημεία x,y στο επίπεδο αφού αυτά βρίσκονται στις στήλες 2 και 3 αντίστοιχα.

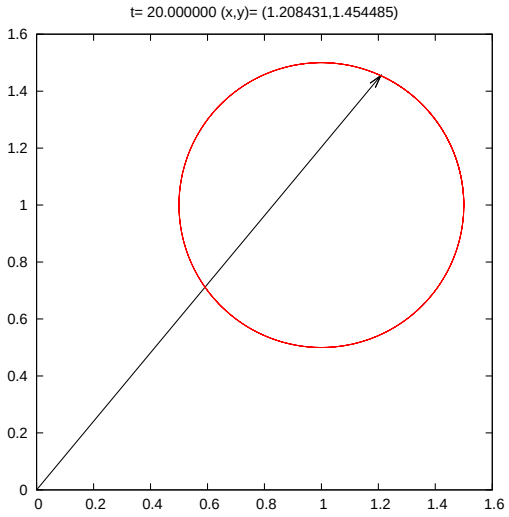
Κλείνουμε αυτήν την παράγραφο δείχνοντας πώς μπορούμε να δούμε το υλικό σημείο να κινείται κάνοντας στοιχειώδες animation με το gnuplot. Για το σκοπό αυτό έχουμε ένα αρχείο animate2D.gnu στο συνοδευτικό λογισμικό το οποίο θα πρέπει να αντιγράψετε μέσα στον κατάλογο που έχετε το αρχείο των δεδομένων σας Circle.dat και από όπου θα δώσετε και την εντολή gnuplot. Δεν είναι σκοπός εδώ να σας εξηγήσουμε πώς δουλεύει αλλά πώς να το χρησιμοποιείτε[8]. Στο Σχήμα 2.5 φαίνεται το τελικό αποτέλεσμα. Οι εντολές είναι απλές. Αρκεί να ορίσουμε από ποιο αρχείο να διαβάσουμε τα δεδομένα[9], τον αρχικό χρόνο απεικόνισης t0 της τροχιάς, τον τελικό tf καθώς και το βήμα dt. Οι χρόνοι αυτοί *δεν είναι ανάγκη* να είναι οι ίδιοι με αυτούς που βάλαμε στα δεδομένα όταν τρέχαμε το πρόγραμμα που βρίσκεται στο αρχείο Circle.f. Έτσι

[6] Αυτό επιτρέπεται να το κάνετε και μέσα στο πρόγραμμα gnuplot αν το θέλετε.

[7] Δώστε την εντολή show variables για να δείτε τις ορισμένες μεταβλητές στο gnuplot.

[8] Φυσικά μπορείτε να δείτε τα περιεχόμενά του και να μαντέψετε πώς δουλεύει, είναι αρκετά απλό.

[9] Μπορεί να είναι οποιοδήποτε αρχείο του οποίου η 1η, 2η και 3η στήλη έχει το χρόνο t και x και y συνιστώσες της θέσης του υλικού σημείο στο επίπεδο αντίστοιχα.



Σχήμα 2.5: Η τροχιά του υλικού σημείο όπως απεικονίζεται κάθε χρονική στιγμή από το πρόγραμμα `animate2D.gnu` του συνοδευτικού λογισμικού που τρέχει μέσα από το `gnuplot`. Φαίνεται το διάνυσμα θέσης και στον τίτλο του διαγράμματος η χρονική στιγμή `t` και αντίστοιχη θέση `(x,y)`. Τα δεδομένα είναι από το πρόγραμμα `Circle.f` που περιγράφεται στο κείμενο.

μπορούμε να ρυθμίσουμε πόσο αργά ή γρήγορα θα "τρέχει" το υλικό σημείο στην οθόνη μας μεταβάλλοντας το `dt`. Ή αν θέλουμε να απεικονίσουμε ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα μπορούμε να μεταβάλλουμε τα `t0, tf`. Οι εντολές που δίνουμε είναι οι

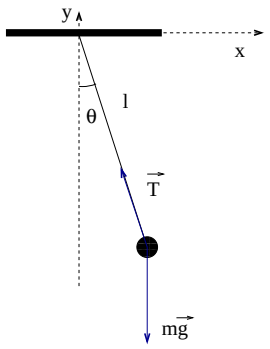
```
gnuplot> file = "Circle.dat"
gnuplot> set xrange [0:1.6]; set yrange [0:1.6]
gnuplot> t0   = 0; tf = 20 ; dt = 0.1
gnuplot> load "animate2D.gnu"
```

Η πρώτη εντολή καθορίζει το αρχείο από όπου το `animate2D.gnu` θα διαβάσει τα δεδομένα από την 1η-3η στήλη του. Η δεύτερη εντολή καθορίζει τις παραμέτρους του χρόνου που θα χρησιμοποιηθούν στο animation (αρχικός, τελικός και βήμα). Η τρίτη ορίζει τα όρια στους άξονες x και y. Και η τέταρτη είναι η εντολή που "τρέχει" το animation. Αν θέλετε να ξανατρέξει το `animation` αρκεί να δώσετε την τελευταία εντολή όσες φορές θέλετε. Τις τρεις πρώτες τις δίνετε όταν θέλετε να αλλάξετε τις αντίστοιχες παραμέτρους. Λ.χ. αν θέλετε να τρέξετε το animation στα ίδια δεδομένα με τη "μισή ταχύτητα" αρκεί να ξαναορίσετε το `dt=0.05`, να επαναφέρετε το χρόνο `t0=0` και να δώσετε μόνο τις εντολές

```
gnuplot> t0   = 0; dt = 0.05
gnuplot> load "animate2D.gnu"
```

2.1.2 Άλλα Παραδείγματα

Ας εφαρμόσουμε όσα κάναμε για την απλή κυκλική κίνηση και σε διαφορετικά παραδείγματα κίνησης στο επίπεδο. Το πρώτο πρόβλημα που θα παρουσιάσουμε είναι αυτό του απλού εκκρεμούς που εκτελεί μικρές ταλαντώσεις γύρω από την κατακόρυφο και που φαίνεται στο Σχήμα 2.6. Η κίνηση περιγράφεται από τη χρονική εξάρτηση του μο-



Σχήμα 2.6: Το απλό εκκρεμές του οποίου η κίνηση για $\theta \ll 1$ περιγράφεται από το πρόγραμμα `SimplePendulum.f`.

ναδικού βαθμού ελευθερίας του συστήματος, της γωνίας $\theta(t)$. Η κίνηση είναι περιοδική με γωνιακή συχνότητα $\omega = \sqrt{g/l}$ και περίοδο $T = 2\pi/\omega$. Η γωνιακή ταχύτητα υπολογίζεται από τη σχέση $\dot{\theta} \equiv d\theta/dt$ και παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \theta(t) &= \theta_0 \cos\left(\omega(t - t_0)\right) \\ \dot{\theta}(t) &= -\omega\theta_0 \sin\left(\omega(t - t_0)\right) \end{aligned} \tag{2.6}$$

Με τις παραπάνω σχέσεις έχουμε επιλέξει τις αρχικές συνθήκες $\theta(0) = \theta_0$, $\dot{\theta}(0) = 0$. Για να γράψουμε τις εξισώσεις της τροχιάς στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων του Σχήματος 2.6 χρησιμοποιούμε τις σχέσεις

$$\begin{aligned} x(t) &= l \sin\left(\theta(t)\right) \\ y(t) &= -l \cos\left(\theta(t)\right) \\ v_x(t) &= \frac{dx(t)}{dt} = l\dot{\theta}(t) \cos\left(\theta(t)\right) \\ v_y(t) &= \frac{dy(t)}{dt} = l\dot{\theta}(t) \sin\left(\theta(t)\right) \end{aligned} \tag{2.7}$$

Αυτές είναι οι ανάλογες των εξισώσεων (2.3) και (2.4) για την περίπτωση της ομαλής κυκλικής κίνησης. Έτσι ο σχεδιασμός του προγράμματος γίνεται με παρόμοιο τρόπο. Η τελική του μορφή, την οποία βρίσκουμε στο αρχείο `SimplePendulum.f` στο συνοδευτικό λογισμικό είναι:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File SimplePendulum.f
C   Set pendulum original position at theta0 with no initial speed
C   ----------------------------------------------------------------
      program SimplePendulum
      implicit none
C   ----------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real l,g,x,y,vx,vy,t,t0,tf,dt,PI
      real theta,theta0,dtheta_dt,omega
      parameter(PI=3.1415927,g=9.81)
C   ----------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter l: '
      read(5,*)l
      print *,'# Enter theta0:'
      read(5,*)theta0
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# l=  ',l ,' theta0= ',theta0
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C   ----------------------------------------------------------------
C     Initialize
      omega = sqrt(g/l)
      print *,'# omega= ',omega,' T= ',2.0*PI/omega
      open(unit=11,file='SimplePendulum.dat')
C   ----------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   =  t0
      do while(t .le. tf)
       theta     =        theta0*cos(omega*(t-t0))
       dtheta_dt = -omega*theta0*sin(omega*(t-t0))
       x  =  l*sin(theta)
       y  = -l*cos(theta)
       vx =  l*dtheta_dt*cos(theta)
```

```
       vy =  l*dtheta_dt*sin(theta)
       write(11,100)t,x,y,vx,vy,theta,dtheta_dt
       t  =  t + dt
      enddo
      close(11)
 100  FORMAT(7G15.7)
      end
```

Τα μόνα σημεία που θα σημειώσουμε στον αναγνώστη είναι ότι την επιτάχυνση της βαρύτητας g τη θέτουμε σταθερή στο πρόγραμμα και ο χρήστης μπορεί να καθορίσει το μήκος του εκκρεμούς l και ότι το αρχείο των δεδομένων περιέχει εκτός από τις στήλες 1-5 και άλλες 2 στις οποίες μπορούμε να δούμε τη γωνία και στιγμιαία γωνιακή ταχύτητα του εκκρεμούς. Στην εντολή `write(11,100)` παραπέμπουμε σε κατάλληλη εντολή `FORMAT` έτσι ώστε τα δεδομένα να τυπώνονται σε μία γραμμή. Δείτε τη συζήτηση στη σελίδα 51.

Μια απλή συνεδρία μελέτης του προβλήματος συνοψίζεται παρακάτω:

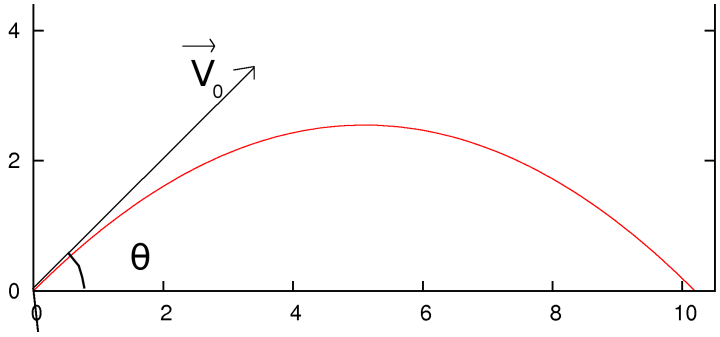
```
> f77 SimplePendulum.f -o sp
> ./sp
 # Enter l:
1.0
 # Enter theta0:
0.314
 # Enter t0,tf,dt:
0 20 0.01
 # l=       1.       theta0=   0.31400001
 # t0=      0.       tf=       20. dt=   0.00999999978
 # omega=   3.132092 T=        2.0060668
> gnuplot
gnuplot> plot  "SimplePendulum.dat" using 1:2 with lines title "x(t)"
gnuplot> plot  "SimplePendulum.dat" using 1:3 with lines title "y(t)"
gnuplot> plot  "SimplePendulum.dat" using 1:4 with lines title "v_x(t)"
gnuplot> replot "SimplePendulum.dat" using 1:5 with lines title "v_y(t)"
gnuplot> plot  "SimplePendulum.dat" using 1:6 with lines title "theta(t)"
gnuplot> replot "SimplePendulum.dat" using 1:7 with lines title "theta'(t)"
gnuplot> plot   [-0.6:0.6][-1.1:0.1] "SimplePendulum.dat" \
                                using 2:3 with lines title "x-y"
gnuplot> file = "SimplePendulum.dat"
gnuplot> t0=0;tf=20.0;dt=0.1
gnuplot> set xrange  [-0.6:0.6];set yrange [-1.1:0.1]
```

```
gnuplot> load "animate2D.gnu"
```

Το επόμενο πρόβλημα θα είναι η μελέτη της βολής υλικού σημείου κοντά στην επιφάνεια της γης[10] αγνοώντας όλες τις δυνάμεις τριβής του αέρα. Όπως γνωρίζουμε, η τροχιά του σωματιδίου και η ταχύτητά του δίνονται από τις παραμετρικές εξισώσεις με παράμετρο το χρόνο:

$$\begin{aligned} x(t) &= v_{0x}t \\ y(t) &= v_{0y}t - \frac{1}{2}gt^2 \\ v_x(t) &= v_{0x} \\ v_y(t) &= v_{0y} - gt \end{aligned} \tag{2.8}$$

όπου έχουμε υποθέσει τις αρχικές συνθήκες $x(0) = y(0) = 0$, $v_x(0) = v_{0x} = v_0 \cos\theta$ και $v_y(0) = v_{0y} = v_0 \sin\theta$ σύμφωνα με το Σχήμα 2.7.



Σχήμα 2.7: Βολή υλικού σημείου κοντά στην επιφάνεια της γης με $x(0) = y(0) = 0$, $v_x(0) = v_{0x} = v_0 \cos\theta$ και $v_y(0) = v_{0y} = v_0 \sin\theta$.

Η δομή του προγράμματος είναι παρόμοια με τα προηγούμενα. Διαλέγουμε ο χρήστης να εισάγει το μέτρο της αρχικής ταχύτητας και τη γωνία θ *σε μοίρες* που σχηματίζει με την οριζόντια διεύθυνση. Εδώ παίρνουμε το χρόνο $t_0 = 0$. Το πρόγραμμα υπολογίζει τις v_{0x} και v_{0y} και τις τυπώνει στο χρήστη στο `stdout`. Τα δεδομένα σώζονται στο αρχείο `Projectile.dat`. Το πρόγραμμα δίνεται ολόκληρο παρακάτω και βρίσκεται στο αρχείο `Projectile.f` του συνοδευτικού λογισμικού.

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      File Projectile.f
C    Shooting a progectile near the earth surface. No air resistance
```

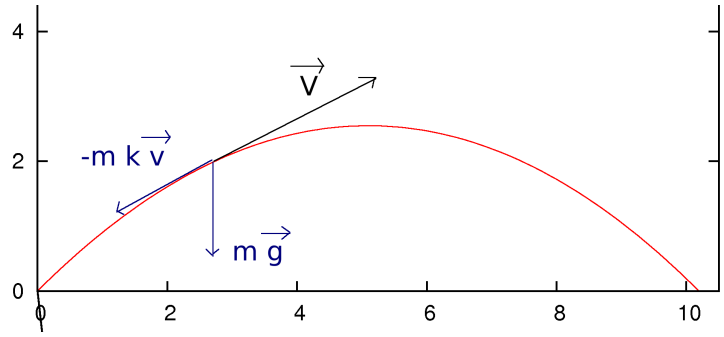
[10] Δηλ. $\vec{g} = \sigma\tau\alpha\theta.$ και η επίδραση της δύναμης Coriolis αμελητέα.

```
C     Starts at (0,0), set (v0,theta).
C    ------------------------------------------------------------
      program Projectile
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real x0,y0,R,x,y,vx,vy,t,tf,dt,PI,g
      real theta,v0x,v0y,v0
      parameter(PI=3.1415927,g=9.81)
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter v0,theta (in degrees):'
      read(5,*)v0,theta
      print *,'# Enter tf,dt:'
      read(5,*) tf,dt
      print *,'# v0= ',v0,' theta= ',theta,'o (degrees)'
      print *,'# t0= ',0.0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      if( v0    .le. 0.0) stop 'Illegal value of v0<=0'
      if( theta .le. 0.0 .or. theta .ge. 90.0)
     *     stop 'Illegal value of theta'
      theta  = (PI/180.0)*theta !convert to radians
      v0x    = v0*cos(theta)
      v0y    = v0*sin(theta)
      print *,'# v0x = ',v0x,' v0y= ',v0y
      open(unit=11,file='Projectile.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   =  0.0
      do while(t .le. tf)
       x  =  v0x * t
       y  =  v0y * t - 0.5*g*t*t
       vx =  v0x
       vy =  v0y     -     g*t
       write(11,*)t,x,y,vx,vy
       t  =  t + dt
      enddo
      close(11)
      end
```

Για διευκόλυνση του αναγνώστη, δίνουμε πάλι τις εντολές μιας τυπικής συνεδρίας μελέτης του προβλήματος:

```
> f77 Projectile.f -o pj
> ./pj
 # Enter v0,theta (in degrees):
10 45
 # Enter tf,dt:
1.4416 0.001
 # v0=    10.0000000      theta= 45.000000  o (degrees)
 # t0=     0.0000000      tf=     1.4416000 dt=   1.00000005E-03
 # v0x =   7.0710678      v0y=    7.0710678
> gnuplot
gnuplot> plot  "Projectile.dat" using 1:2 with lines title "x(t)"
gnuplot> replot "Projectile.dat" using 1:3 with lines title "y(t)"
gnuplot> plot  "Projectile.dat" using 1:4 with lines title "v_x(t)"
gnuplot> replot "Projectile.dat" using 1:5 with lines title "v_y(t)"
gnuplot> plot  "Projectile.dat" using 2:3 with lines title "x-y"
gnuplot> file = "Projectile.dat"
gnuplot> set xrange [0:10.3];set yrange [0:10.3]
gnuplot> t0=0;tf=1.4416;dt=0.05
gnuplot> load "animate2D.gnu"
```

Στη συνέχεια ας δούμε το σύστημα όταν στο υλικό σημείο δρα ομαλή αντίσταση από ένα ρευστό της μορφής $\vec{F} = -mk\vec{v}$, δηλ. μια δύναμη που είναι αντίθετη με την ταχύτητα σε κάθε χρονική στιγμή. Οι λύσεις των εξισώσεων κίνησης



Σχήμα 2.8: Οι δυνάμεις που ασκούνται στο σωματίδιο του Σχήματος 2.7 όταν υποθέσουμε και την ύπαρξη αντίστασης του αέρα ανάλογης του μέτρου της ταχύτητας $\vec{F} = -mk\vec{v}$.

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{dv_x}{dt} = -kv_x \\ a_y &= \frac{dv_y}{dt} = -kv_y - g \end{aligned} \tag{2.9}$$

με αρχικές συνθήκες $x(0) = y(0) = 0$, $v_x(0) = v_{0x} = v_0 \cos\theta$ και $v_y(0) = v_{0y} = v_0 \sin\theta$ έχουν λύση[11]

$$\begin{aligned} v_x(t) &= v_{0x} \mathrm{e}^{-kt} \\ v_y(t) &= \left(v_{0y} + \frac{g}{k}\right) \mathrm{e}^{-kt} - \frac{g}{k} \\ x(t) &= \frac{v_{0x}}{k}\left(1 - \mathrm{e}^{-kt}\right) \\ y(t) &= \frac{1}{k}\left(v_{0y} + \frac{g}{k}\right)\left(1 - \mathrm{e}^{-kt}\right) - \frac{g}{k}t \end{aligned} \tag{2.10}$$

Οι εξισώσεις αυτές προγραμματίζονται με παρόμοιο τρόπο όπως και στην περίπτωση της απουσίας της αντίστασης του αέρα. Η μόνη διαφορά είναι ότι ο χρήστης εισάγει τη σταθερά k στα δεδομένα και φυσικά η μορφή των εξισώσεων. Το πρόγραμμα βρίσκεται στο αρχείο `ProjectileAirResistance.f` στο συνοδευτικό υλικό και παρατίθεται αυτούσιο παρακάτω:

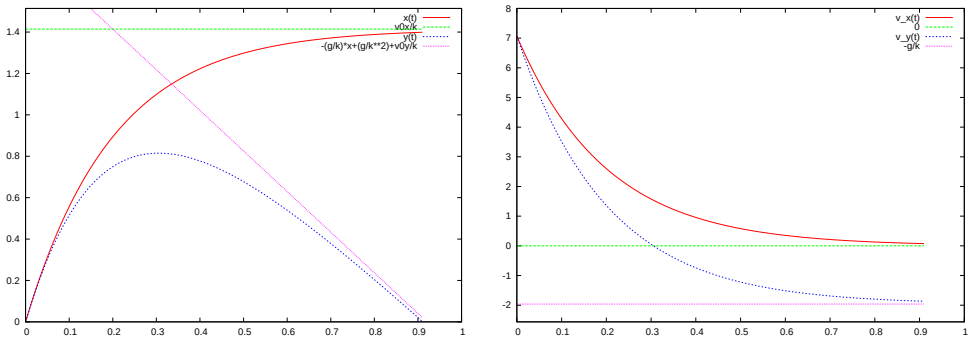
```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File ProjectileAirResistance.f
C    Shooting a progectile near the earth surface with air resistance
C     Starts at (0,0), set k, (v0,theta).
C    ------------------------------------------------------------
      program ProjectileAirResistance
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real x0,y0,R,x,y,vx,vy,t,tf,dt,PI,g,k
      real theta,v0x,v0y,v0
      parameter(PI=3.1415927,g=9.81)
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter k, v0,theta (in degrees):'
      read(5,*)k, v0,theta
      print *,'# Enter tf,dt:'
      read(5,*) tf,dt
```

[11] Ο αναγνώστης καλείται να αποδείξει τις εξισώσεις (2.10) σαν άσκηση.

```
      print *,'# k = ',k
      print *,'# v0= ',v0,' theta= ',theta,'o (degrees)'
      print *,'# t0= ',0.0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C     ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      if( v0    .le. 0.0) stop 'Illegal value of v0<=0'
      if( k     .le. 0.0) stop 'Illegal value of k <=0'
      if( theta .le. 0.0 .or. theta .ge. 90.0)
     *     stop 'Illegal value of theta'
      theta  = (PI/180.0)*theta !convert to radians
      v0x    = v0*cos(theta)
      v0y    = v0*sin(theta)
      print *,'# v0x = ',v0x,' v0y= ',v0y
      open(unit=11,file='ProjectileAirResistance.dat')
C     ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   =  0.0
      do while(t .le. tf)
       x  =  (v0x/k)*(1.0-exp(-k*t))
       y  =  (1.0/k)*(v0y+(g/k))*(1.0-exp(-k*t))-(g/k)*t
       vx =  v0x*exp(-k*t)
       vy =  (v0y+(g/k))*exp(-k*t)-(g/k)
       write(11,*)t,x,y,vx,vy
       t  =  t + dt
      enddo
      close(11)
      end
```

Δίνουμε πάλι τις εντολές μιας τυπικής συνεδρίας μελέτης του προβλήματος:

```
> f77 ProjectileAirResistance.f -o pja
> ./pja
 # Enter k, v0,theta (in degrees):
5.0 10.0 45
 # Enter tf,dt:
0.91 0.001
 # k =   5.
 # v0=   10. theta=   45.o (degrees)
 # t0=   0. tf=   0.910000026 dt=   0.00100000005
 # v0x =   7.07106781 v0y=   7.07106781
> gnuplot
```

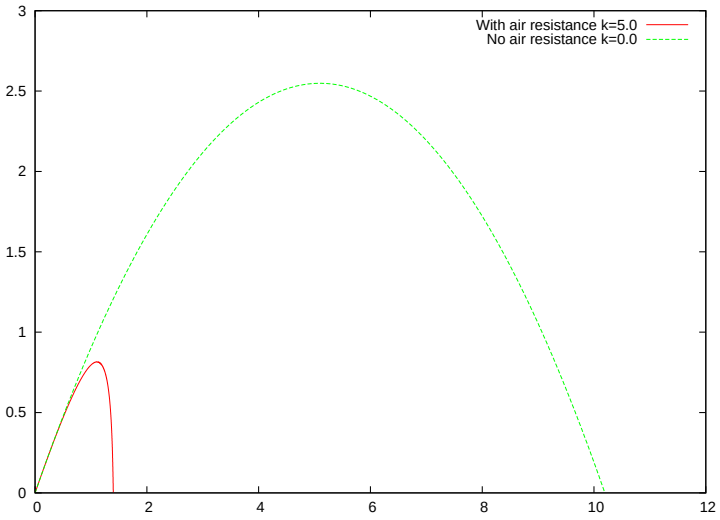


Σχήμα 2.9: Τα διαγράμματα $x(t)$,$y(t)$ (αριστερά) και $v_x(t)$,$v_y(t)$ (δεξιά) των δεδομένων που παράγονται από το πρόγραμμα `ProjectileAirResistance.f` για $k = 5.0$, $v_0 = 10.0$, $\theta = \pi/4$, $t_f = 0.91$ και $\delta t = 0.001$. Φαίνονται και οι ασύμπτωτες των συναρτήσεων καθώς $t \to \infty$.

```
gnuplot> v0x = 10*cos(pi/4) ; v0y = 10*sin(pi/4) ;g = 9.81 ; k = 5
gnuplot> plot [:][:v0x/k+0.1]  "ProjectileAirResistance.dat" \
         using 1:2 with lines title "x(t)",v0x/k
gnuplot> replot                "ProjectileAirResistance.dat" \
       using 1:3 with lines title "y(t)",-(g/k)*x+(g/k**2)+v0y/k
gnuplot> plot [:][-g/k-0.6:]   "ProjectileAirResistance.dat" \
         using 1:4 with lines title "v_x(t)",0
gnuplot> replot                "ProjectileAirResistance.dat" \
         using 1:5 with lines title "v_y(t)",-g/k
gnuplot> plot                  "ProjectileAirResistance.dat" \
         using 2:3 with lines title "With air resistance k=5.0"
gnuplot> replot                "Projectile.dat"              \
         using 2:3 with lines title "No air resistance k=0.0"
gnuplot> file = "ProjectileAirResistance.dat"
gnuplot> set xrange [0:1.4];set yrange [0:1.4]
gnuplot> t0=0;tf=0.91;dt=0.01
gnuplot> load "animate2D.gnu"
```

Όπως και παραπάνω διπλώσαμε τις εντολές που δε χωρούσαν σε δύο γραμμές. Ορίσαμε τις μεταβλητές gnuplot `v0x`, `v0y`, `g` και `k` να έχουν τις τιμές που χρησιμοποιήσαμε όταν τρέξαμε το πρόγραμμα. Μπορούμε έτσι και κατασκευάζουμε τις ασύμπτωτες των συναρτήσεων[12]. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα Σχήματα 2.9 και 2.10.

[12]Θυμίζουμε στον αναγνώστη ότι η ανεξάρτητη μεταβλητή από προεπιλογή στο gnuplot είναι η x.



Σχήμα 2.10: Οι τροχιές των βλημάτων που βάλλονται με $v_0 = 10.0$, $\theta = \pi/4$ όταν δεν υπάρχει αντίσταση του αέρα και όταν υπάρχει με $k = 5.0$.

Το τελευταίο παράδειγμα που θα μελετήσουμε στην παράγραφο αυτή είναι αυτό του ανισότροπου αρμονικού ταλαντωτή. Αυτό είναι ένα υλικό σημείο υπό την επίδραση τις δύναμης

$$F_x = -m\omega_1^2 x \qquad F_y = -m\omega_2^2 y \tag{2.11}$$

όπου οι "σταθερές των ελατηρίων" $k_1 = m\omega_1^2$ και $k_2 = m\omega_2^2$ είναι διαφορετικές στις δύο ορθογώνιες κατευθύνσεις που ορίζονται από τους καρτεσιανούς άξονες x και y. Οι λύσεις των εξισώσεων αυτών για $x(0) = A$, $y(0) = 0$, $v_x(0) = 0$ και $v_y(0) = \omega_2 A$ είναι

$$\begin{aligned} x(t) &= A\cos(\omega_1 t) \qquad y(t) = A\sin(\omega_2 t) \\ v_x(t) &= -\omega_1 A\sin(\omega_1 t) \qquad v_y(t) = \omega_2 A\cos(\omega_2 t) \end{aligned} \tag{2.12}$$

Για ορισμένες σχέσεις μεταξύ των κυκλικών συχνοτήτων ω_1 και ω_2 οι καμπύλες των τροχιών του υλικού σημείου είναι κλειστές και αυτοτέμνονται σε ένα συγκεκριμένο αριθμό από σημεία. Θα αφήσουμε τον αναγνώστη να βρει τις σχέσεις αυτές και να τις επιβεβαιώσει από τα αριθμητικά αποτελέσματα που θα προκύψουν από το παρακάτω πρόγραμμα, το οποίο βρίσκεται στο αρχείο `Lissajoux.f` στο συνοδευτικό λογισμικό.

```
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

```
C     File Lissajous.f
C    Lissajous curves (special case) x(t)= cos(o1 t), y(t)= sin(o2 t)
C    -------------------------------------------------------------
      program Lissajous
      implicit none
C    -------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real x0,y0,R,x,y,vx,vy,t,t0,tf,dt,PI
      real o1,o2,T1,T2
      parameter(PI=3.1415927)
C    -------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter omega1 and omega2:'
      read(5,*)o1,o2
      print *,'# Enter tf,dt:'
      read(5,*)tf,dt
      print *,'# o1= ',o1, ' o2= ',o2
      print *,'# t0= ',0.0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    -------------------------------------------------------------
C     Initialize
     if(o1.le.0.0 .or. o2.le.0.0) stop 'Illegal omega1 or omega2<=0'
      T1 = 2.0*PI/o1
      T2 = 2.0*PI/o2
      print *,'# T1= ',T1,' T2= ',T2
      open(unit=11,file='Lissajous.dat')
C    -------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   =  0.0
      do while(t .le. tf)
       x  =  cos(o1*t)
       y  =  sin(o2*t)
       vx = -o1*sin(o1*t)
       vy =  o2*cos(o2*t)
       write(11,*)t,x,y,vx,vy
       t  =  t + dt
      enddo
      close(11)
      end
```

Στο παραπάνω πρόγραμμα έχουμε θέσει $A = 1$. Ο χρήστης εισάγει τις δύο συχνότητες ω_1 και ω_2 και τους αντίστοιχους χρόνους. Εύκολα

μπορούμε να το μελετήσουμε με τις εντολές

```
> f77  Lissajous.f -o lsj
> ./lsj
 # Enter omega1 and omega2:
3 5
 # Enter tf,dt:
10.0 0.01
 # o1=   3. o2=   5.
 # t0=   0. tf=   10. dt=   0.00999999978
 # T1=   2.09439516 T2=   1.2566371
>gnuplot
gnuplot> plot   "Lissajous.dat" using 1:2 with lines title "x(t)"
gnuplot> replot "Lissajous.dat" using 1:3 with lines title "y(t)"
gnuplot> plot   "Lissajous.dat" using 1:4 with lines title "v_x(t)"
gnuplot> replot "Lissajous.dat" using 1:5 with lines title "v_y(t)"
gnuplot> plot   "Lissajous.dat" using 2:3 with lines title "x-y for 3:5"
gnuplot> file = "Lissajous.dat"
gnuplot> set xrange [-1.1:1.1];set yrange [-1.1:1.1]
gnuplot> t0=0;tf=10;dt=0.1
gnuplot> load "animate2D.gnu"
```

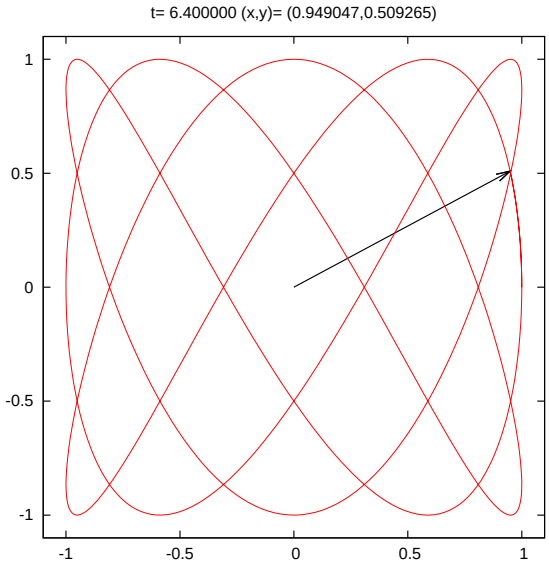
Στο Σχήμα 2.11 δείχνουμε το αποτέλεσμα για την τροχιά του ασύμμετρου αρμονικού ταλαντωτή με $\omega_1 = 3$ και $\omega_2 = 5$.

2.2 Κίνηση στο Χώρο

Στην παράγραφο αυτή θα κάνουμε μια απλή γενίκευση των μεθόδων που περιγράψαμε στις προηγούμενες παραγράφους για να μελετήσουμε την κίνηση ενός υλικού σωματιδίου στο χώρο. Οι μόνες αλλαγές θα είναι η προσθήκη μιας ακόμα εξίσωσης για τη συντεταγμένη $z(t)$ και τη συνιστώσα της ταχύτητας $v_z(t)$ και η μέθοδος απεικόνισης των τροχιών στο gnuplot. Τα προγράμματα που θα γράψουμε θα έχουν παρόμοια δομή με αυτά που γράψαμε για την κίνηση σωματιδίου στο επίπεδο.

Το πρώτο παράδειγμα που θα εξετάσουμε είναι το κωνικό εκκρεμές του Σχήματος 2.12. Αυτό κινείται στο επίπεδο xy με σταθερή γωνιακή ταχύτητα ω. Οι εξισώσεις κίνησης δίνονται από τις σχέσεις

$$T_z = T\cos\theta = mg \qquad T_{xy} = T\sin\theta = m\omega^2 r\,, \tag{2.13}$$



Σχήμα 2.11: Οι τροχιά του ασύμμετρου αρμονικού ταλαντωτή με $\omega_1 = 3$ και $\omega_2 = 5$.

όπου φυσικά $r = l \sin\theta$. Λύνοντας τις παραπάνω εξισώσεις[13] βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} x(t) &= r\cos\omega t \\ y(t) &= r\sin\omega t \\ z(t) &= -l\cos\theta \end{aligned} \tag{2.14}$$

όπου στις παραπάνω αντικαθιστούμε τις τιμές

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{g}{\omega^2 l} \\ \sin\theta &= \sqrt{1-\cos^2\theta} \\ r &= \frac{g}{\omega^2}\frac{\sin\theta}{\cos\theta} \end{aligned} \tag{2.15}$$

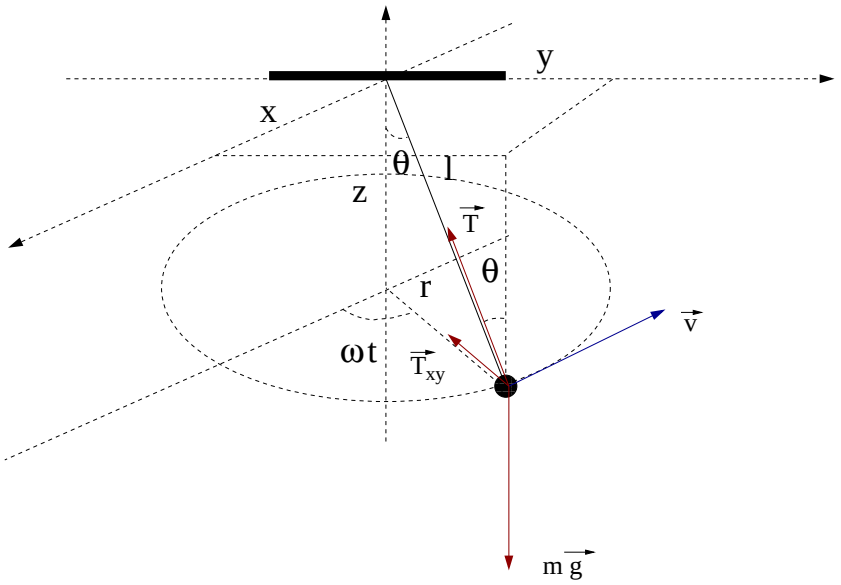
Για τις ταχύτητες έχουμε

$$\begin{aligned} v_x &= -r\omega\sin\omega t \\ v_y &= r\omega\cos\omega t \\ v_z &= 0 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι

$$\omega \geq \omega_{\min} = \sqrt{\frac{g}{l}}\,, \tag{2.17}$$

[13] Φυσικά επιλέγοντας τις κατάλληλες αρχικές συνθήκες (γράψτε τις...).



Σχήμα 2.12: Το κωνικό εκκρεμές του προγράμματος `ConicalPendulum.f`.

και ότι καθώς $\omega \to \infty$, $\theta \to \pi/2$.

Στο πρόγραμμα που θα γράψουμε ο χρήστης δίνει τις παραμέτρους l και ω και τους χρόνους t_f και βήμα χρόνου δt (παίρνουμε $t_0 = 0$). Η σύμβαση για την έξοδο των δεδομένων από το πρόγραμμα είναι ότι γράφονται σε ένα αρχείο, μία γραμμή ανά χρονική στιγμή, όπου οι 7 πρώτες στήλες είναι οι τιμές των t, x, y, z, v_x, v_y και v_z. Επειδή η γραμμή είναι μεγάλη και δε θέλουμε να τη σπάσει η Fortran, δίνουμε την κατάλληλη εντολή `FORMAT`. Δείτε τη συζήτηση στη σελίδα 51. Το πρόγραμμα παρατίθεται παρακάτω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File ConicalPendulum.f
C    Set pendulum angular velocity omega and display motion in 3D
C    ------------------------------------------------------------
      program ConicalPendulum
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real l,g,r,x,y,z,vx,vy,vz,t,tf,dt,PI
      real theta,cos_theta,sin_theta,omega
      parameter(PI=3.1415927,g=9.81)
C    ------------------------------------------------------------
```

```
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter l,omega: '
      read(5,*)l,omega
      print *,'# Enter tf,dt:'
      read(5,*)tf,dt
      print *,'# l=  ',l           ,' omega=     ',omega
      print *,'# T=  ',2.0*PI/omega,' omega_min= ',sqrt(g/l)
      print *,'# t0= ',0.0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    -------------------------------------------------------------
C     Initialize
      cos_theta = g/(omega*omega*l)
      if( cos_theta .ge. 1) stop 'cos(theta)>= 1'
      sin_theta = sqrt(1.0-cos_theta*cos_theta)
      z = -g/(omega*omega) !they remain constant throughout
      vz= 0.0              !the  motion
      r =  g/(omega*omega)*sin_theta/cos_theta
      open(unit=11,file='ConicalPendulum.dat')
C    -------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   = 0.0
      do while(t .le. tf)
       x  =  r*cos(omega*t)
       y  =  r*sin(omega*t)
       vx = -r*sin(omega*t)*omega
       vy =  r*cos(omega*t)*omega
       write(11,100)t,x,y,z,vx,vy,vz
       t  =  t + dt
      enddo
      close(11)
 100  FORMAT(20G15.7)
      end
```

Για να το μεταγλωττίσουμε και να το τρέξουμε κάνουμε τα γνωστά:

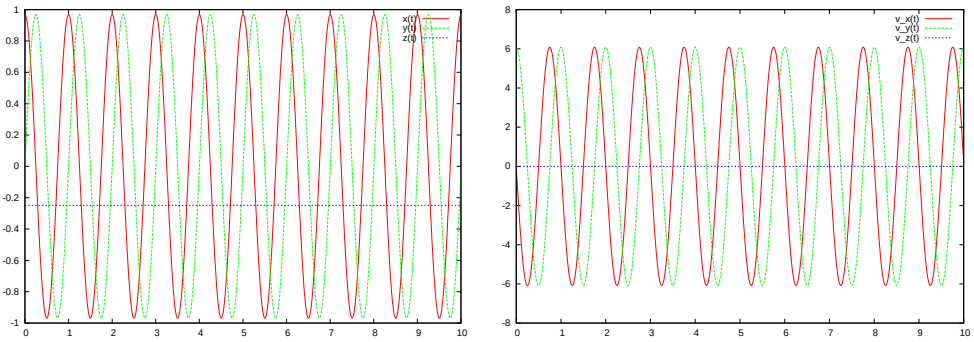
```
> f77  ConicalPendulum.f -o cpd
> ./cpd
 # Enter l,omega:
1.0 6.28
 # Enter tf,dt:
10.0 0.01
 # l=    1. omega=       6.28000021
```

```
# T=     1.00050724 omega_min=    3.132092
# t0=    0. tf=    10. dt=    0.00999999978
```

Τα αποτελέσματα θα τα βρούμε στο αρχείο `ConicalPendulum.dat`. Για να δούμε τις γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων $x(t), y(t), z(t), v_x(t), v_y(t), v_z(t)$ εκτελούμε τις γνωστές εντολές μέσα από το `gnuplot`:

```
> gnuplot
gnuplot> plot  "ConicalPendulum.dat" u 1:2 with lines title "x(t)"
gnuplot> replot "ConicalPendulum.dat" u 1:3 with lines title "y(t)"
gnuplot> replot "ConicalPendulum.dat" u 1:4 with lines title "z(t)"
gnuplot> plot  "ConicalPendulum.dat" u 1:5 with lines title "v_x(t)"
gnuplot> replot "ConicalPendulum.dat" u 1:6 with lines title "v_y(t)"
gnuplot> replot "ConicalPendulum.dat" u 1:7 with lines title "v_z(t)"
```

Το αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 2.13.



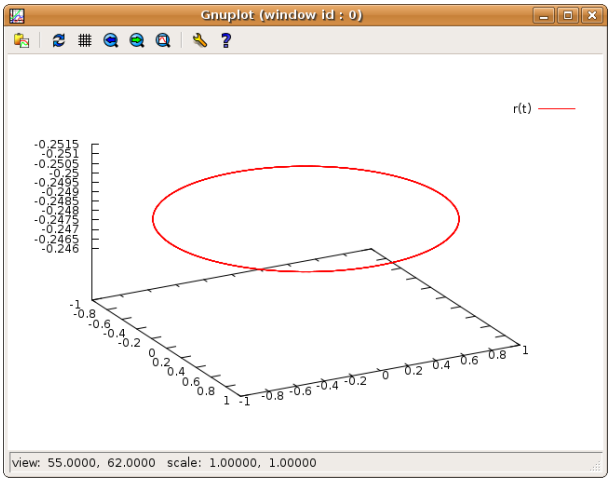
Σχήμα 2.13: Οι γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων $x(t), y(t), z(t), v_x(t), v_y(t), v_z(t)$ προγράμματος `ConicalPendulum.f` για $\omega = 6.28$, $l = 1.0$.

Για να δούμε την τρισδιάστατη τροχιά στο χώρο, θα χρησιμοποιήσουμε την εντολή splot στο `gnuplot`:

```
gnuplot> splot "ConicalPendulum.dat" u 2:3:4 with lines title "r(t)"
```

Το αποτέλεσμα φαίνεται στο Σχήμα 2.14. Μπορούμε να κάνουμε κλικ πάνω στην τροχιά και να περιστρέψουμε την καμπύλη ώστε να τη δούμε από διαφορετικές οπτικές γωνίες. Μπορούμε να αλλάξουμε τα όρια στους άξονες ορίζοντάς τα ρητά στην εντολή `splot`:

```
gnuplot> splot [-1.1:1.1][-1.1:1.1][-0.3:0.0] "ConicalPendulum.dat" \
                              using 2:3:4 with lines title "r(t)"
```

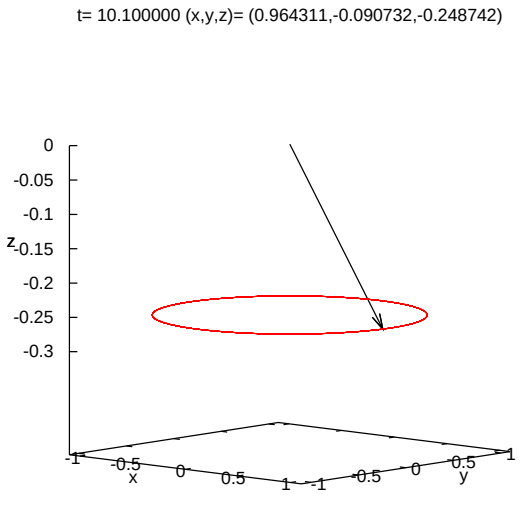


Σχήμα 2.14: Η γραφική παράσταση της τροχιάς $\vec{r}(t)$ του υλικού σημείου του προγράμματος `ConicalPendulum.f` για $\omega = 6.28$, $l = 1.0$. Φαίνεται το παράθυρο του `gnuplot` όπου μπορούμε να κάνουμε κλικ πάνω στην τροχιά και να περιστρέψουμε την καμπύλη ώστε να τη δούμε από διαφορετικές οπτικές γωνίες. Κάτω αριστερά βλέπουμε την οπτική διεύθυνση που δίνεται αντίστοιχα από τις γωνίες $\theta = 55.0$ μοίρες (γωνία με άξονα z) και $\phi = 62$ μοίρες (γωνία με άξονα x), όμοια με τις σφαιρικές συντεταγμένες (θ, ϕ).

Στο συνοδευτικό λογισμικό περικλείεται και το αρχείο `animate3D.gnu` με το οποίο μπορούμε να κάνουμε απλά animations της τροχιάς της κίνησης ενός υλικού σημείου στο χώρο. Η εντολές που πρέπει να δώσουμε είναι ανάλογες με αυτές που δίναμε στην περίπτωση του `animate2D.gnu` με τη μόνη διαφορά ότι καλό είναι να ορίσουμε τα όρια και στον άξονα των z. Για να δούμε την τροχιά του κωνικού εκκρεμούς από τα δεδομένα που παρήγαμε παραπάνω, δίνουμε τις εντολές:

```
gnuplot> set xrange [-1.1:1.1];set yrange [-1.1:1.1];set zrange [-0.3:0]
gnuplot> t0=0;tf=10;dt=0.1
gnuplot> load "animate3D.gnu"
```

Το αποτέλεσμα το βλέπουμε στο Σχήμα 2.15. Περιττό να πούμε πως το πρόγραμμα `animate3D.gnu` μπορεί να χρησιμοποιηθεί πάνω σε οποιοδήποτε αρχείο που περιέχει δεδομένα της μορφής `t x y z` στις πρώτες τέσσερις στήλες του. Απλά αλλάζουμε την τιμή της μεταβλητής `file` στο όνομα του αρχείου που θα μελετήσουμε. Όπως και με το `animate2D.gnu` μπορούμε να αλλάξουμε μόνο όποιες από τις μεταβλητές `file, t0, tf, dt` είναι αναγκαίο πριν επαναλάβουμε το animation με την εντολή `load "animate3D.gnu"`.



Σχήμα 2.15: Η τροχιά $\vec{r}(t)$ του υλικού σημείου του προγράμματος `ConicalPendulum.f` για $\omega = 6.28$, $l = 1.0$ όπως φαίνεται με το πρόγραμμα `animate3D.gnu`. Στον τίτλο βλέπουμε την τρέχουσα χρονική στιγμή και τις συντεταγμένες του υλικού σημείου.

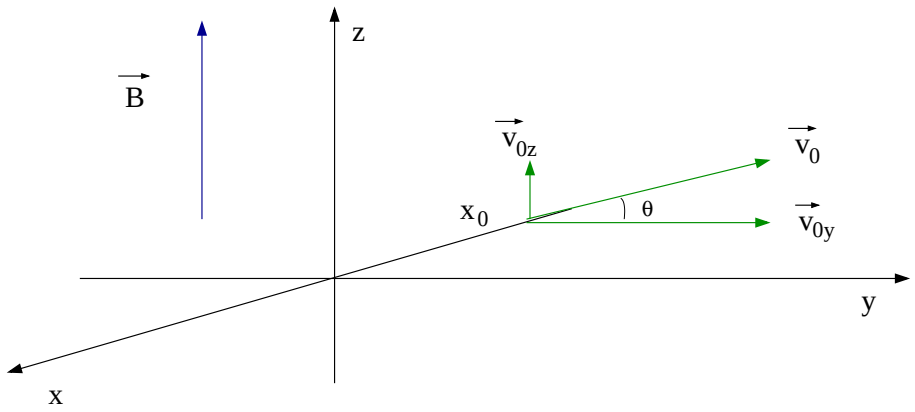
Στη συνέχεια θα μελετήσουμε την τροχιά ενός φορτισμένου σωματιδίου που εισέρχεται σε ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B\hat{z}$ τη χρονική στιγμή $t_0 = 0$ από τη θέση $\vec{r}_0 = x_0\hat{x}$ με ταχύτητα $\vec{v}_0 = v_{0y}\hat{y} + v_{0z}\hat{z}$ όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.16. Στο φορτίο εξασκείται από το μαγνητικό πεδίο η δύναμη Lorentz $\vec{F} = q(\vec{v}\times\vec{B}) = qBv_y\hat{x} - qBv_x\hat{y}$. Οι εξισώσεις κίνησης είναι

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{dv_x}{dt} = \omega v_y \qquad \omega \equiv \frac{qB}{m} \\ a_y &= \frac{dv_y}{dt} = -\omega v_x \,. \end{aligned} \tag{2.18}$$

Ολοκληρώνοντας τις παραπάνω εξισώσεις και λαμβάνοντας υπ'όψη τις αρχικές συνθήκες παίρνουμε

$$\begin{aligned} v_x(t) &= v_{0y}\sin\omega t \\ v_y(t) &= v_{0y}\cos\omega t \,. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Με μία ακόμα ολοκλήρωση παίρνουμε τη θέση του σωματιδίου σε συ-



Σχήμα 2.16: Σωματίδιο τη χρονική στιγμή $t_0 = 0$ στη θέση $\vec{r}_0 = x_0\hat{x}$ με ταχύτητα $\vec{v}_0 = v_{0y}\hat{y} + v_{0z}\hat{z}$ μέσα σε ομογενές μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B\hat{z}$.

νάρτηση με το χρόνο

$$\begin{aligned} x(t) &= \left(x_0 + \frac{v_{0y}}{\omega}\right) - \frac{v_{0y}}{\omega}\cos\omega t = x_0\cos\omega t \\ y(t) &= \frac{v_{0y}}{\omega}\sin\omega t = -x_0\sin\omega t \quad \text{με} \quad x_0 = -\frac{v_{0y}}{\omega}\,, \end{aligned} \tag{2.20}$$

όπου κάναμε την επιλογή $x_0 = -v_{0y}/\omega$ για να κάνουμε το κέντρο της κυκλικής τροχιάς να συμπίπτει με την αρχή των αξόνων. Το γεωμετρικό σχήμα της τροχιάς είναι μια σπείρα με ακτίνα $R = -x_0$ και βήμα $v_{0z}T = 2\pi v_{0z}/\omega$.

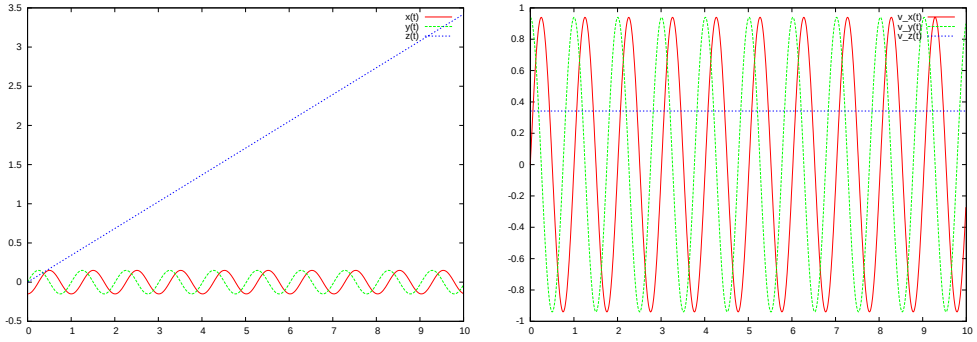
Με τα παραπάνω είναι εύκολο τώρα να γράψουμε ένα πρόγραμμα που να υπολογίζει την τροχιά του παραπάνω φορτίου. Οι παράμετροι που θα εισάγει ο χρήστης είναι το μέτρο της ταχύτητας v_0, τη γωνία θ σε μοίρες (βλ. Σχήμα 2.16) και τη συχνότητα ω. Προφανώς θα έχουμε $v_{0y} = v_0\cos\theta$ και $v_{0z} = v_0\sin\theta$. Η αρχική θέση υπολογίζεται τότε από την $x_0 = -v_{0y}/\omega$. Το πρόγραμμα δίνεται αυτούσιο παρακάτω και μπορείτε να το βρείτε στο αρχείο `ChargeInB.f` στο συνοδευτικό λογισμικό:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File ChargeInB.f
C     A charged particle of mass m and charge q enters a magnetic
C     field B in +z direction. It enters with velocity
C     v0x=0,v0y=v0 cos(theta),v0z=v0 sin(theta), 0<=theta<pi/2
C     at the position x0=-v0y/omega, omega=q B/m
C
C     Enter v0 and theta and see trajectory from
```

```
C     t0=0 to tf at step dt
C    ------------------------------------------------------------
      program ChargeInB
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real x,y,z,vx,vy,vz,t,tf,dt,PI
      real x0,y0,z0,v0x,v0y,v0z,v0
      real theta,omega
      parameter(PI=3.1415927)
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter omega: '
      read(5,*)omega
      print *,'# Enter v0, theta (degrees):'
      read(5,*)v0,theta
      print *,'# Enter tf,dt:'
      read(5,*)tf,dt
      print *,'# omega=  ',omega ,' T=     ',2.0*PI/omega
      print *,'# v0=     ',v0,    ' theta= ',theta,'o (degrees)'
      print *,'# t0=     ',0.0,   ' tf=    ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
     if(theta.lt.0.0 .or. theta.ge.90.0)stop 'Illegal 0<theta<90'
      theta = (PI/180.0)*theta !convert to radians
      v0y   = v0*cos(theta)
      v0z   = v0*sin(theta)
      print *,'# v0x= ',0.0,' v0y= ',v0y,' v0z= ',v0z
      x0    = - v0y/omega
      print *,'# x0=  ',x0, ' y0=  ',0.0,' z0=  ',0.0
     print *,'# xy plane: Circle with center (0,0) and R= ',ABS(x0)
      print *,'# step of helix: s=v0z*T= ',v0z*2.0*PI/omega
      open(unit=11,file='ChargeInB.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      t   = 0.0
      vz  = v0z
      do while(t .le. tf)
       x  =  x0*cos(omega*t)
       y  = -x0*sin(omega*t)
       z  =  v0z*t
```

```
      vx =  v0y*sin(omega*t)
      vy =  v0y*cos(omega*t)
      write(11,100)t,x,y,z,vx,vy,vz
      t  =  t + dt
     enddo
     close(11)
100  FORMAT(20G15.7)
     end
```

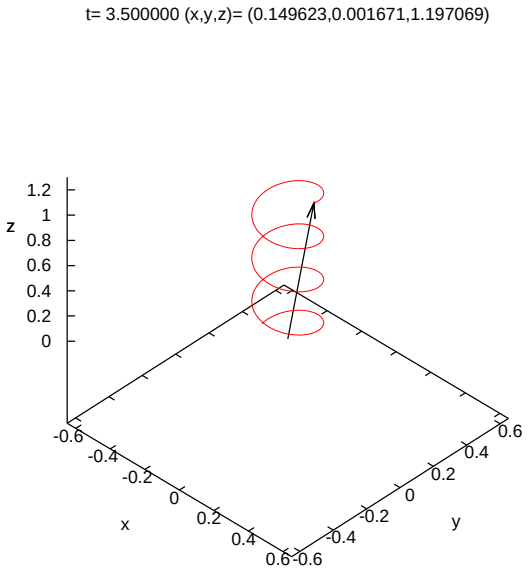
Παραθέτουμε εδώ τις εντολές μιας τυπικής συνεδρίας τα αποτελέσματα της οποίας δείχνονται στο Σχήμα 2.17 και στο Σχήμα 2.18.



Σχήμα 2.17: Οι γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων $x(t), y(t), z(t), v_x(t), v_y(t), v_z(t)$ του προγράμματος `ChargeInB.f` για $\omega = 6.28$, $x_0 = 1.0$, $\theta = 20$ μοίρες.

```
> f77  ChargeInB.f -o chg
> ./chg
 # Enter omega:
6.28
 # Enter v0, theta (degrees):
1.0 20
 # Enter tf,dt:
10 0.01
 # omega=     6.28000021 T=        1.00050724
 # v0=        1. theta=    20.o (degrees)
 # t0=        0. tf=       10. dt=    0.00999999978
 # v0x=    0. v0y=    0.939692616 v0z=    0.342020124
 # x0=    -0.149632573 y0=     0. z0=     0.
 # xy plane: Circle with center (0,0) and R=    0.149632573
```

```
 # step of helix: s=v0z*T=   0.342193604
> gnuplot
gnuplot> plot   "ChargeInB.dat" u 1:2   with lines title "x(t)"
gnuplot> replot "ChargeInB.dat" u 1:3   with lines title "y(t)"
gnuplot> replot "ChargeInB.dat" u 1:4   with lines title "z(t)"
gnuplot> plot   "ChargeInB.dat" u 1:5   with lines title "v_x(t)"
gnuplot> replot "ChargeInB.dat" u 1:6   with lines title "v_y(t)"
gnuplot> replot "ChargeInB.dat" u 1:7   with lines title "v_z(t)"
gnuplot> splot  "ChargeInB.dat" u 2:3:4 with lines title "r(t)"
gnuplot> file = "ChargeInB.dat"
gnuplot> set xrange [-0.65:0.65];set yrange [-0.65:0.65];\
         set zrange [0:1.3]
gnuplot> t0=0;tf=3.5;dt=0.1
gnuplot> load "animate3D.gnu"
```



Σχήμα 2.18: Η τροχιά $\vec{r}(t)$ του υλικού σημείου του προγράμματος `ChargeInB.f` για $\omega = 6.28$, $v_0 = 1.0$, $\theta = 20$ μοίρες όπως φαίνεται με το πρόγραμμα `animate3D.gnu`. Στον τίτλο βλέπουμε την τρέχουσα χρονική στιγμή και τις συντεταγμένες του υλικού σημείου.

2.3 Κίνηση μετ' Εμποδίων

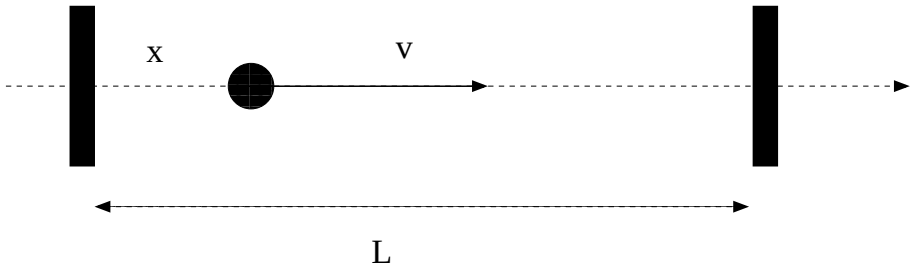
Στην παράγραφο αυτή θα μελετήσουμε την κίνηση ενός σωματιδίου η οποία είναι απλή και συνεχής σε πεπερασμένα διαστήματα χρόνου, αλλά σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές υπόκειται σε ελαστική κρούση σε ένα τοίχωμα αμετακίνητο και αδιαπέραστο. Η κρούση αυτή θα δούμε ότι περιγράφεται προσεγγιστικά από τους αλγόριθμους που θα προγραμματίσουμε. Έτσι θα μελετήσουμε για πρώτη φορά τα συστηματικά σφάλματα που εισάγονται από τους *αλγόριθμους* που χρησιμοποιούμε[14] όταν φτιάχνουμε ένα μοντέλο για το σύστημα που μελετάμε.

2.3.1 Το Μονοδιάστατο Κουτί

Το πιο απλό παράδειγμα που θα μελετήσουμε είναι η κίνηση ενός σωματιδίου σε ένα "μονοδιάστατο κουτί". Το σωμάτιο κινείται ελεύθερα πάνω στον άξονα των x στο διάστημα $0 < x < L$ όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.19. Όταν φτάνει στα άκρα του διαστήματος, ανακλάται στα τοιχώματα και η ταχύτητά του αναστρέφεται. Η δυναμική του ενέργεια είναι

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ +\infty & \text{αλλού} \end{cases} , \tag{2.21}$$

που έχει σχήμα ενός απειρόβαθου πηγαδιού δυναμικού. Η δύναμη $F = -dV(x)/dx = 0$ μέσα στο κουτί, όπου το σωμάτιο κινείται ελεύθερα, και $F = \pm\infty$ στα τοιχώματα όπου ανακλάται.



Σχήμα 2.19: Σωματίδιο σε μονοδιάστατο κουτί με τοιχώματα στο $x = 0$ και $x = L$.

Το σύστημα είναι πολύ απλό. Αρκεί να δώσουμε την αρχική θέση του σωματιδίου x_0 και την αρχική του ταχύτητα v_0 (το πρόσημό της

[14]Και στις προηγούμενες παραγράφους υπήρχε (μικρό) συστηματικό σφάλμα στα συστήματα που μελετήσαμε, το οποίο οφειλόταν όμως στα σφάλματα των αριθμητικών πράξεων που εκτελούσε ο υπολογιστής - αναπαράσταση πραγματικών, ακρίβεια πράξεων κινητής υποδιαστολής κλπ. Οι αλγόριθμοι ήταν "ακριβείς ".

δηλώνει και την αρχική κατεύθυνση κίνησης). Όσο δε συγκρούεται με τα τοιχώματα η κίνηση είναι ευθύγραμμη και ομαλή και ισχύουν οι απλές σχέσεις

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + v_0 t \\ v(t) &= v_0 \,. \end{aligned} \tag{2.22}$$

Επίσης για οποιαδήποτε μεταβολή του χρόνου δt, έτσι ώστε να μην υπάρχει σύγκρουση με τα τοιχώματα μέσα στο χρονικό διάστημα $(t, t+\delta t)$, ισχύει (*ακριβώς*, όχι προσεγγιστικά)

$$\begin{aligned} x(t+\delta t) &= x(t) + v(t)\delta t \\ v(t+\delta t) &= v(t) \,. \end{aligned} \tag{2.23}$$

Θα μπορούσαμε λοιπόν να χρησιμοποιήσουμε τις παραπάνω σχέσεις για να γράψουμε το πρόγραμμά μας και όταν το σωμάτιο συγκρούεται με κάποιο από τα τοιχώματα να αντιστρέφαμε την ταχύτητα: $v(t) \to -v(t)$. Η πηγή των δυσκολιών μας κρύβεται στη λέξη "όταν". Αφού στον υπολογιστή το χρονικό διάστημα δt είναι αναγκαστικά πεπερασμένο δεν μπορούμε να εντοπίσουμε τη χρονική στιγμή της σύγκρουσης με ακρίβεια μεγαλύτερη από δt: Αν λ.χ. χρησιμοποιώντας τις Σχέσεις (2.23) το σωματίδιο τη χρονική στιγμή $t + \delta t$ ξεπεράσει το τοίχωμα η κρούση θα μπορούσε να ;έχει συμβεί οποιαδήποτε χρονική στιγμή μέσα στο διάστημα $(t, t + \delta t)$. Ο αλγόριθμος όμως, θα αλλάξει τη φορά της ταχύτητας τη χρονική στιγμή $t + \delta t$ εισάγοντας ένα συστηματικό σφάλμα στον υπολογισμό. Πιο συγκεκριμένα, αυτό μπορεί να γίνει με το βρόχο

```
do while(t .le. tf)
 x = x + v * dt
 t = t + dt
 if(x .lt. 0.0 .or. x .gt. L) v = -v
enddo
```

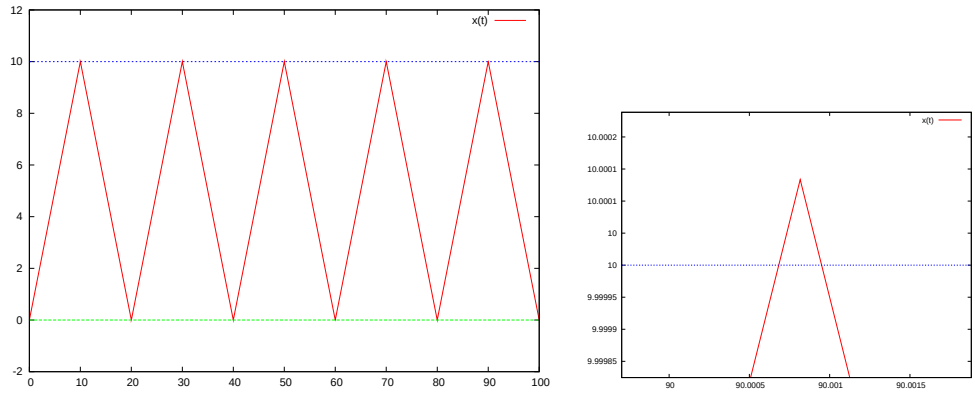
όπου η συνθήκη σύγκρουσης δίνεται στην προτελευταία γραμμή με τη λογική πρόταση "Αν `x` *μικρότερο* του `0` *ή* το `x` *μεγαλύτερο* του `L`" όπου φαίνεται η αδυναμία του αλγόριθμου να ελέγξει την ακριβή χρονική στιγμή της κρούσης.

Ας δούμε τώρα ολόκληρο το πρόγραμμα το οποίο βρίσκεται στο αρχείο `box1D_1.f` του συνοδευτικού λογισμικού. Ο χρήστης μπορεί να καθορίσει το μήκος του κουτιού `L` και τις αρχικές συνθήκες `x0, v0`. Δίνει τον αρχικό και τελικό χρόνο της κίνησης `t0, tf` καθώς και το βήμα υπολογισμού `dt` και ο υπολογισμός ... ξεκινάει:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File box1D_1.f
C     Motion of a free particle in a box  0<x<L
C     Use integration with time step dt: x = x + v*dt
C    ------------------------------------------------------------
      program box1D
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real  L,x0,v0,t0,tf,dt,t,x,v
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter L:'
      read(5,*)L
      print *,'# L = ',L
      if( L .le. 0.0) stop 'L must be positive.'
      print *,'# Enter x0,v0:'
      read(5,*)x0,v0
      print *,'# x0= ',x0,' v0= ',v0
      if(x0 .lt. 0.0 .or. x0 .gt. L) stop 'illegal value of x0.'
     if(v0 .eq. 0.0             ) stop 'illegal value of v0 = 0.'
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      t = t0
      x = x0
      v = v0
      open(unit=11,file='box1D_1.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      do while(t .le. tf)
       write(11,*)t,x,v
       x = x + v*dt
       t = t + dt
       if(x .lt. 0.0 .or. x .gt. L) v = -v
      enddo
      close(11)
      end
```

Τα δεδομένα τα βρίσκουμε σε τρεις στήλες στο αρχείο `box1D_1.dat`. Η μεταγλώττιση και το τρέξιμο γίνεται κατά τα γνωστά, ενώ η γραφική παράσταση της τροχιάς με το `gnuplot`:

```
> f77 box1D_1.f -o box1
> ./box1
 # Enter L:
10
 # L =   10.
 # Enter x0,v0:
0 1.0
 # x0=   0. v0=   1.
 # Enter t0,tf,dt:
0 100 0.01
 # t0=   0. tf=   100. dt=   0.00999999978
> gnuplot
gnuplot> plot "box1D_1.dat" using  1:2 with lines title "x(t)",\
                                    0 notitle,L notitle
gnuplot> plot [:][-1.2:1.2] "box1D_1.dat" \
                           using  1:3 with lines title "v(t)"
```



Σχήμα 2.20: Η τροχιά $x(t)$ σωματίδιου σε μονοδιάστατο κουτί με $L = 10$, $x_0 = 0.0$, $v_0 = 1.0$, $\delta t = 0.01$. Στο δεξί διάγραμμα μεγενθύνουμε λεπτομέρεια όταν $t \approx 90$. Φαίνονται τα συστηματικά σφάλματα στον προσδιορισμό της χρονικής στιγμής της κρούσης $t_k = 90$ και της μέγιστης τιμής της $x(t)$, $x_m = L = 10.0$.

Τα αποτελέσματα για την τροχιά $x(t)$ δείχνονται στο Σχήμα 2.20. Είναι φανερή η επίδραση του συστηματικού σφάλματος στα αποτελέσματα. Με τις απλές αρχικές συνθήκες που επιλέξαμε, οι κρούσεις συμβαίνουν

κάθε $T/2 = L/v = 10$ μονάδες χρόνου, άρα στο κομμάτι του διαγράμματος που μεγενθύναμε στο αριστερό του σχήματος 2.20, η αντιστροφή της κίνησης θα έπρεπε να είχε συμβεί όταν $t = 90$, $x = L = 10$.

Ο αναγνώστης θα έχει ήδη καταλάβει ότι το παραπάνω πρόβλημα λύνεται παίρνοντας δt αρκετά μικρό, οπότε μπορούμε αν έχουμε την απαραίτητη υπολογιστική δύναμη να κάνουμε το σφάλμα όσο μικρό θέλουμε. Ναι, αυτό μέχρι ένα σημείο είναι σωστό. Προσέξτε όμως μια αδυναμία στον αλγόριθμο που επιλέξαμε: Η επόμενη θέση καθορίζεται από την πράξη `x+v*dt`. Τι θα γίνει αν παίρνοντας το `dt` αρκετά μικρό, το γινόμενο `v*dt` γίνει περισσότερο από επτά τάξεις μεγέθους μικρότερο από την τρέχουσα τιμή του `x`? Αφού το `x` αναπαρίσταται από μεταβλητή τύπου `REAL`, η ακρίβεια στην αναπαράστασή του είναι περίπου επτά δεκαδικά ψηφία. Άρα η πράξη `x+v*dt` θα μας δώσει πίσω το `x`, άρα ο αλγόριθμός μας θα "κολλήσει" και το κινητό θα μένει στο ίδιο σημείο[15]. Αυτό όσο και να προσπαθούμε δε διορθώνεται[16]. Η μόνη μας ελπίδα είναι να επινοήσουμε έναν καλύτερο αλγόριθμο. Λ.χ θεωρήστε τη σχέση που δίνει τη θέση του κινητού στην ευθύγραμμη ομαλή κίνηση:

$$x(t) = x_0 + v_0(t - t_0)\,. \tag{2.24}$$

Ας χρησιμοποιήσουμε την παραπάνω σχέση για τα τμήματα της κίνησης μεταξύ των συγκρούσεων. Το μόνο που έχουμε να κάνουμε είναι σε κάθε σύγκρουση με ένα από τα τοιχώματα να αντιστρέφουμε τη v_0, να ορίζουμε το x_0 να είναι η τρέχουσα θέση του κινητού και t_0 να είναι η τρέχουσα χρονική στιγμή. Αυτό επιτυγχάνεται με το βρόχο:

```
t  = t0
do while(t .le. tf)
 x = x0 + v0*(t-t0)
 if( x .lt. 0.0 .or. x .gt. L)then
  x0 =  x
  t0 =  t
  v0 = -v0
 endif
 t   =  t + dt
enddo
```

[15] Και η σχέση `t=t+dt` πάσχει από ανάλογο πρόβλημα, αλλά αυτό λύνεται εύκολα (δες άσκηση).

[16] Φυσικά θα μπορούσαμε να διαλέξουμε μεταβλητές `REAL*8`, `REAL*16`, ... Αυτό μπορεί να μας λύσει ένα συγκεκριμένο πρόβλημα για δεδομένο `tf`, αλλά ανάλογο πρόβλημα ακρίβειας θα συναντήσουμε αν υπολογίσουμε την τροχιά για (αρκετά) μεγαλύτερο `tf`.

Στον παραπάνω αλγόριθμο δε γλιτώνουμε από το σφάλμα προσδιορισμού της στιγμής της κρούσης αλλά δεν έχουμε το πρόβλημα "αστάθειας" που είχε ο προηγούμενος όταν dt$\to 0$. Παρακάτω δίνουμε το πρόγραμμα που χρησιμοποιεί τον παραπάνω αλγόριθμο που μπορείτε να βρείτε στο συνοδευτικό λογισμικό στο αρχείο box1D_2.f:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File box1D_2.f
C     Motion of a free particle in a box  0<x<L
C     Use constant velocity equation: x = x0 + v0*(t-t0)
C     Reverse velocity and redefine x0,t0 on boundaries
C    ------------------------------------------------------------
      program box1D
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real  L,x0,v0,t0,tf,dt,t,x,v
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter L:'
      read(5,*)L
      print *,'# L = ',L
      if( L .le. 0.0) stop 'L must be positive.'
      print *,'# Enter x0,v0:'
      read(5,*)x0,v0
      print *,'# x0= ',x0,' v0= ',v0
      if(x0 .lt. 0.0 .or. x0 .gt. L) stop 'illegal value of x0.'
     if(v0 .eq. 0.0             ) stop 'illegal value of v0 = 0.'
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      t = t0
      open(unit=11,file='box1D_2.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      do while(t .le. tf)
       x = x0 + v0*(t-t0)
       write(11,*)t,x,v0
       if( x .lt. 0.0 .or. x .gt. L)then
```

```
   x0 =  x
   t0 =  t
   v0 = -v0
  endif
  t   =  t + dt
 enddo
 close(11)
 end
```

Το πρόγραμμα το μεταγλωττίζουμε και τρέχουμε όπως το προηγούμενο. Τα αποτελέσματα θα τα βρούμε στο αρχείο box1D_2.dat.

Ο παραπάνω αλγόριθμος μπορεί με μικρές αλλαγές να μας δώσει την ακριβή λύση. Φυσικά το πρόβλημα αυτό είναι αρκετά απλό ώστε η ακριβής λύση να είναι γνωστή και να έχει απλή μορφή. Η ιδέα είναι να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση (2.24) αλλά βάζοντας πάντα την ακριβή τιμή για τα v_0, t_0. Η ιδέα φαίνεται στον κεντρικό βρόχο του προγράμματος:

```
 do while(t .le. tf)
  t = t + dt
  if( (t-t0) .gt. Th )then
   t0 = t0 + Th
   v  = -v
   if( v .gt. 0.0)then
    x0 = 0.0
   else
    x0 = L
   endif
  endif
  x = x0 + v*(t-t0)
 enddo
```

όπου Th$= T/2 = L/|v|$ ο χρόνος μεταξύ δύο κρούσεων. Προσέξτε πως τώρα μόλις ο χρόνος ξεπεράσει το χρόνο μιας κρούσης, θέτουμε τα x0, t0 στις ακριβείς[17] τιμές τους. Το μόνο που μένει είναι να θέσουμε τις αρχικές τιμές για τα t0,x0 πριν ξεκινήσει ο βρόχος et voilà: Το πλήρες πρόγραμμα που θα βρείτε στο αρχείο box1D_3.f

```
C ============================================================
```

[17]Φυσικά μην περιμένετε ο αλγόριθμος να δουλεύει ... επ' άπειρον! Τα σφάλματα πεπερασμένης αναπαράστασης των μεταβλητών t0, Th συσσωρεύονται (accumulation errors). Επίσης η σχέση t=t+dt δεν είναι και η καλύτερη επιλογή (δείτε άσκηση).

```
C     File box1D_3.f
C     Motion of a free particle in a box  0<x<L
C     Computation of analytical solution
C    ------------------------------------------------------------
      program box1D
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real  L,x0,v0,t0,tf,dt,t,x,v,Th,a
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter L:'
      read(5,*)L
      print *,'# L = ',L
      if( L .le. 0.0) stop 'L must be positive.'
      print *,'# Enter x0,v0:'
      read(5,*) a,v0 !notice, x0=a is the original position
      print *,'# x0= ',a ,' v0= ',v0
      if(a  .lt. 0.0 .or. a  .gt. L) stop 'illegal value of x0.'
     if(v0 .eq. 0.0             ) stop 'illegal value of v0 = 0.'
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      Th  = L/ABS(v0) !Th = T/2 = half period
      t   = t0
      x   = a
      v   = v0
      if( v0 .gt. 0.0 ) then
       t0 = -a/v0
       x0 =  0.0
      else
       t0 = (L-a)/v0
       x0 =  L
      endif
      open(unit=11,file='box1D_3.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      do while(t .le. tf)
       write(11,*)t,x,v
```

```
 t = t + dt
 if( (t-t0) .gt. Th )then
  t0 = t0 + Th
  v  = -v
  if( v .gt. 0.0)then
   x0 = 0.0
  else
   x0 = L
  endif !if( v .gt. 0.0)
 endif  !if( (t-t0) .gt. Th )
 x = x0 + v*(t-t0)
enddo   !do while(t .le. tf)
close(11)
end
```

Σας το αφήνουμε για άσκηση να επιβεβαιώσετε πως ο παραπάνω αλγόριθμος αντιστοιχεί στην πλήρη αναλυτική λύση του προβλήματος.

2.3.2 Σφάλματα

Ας δούμε με λίγο περισσότερη λεπτομέρεια την επίδραση των συστηματικών σφαλμάτων στα αποτελέσματα που πήραμε από τη μελέτη του απλού προβλήματος που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Χρησιμοποιήσαμε δύο αλγόριθμους, ο πρώτος υλοποιήθηκε στο πρόγραμμα που γράψαμε στο αρχείο `box1D_1.f` και ο δεύτερος στο `box1D_2.f`. Θα αναφερόμαστε σε αυτούς στην παράγραφο αυτή ως η "μέθοδος 1" και "μέθοδος 2" αντίστοιχα. Στο αρχείο `box1D_3.f` προγραμματίσαμε την ακριβή λύση της κίνησης του υλικού σημείου στο μονοδιάστατο κουτί.

Τα σφάλματα που θα δούμε μπορούμε να τα χωρίσουμε σε δύο κατηγορίες. Σε αυτά που οφείλονται στα συστηματικά σφάλματα στην προσέγγιση της κίνησης και σε αυτά που οφείλονται στην πεπερασμένη προσέγγιση των πραγματικών αριθμών και των πράξεων ανάμεσά τους από τον υπολογιστή. Θα δώσουμε έμφαση στην πρώτη κατηγορία γιατί αυτή είναι συνήθως αυτή που επικρατεί σε πολλά ενδιαφέροντα αριθμητικά προβλήματα στις φυσικές επιστήμες.

Το σφάλμα στις μεθόδους 1 και 2 οφείλεται στη διακριτοποίηση του χρόνου. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα οι αλγόριθμοι να μη βλέπουν την ακριβή χρονική στιγμή της κρούσης. Είναι λοιπόν αναμενόμενο το σφάλμα αυτό να ελαττώνεται όταν η διακριτοποίηση του χρόνου γίνεται ολοένα και λεπτότερη.

Όταν υπολογίζουμε μια ποσότητα με μία από τις μεθόδους αυτές, λ.χ. τη θέση του κινητού μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή, το αποτέλεσμα που παίρνουμε δεν έχουμε ιδέα αν είναι ορθό και πόση είναι η ακρίβεια προσδιορισμού του. Η πρώτη απόπειρα στην προσπάθεια ελέγχου αυτού το προβλήματος είναι να μελετήσουμε το αποτέλεσμα που πήραμε πόσο εξαρτάται από την παράμετρο που καθορίζει τη λεπτότητα της διακριτοποίησης του χρόνου: Αν καταφέρουμε να δείξουμε ότι το αποτέλεσμά μας συγκλίνει με ανεκτή ακρίβεια σε ένα όριο καθώς $\delta t \to 0$, αποκτάμε αυτοπεποίθηση πως η τιμή αυτή είναι σωστή στη δεδομένη ακρίβεια.

Δυστυχώς η μέθοδος αυτή δε δουλεύει αλγοριθμικά: Καθώς $\delta t \to 0$, το σφάλμα διακριτοποίησης του χρόνου ελαττώνεται αλλά άλλα σφάλματα μπορεί να γίνονται σημαντικά. Αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο ότι η συσσώρευση σφαλμάτων στην απεικόνιση και στις πράξεις μεταξύ των πραγματικών αριθμών γίνεται σημαντικότερη στο όριο αυτό. Άρα πρέπει η μελέτη αυτή να γίνει προσεκτικά.

Αν έχουμε τη δυνατότητα να μελετήσουμε το πρόβλημα με ένα διαφορετικό αλγόριθμο, η σύγκλιση των αποτελεσμάτων των διαφορετικών μεθόδων συνεισφέρει στη βεβαιότητα της ορθότητας των υπολογισμών. Σε αντίθεση με ένα τυπικό πρόβλημα που έχουμε να λύσουμε, στο συγκεκριμένο έχουμε την "πολυτέλεια" να συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας και με την ακριβή λύση του προβλήματος. Σε τέτοιες περιπτώσεις έχουμε τη δυνατότητα να αντιστρέψουμε το πρόβλημα και να χρησιμοποιήσουμε την ακριβή λύση για να μελετήσουμε τη σχετική ακρίβεια και αποτελεσματικότητα διαφορετικών προσεγγιστικών μεθόδων.

Ας δοκιμάσουμε να δούμε πώς μπορούμε να κάνουμε την ανάλυση της σύγκλισης των αποτελεσμάτων καθώς $\delta t \to 0$. Για κάθε μέθοδο θα καθορίσουμε όλες τις παραμέτρους εκτός από το δt. Στην ανάλυση παρακάτω θα χρησιμοποιήσουμε $L = 10$, $v_0 = 1.0$, $x_0 = 0.0$, $t_0 = 0.0$, $t_f = 95.0$, άρα το υλικό σημείο θα πρέπει να κάνει μία κρούση ανά 10 μονάδες χρόνου. Θα πάρουμε διαδοχικά μικρότερες τιμές του δt και θα υπολογίσουμε την τελική θέση του κινητού $x(t \approx 95)$[18] σα συνάρτηση του δt. Θα μελετήσουμε αν, πόσο καλά και πόσο γρήγορα συγκλίνει αυτή η τιμή σε ένα όριο καθώς $\delta t \to 0$[19].

Η ανάλυση αποτελείται από πολλές επαναλαμβανόμενες εντολές: Η μεταγλώττιση του κώδικα, ο καθορισμός των παραμέτρων, το τρέξιμο και ο υπολογισμός τις τιμής $x(t \approx 95)$ για πολλές τιμές του δt. Σε ένα αρχείο `box1D_anal.in` γράφουμε τις τιμές των παραμέτρων που θα

[18] Προσέξτε το $\approx$!

[19] Φυσικά εδώ γνωρίζουμε ότι θα πρέπει να πάρουμε $x(95) = 5$.

εισάγουμε στο πρόγραμμα:

```
10          L
0 1.0       x0 v0
0 95  0.05 t0 tf dt
```

Στη συνέχεια μεταγλωττίζουμε το πρόγραμμα

```
> f77 box1D_1.f -o box
```

και το τρέχουμε με την εντολή

```
> cat box1D_anal.in | ./box
```

που στέλνει τα περιεχόμενα του αρχείου `box1D_anal.in` στο `stdin` του προγράμματος `./box`. Το αποτέλεσμα που ζητάμε είναι στην τελευταία γραμμή του αρχείου `box1D_1.dat`:

```
> tail -n 1  box1D_1.dat
  94.9511948  5.45000267 -1.
```

Η τρίτη τιμή είναι αυτή της ταχύτητας και δε μας ενδιαφέρει. Σε ένα αρχείο, λ.χ. `box1D_anal.dat` τοποθετούμε το δt και τις δύο πρώτες τιμές από την παραπάνω εντολή. Αλλάζουμε την τιμή του $\delta t \to \delta t/2$ στο αρχείο `box1D_anal.in` 12 φορές μέχρι να γίνει ίση με 0.000012 και επαναλαμβάνουμε[20]. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία[21] για τη μέθοδο 2 και για την ακριβή μέθοδο τοποθετώντας τα αποτελέσματα για το $x(t \approx 95)$ σε νέες στήλες στο αρχείο `box1D_anal.dat`. Το αποτέλεσμα είναι

```
# ----------------------------------------
#  dt     t1_95    x1(95)   x2(95)   x3(95)
# ----------------------------------------
0.050000 94.95119 5.450003 5.550126 5.048808
0.025000 94.97849 5.275011 5.174837 5.021509
0.012500 94.99519 5.124993 5.099736 5.004811
0.006250 94.99850 4.987460 5.063134 5.001502
0.003125 94.99734 5.021894 5.035365 5.002666
0.001563 94.99923 5.034538 5.017764 5.000772
0.000781 94.99939 4.919035 5.011735 5.000607
0.000391 94.99979 4.695203 5.005493 5.000212
```

[20] Ο σεφ προτείνει: Δοκιμάστε την εντολή `sed 's/0.05/0.025/' box1D_anal.in | ./box` αλλάζοντας το `0.025` με την τιμή του δt που επιθυμείτε να μελετήσετε.

[21] Σπεσιαλιτέ: Δείτε το σενάριο φλοιού `box1D_anal.csh` στο συνοδευτικό λογισμικό για ιδέες αυτοματοποίησης της διαδικασίας.

```
0.000195 95.00000 5.434725 5.001935 5.000003
0.000098 94.99991 5.528124 5.000745 5.000093
0.000049 94.99998 3.358000 5.000330 5.000020
0.000024 94.99998 2.724212 5.000232 5.000014
0.000012 94.99999 9.240705 5.000158 5.000011
```

όπου τη δεύτερη γραμμή την προσθέσαμε ως σχόλιο (ο gnuplot την αγνοεί λόγω του #) που μας θυμίζει τι αντιπροσωπεύει κάθε στήλη.

Η μελέτη της σύγκλισης μπορεί να φανεί εποπτικά στο αριστερό Σχήμα 2.21. Η 1η μέθοδος βελτιώνει την ακρίβειά της μεγιστοποιώντας την όταν $\delta t \approx 0.01$ ενώ για $\delta t < 0.0001$ το σφάλμα γίνεται $> 10\%$ και ή μέθοδος δίνει άχρηστα αποτελέσματα. Η 2η μέθοδος έχει πολύ καλύτερη συμπεριφορά από την 1η. Για να προσπαθήσουμε να καταλάβουμε το λόγο.

Παρατηρούμε ότι καθώς μικραίνει το δt η τελική τιμή του t πλησιάζει την αναμενόμενη $t_f = 95$. Γιατί όμως δεν παίρνουμε $t = 95$, ειδικά όταν $t/\delta t$ είναι ακέραιος αριθμός? Επίσης παρατηρούμε στην 9η γραμμή των δεδομένων του πίνακα (dt=0.000195): Αφού $95/0.000195$ δεν είναι ακέραιος, γιατί $t = 95$? Ακόμα χειρότερα: Αν θεωρητικά αναμένουμε να γίνουν $95/\delta t$ βήματα πόσα γίνονται στην πραγματικότητα; Κάθε φορά που κάνετε μια μέτρηση μετρήστε πόσες γραμμές έχει το αρχείο box1D_1.dat με την εντολή[22]

```
> wc -l box1D_1.dat
```

και συγκρίνετε με τον αναμενόμενο αριθμό. Το αποτέλεσμα είναι ενδιαφέρον:

```
# ----------------------
#   dt    N       N0
# ----------------------
0.050000 1900    1900
0.025000 3800    3800
0.012500 7601    7600
0.006250 15203   15200
0.003125 30394   30400
0.001563 60760   60780
0.000781 121751  121638
0.000391 243753  242966
0.000195 485144  487179
0.000098 962662  969387
```

[22]Εναλλακτικά, βάλτε ένα μετρητή μέσα στο βρόχο του προγράμματος.

```
0.000049 1972589 1938775
0.000024 4067548 3958333
0.000012 7540956 7916666
```

όπου η 2η στήλη έχει τον αριθμό των βημάτων που έγιναν και η 3η τον αριθμό των βημάτων που *έπρεπε* να γίνουν. Παρατηρούμε ότι η ακρίβεια *ελαττώνεται* όταν μικραίνουμε το δt και στο τέλος η διαφορά είναι περίπου 5%! Ειδικά στην τελευταία γραμμή, αν οι πράξεις γίνονταν με μεγαλύτερη ακρίβεια θα έπρεπε ο τελικός χρόνος να ήταν $t_f = 0.000012 \times 7916668 \approx 90.5$ κάτι που αλλάζει δραματικά το αποτέλεσμα σε μια περιοδική κίνηση με περίοδο συγκρινόμενη με το σφάλμα στο χρόνο... Επειδή η 1η μέθοδος προχωράει το χρόνο στις εξισώσεις κίνησης ανάλογα με τον αριθμό των βημάτων καταλαβαίνουμε ότι στην πραγματικότητα η τιμή που παίρνουμε είναι για άλλο χρόνο από αυτόν που νομίζουμε.

Άρα μια σημαντική πηγή σφαλμάτων είναι το σφάλμα συσσώρευσης στον υπολογισμό του χρόνου που γίνεται μεγαλύτερο καθώς μικραίνει το δt. Πώς θα μπορούσαμε να βελτιώσουμε τη συμπεριφορά αυτή? Μια σημαντική βελτίωση μπορεί να γίνει αν αντί να υπολογίζουμε το χρόνο προσθετικά, τον υπολογίζουμε πολλαπλασιαστικά. Έστω `i` ένας μετρητής των βημάτων που έχουμε κάνει. Τότε

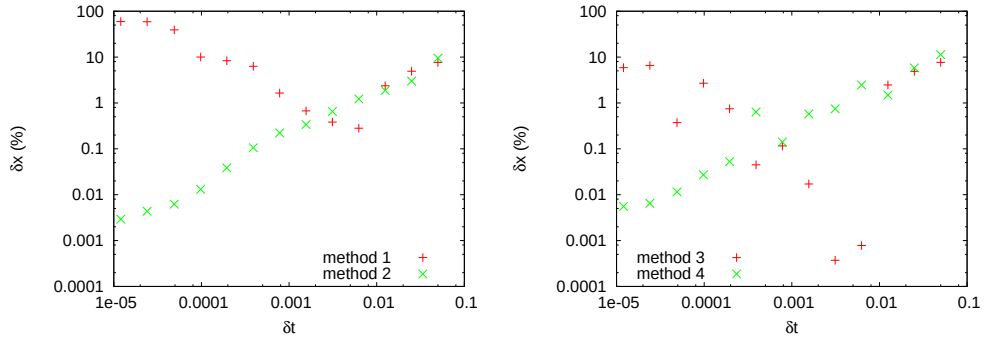
```
C       t = t  + dt     ! Not accurate,    avoid
        t = t0 + i*dt   ! Better accuracy, prefer
```

Ο κύριος βρόχος του προγράμματος στο `box1D_1.f` γίνεται:

```
t = t0
x = x0
v = v0
i = 0
do while(t .le. tf)
 write(11,*)t,x,v
 i = i  + 1
 x = x  + v*dt
 t = t0 + i*dt
 if(x .lt. 0.0 .or. x .gt. L) v = -v
enddo
```

Το πλήρες πρόγραμμα θα το βρείτε στο αρχείο `box1D_4.f` του συνοδευτικού λογισμικού. Ας ονομάσουμε τη μέθοδο αυτή "μέθοδο 3". Παρόμοια αλλαγή κάνουμε και στο αρχείο `box1D_2.f` που θα βρείτε στο `box1D_5.f` και καλούμε τη μέθοδο αυτή "μέθοδο 4". Τέλος τον ακριβή αλγόριθμο

του αρχείου box1D_3.f τον μετατρέπουμε στο αρχείο box1D_6.f. Επαναλαμβάνουμε την παραπάνω ανάλυση και βρίσκουμε ότι το πρόβλημα ακριβούς προσδιορισμού του χρόνου πρακτικά εξαφανίζεται. Το αποτέλεσμα της ανάλυσης του σφάλματος το δείχνουμε στο δεξί Σχήμα 2.21. Η μέθοδος 2 και 4 δεν παρουσιάζει σημαντική διαφορά. Στη μέθοδο 1 και 3 η διαφορά είναι δραματική με το σφάλμα να μειώνεται μέχρι και περισσότερο από 10 φορές. Το πρόβλημα του αυξανόμενου



Σχήμα 2.21: Το επί % σφάλμα $\delta x = 2|x_i(95) - x(95)|/|x_i(95) + x(95)| \times 100$ όπου $x_i(95)$ η τιμή που υπολογίζει η μέθοδος $i = 1, 2, 3, 4$ και $x(95)$ η τιμή που υπολογίζει ο ακριβής αλγόριθμος σύμφωνα με το κείμενο.

σφάλματος καθώς μειώνουμε το δt δεν εξαφανίζεται. Αλλά τώρα καταλαβαίνουμε ότι προέρχεται από τη συσσώρευση σφάλματος στην επαναληπτική σχέση x=x+v*dt. Αυτόν τον τύπο σφάλματος είναι δυσκολότερο να το βελτιώσουμε και παρουσιάζεται συχνά σε μεθόδους επίλυσης διαφορικών εξισώσεων που θα μελετήσουμε στο επόμενο κεφάλαιο.

2.3.3 Το Δισδιάστατο Κουτί

Ας γενικεύσουμε τη μελέτη μας όταν το υλικό σημείο κινείται στις δύο διαστάσεις, στο επίπεδο. Το σωμάτιο είναι περιορισμένο μέσα σε ένα κουτί $0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$ και σκεδάζεται ελαστικά πάνω στα τοιχώματά του. Βρίσκεται δηλαδή σε ένα ορθογώνιο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού. Ο χρήστης τοποθετεί τη χρονική στιγμή t_0 το υλικό σημείο σε μια αρχική θέση (x_0, y_0) με αρχική ταχύτητα (v_{0x}, v_{0y}) και το πρόγραμμα υπολογίζει την τροχιά που ακολουθεί το υλικό σημείο μέχρι το χρόνο t_f με βήμα δt. Μία τέτοια τροχιά φαίνεται στο Σχήμα 2.23.

Θα γενικεύσουμε τον αλγόριθμο που χρησιμοποιήσαμε στο πρόγραμμα box2D_1.f για να μελετήσουμε την κίνηση στο μονοδιάστατο

κουτί. Αν είναι γνωστή η θέση και η ταχύτητα του κινητού σε μια χρονική στιγμή t, τότε τη χρονική στιγμή $t + \delta t$ η θέση και η ταχύτητά του θα δίνεται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} x(t+\delta t) &= x(t) + v_x(t)\delta t \\ y(t+\delta t) &= y(t) + v_y(t)\delta t \\ v_x(t+\delta t) &= v_x(t) \\ v_y(t+\delta t) &= v_y(t)\,. \end{aligned} \tag{2.25}$$

Η σύγκρουση με τα τοιχώματα προτυποποιείται με ανάκλαση της κάθετης στα τοιχώματα συνιστώσας της ταχύτητας όταν η αντίστοιχη συντεταγμένη περάσει τα όρια του τοίχου. Φυσικά αυτό εισάγει το συστηματικό σφάλμα που συζητήσαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Αποφεύγουμε το συστηματικό σφάλμα συσσώρευσης στον υπολογισμό του χρόνου εισάγοντας έναν μετρητή βημάτων `i`, και έτσι το κεντρικό κομμάτι του προγράμματος είναι:

```
i = i  + 1
t = t0 + i *dt
x = x  + vx*dt
y = y  + vy*dt
if(x .lt. 0.0 .or. x .gt. Lx) vx = -vx
if(y .lt. 0.0 .or. y .gt. Ly) vy = -vy
```

Παραθέτουμε το πλήρες πρόγραμμα παρακάτω το οποίο θα βρείτε στο αρχείο `box2D_1.f`. Εκτός από τα εισαγωγικά και τις αρχικοποιήσεις, εισάγαμε και δύο μετρητές κρούσεων με τα τοιχώματα `nx` και `ny`:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File box2D_1.f
C     Motion of a free particle in a box  0<x<Lx 0<y<Ly
C     Use integration with time step dt: x = x + vx*dt y=y+vy*dt
C    ------------------------------------------------------------
      program box2D
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real*8  Lx,Ly,x0,y0,v0x,v0y,t0,tf,dt,t,x,y,vx,vy
      integer i,nx,ny
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter Lx,Ly:'
```

```
      read(5,*)Lx,Ly
      print *,'# Lx = ',Lx,' Ly= ',Ly
      if( Lx .le. 0.0) stop 'Lx must be positive.'
      if( Ly .le. 0.0) stop 'Ly must be positive.'
      print *,'# Enter x0,y0,v0x,v0y:'
      read(5,*)x0,y0,v0x,v0y
      print *,'# x0= ',x0,' y0= ',y0,' v0x= ',v0x,' v0y= ',v0y
     if(x0 .lt. 0.0 .or. x0 .gt. Lx) stop 'illegal value of x0.'
     if(y0 .lt. 0.0 .or. y0 .gt. Ly) stop 'illegal value of y0.'
    if(v0x**2+v0y**2.eq. 0.0    ) stop 'illegal value of v0 = 0.'
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      i  = 0
      nx = 0
      ny = 0
      t  = t0
      x  = x0
      y  = y0
      vx = v0x
      vy = v0y
      open(unit=11,file='box2D_1.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      do while(t .le. tf)
       write(11,*)t,x,y,vx,vy
       i = i  + 1
       t = t0 + i *dt
       x = x  + vx*dt
       y = y  + vy*dt
       if(x .lt. 0.0 .or. x .gt. Lx) then
        vx = -vx
        nx =  nx + 1
       endif
       if(y .lt. 0.0 .or. y .gt. Ly) then
        vy = -vy
        ny =  ny + 1
       endif
      enddo
```

```
      close(11)
      print *,'# Number of collisions:'
      print *,'# nx= ',nx,' ny= ',ny
      end
```

Μια τυπική συνεδρία μελέτης μιας τροχιάς δίνεται παρακάτω:

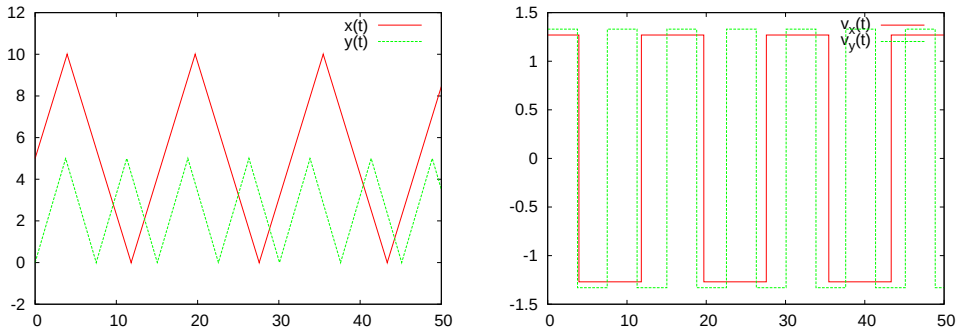
```
> f77 box2D_1.f -o box
> ./box
 # Enter Lx,Ly:
10.0 5.0
 # Lx =   10. Ly=   5.
 # Enter x0,y0,v0x,v0y:
5.0 0.0 1.27 1.33
 # x0=   5. y0=   0. v0x=   1.27 v0y=   1.33
 # Enter t0,tf,dt:
0 50 0.01
 # t0=   0. tf=   50. dt=   0.01
 # Number of collisions:
 # nx=  6 ny=  13
> gnuplot
gnuplot> plot   "box2D_1.dat" using 1:2 with lines title "x (t)"
gnuplot> replot "box2D_1.dat" using 1:3 with lines title "y (t)"
gnuplot> plot   "box2D_1.dat" using 1:4 with lines title "vx(t)"
gnuplot> replot "box2D_1.dat" using 1:5 with lines title "vy(t)"
gnuplot> plot   "box2D_1.dat" using 2:3 with lines title "x-y"
```

Παρατηρούμε την τελευταία γραμμή εξόδου από το πρόγραμμα: Το υλικό σημείο ανακλάται από τα *κάθετα τοιχώματα* του κουτιού 6 φορές (nx= 6) και με τα *οριζόντια* 13 (ny=13). Με τις εντολές αυτές παίρνουμε τις γραφικές παραστάσεις που φαίνονται στα Σχήματα 2.22 και 2.23.

Για να κάνουμε animation της τροχιάς αντιγράφουμε το αρχείο `box2D_animate.gnu` από το συνοδευτικό λογισμικό στον κατάλογο που έχουμε τα δεδομένα μας και δίνουμε τις εντολές στο gnuplot:

```
gnuplot> file = "box2D_1.dat"
gnuplot> Lx = 10 ; Ly = 5
gnuplot> t0 = 0  ; tf = 50; dt = 1
gnuplot> load "box2D_animate.gnu"
gnuplot> t0 = 0  ; dt = 0.5; load "box2D_animate.gnu"
```

Στην τελευταία γραμμή επαναλάβαμε το animation στη ... μισή ταχύτητα. Μπορείτε να χρησιμοποιήσετε επίσης το ήδη γνωστό πρόγραμμα



Σχήμα 2.22: Τα αποτελέσματα για το υλικό σημείο που κινείται μέσα σε δισδιάστατο κουτί που παίρνουμε από το πρόγραμμα `box2D_1.f`. Οι παράμετροι είναι $L_x = 10$, $L_y = 5$, $x_0 = 5$, $y_0 = 0$, $v_{0x} = 1.27$, $v_{0y} = 1.33$, $t_0 = 0$, $t_f = 50$, $\delta t = 0.01$.

`animate2D.gnu` που παρουσιάσαμε στην παράγραφο 2.1.1. Οι αλλαγές που κάναμε στο `box2D_animate.gnu` απλά προσθέτουν ένα σχέδιο του κουτιού και υπολογίζουν αυτόματα τα όρια σχεδιασμού της γραφικής παράστασης. Επίσης, το διάνυσμα που παρακολουθεί την κίνηση του σωματιδίου δεν είναι το διάνυσμα θέσης, αλλά αυτό που ενώνει την αρχική με την τελική θέση του.

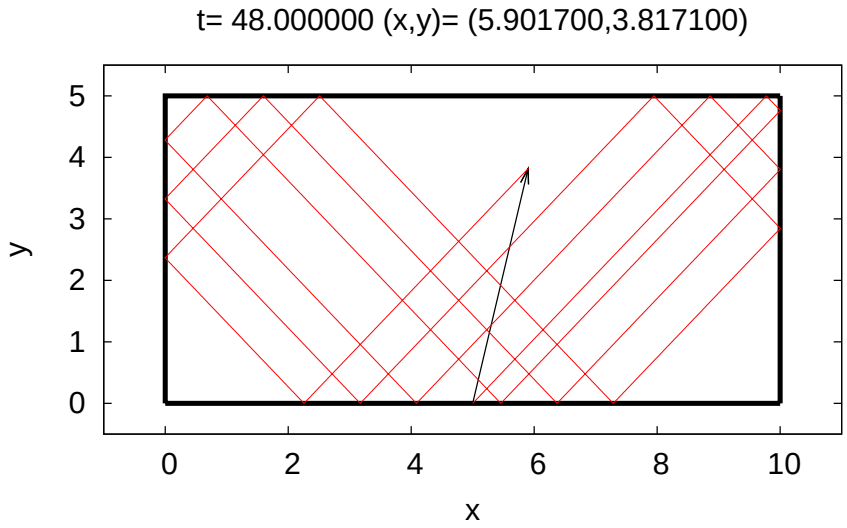
Το επόμενο βήμα είναι να ελέγξουμε την ακρίβεια των αποτελεσμάτων μας. Αυτό γίνεται στο πνεύμα της αντίστοιχης παρουσίασης του μονοδιάστατου προβλήματος και αφήνεται σαν άσκηση για τον αναγνώστη.

2.4 Εφαρμογές

Στην παράγραφο αυτή θα παρουσιάσουμε απλά προβλήματα ελεύθερης κίνησης μετ' εμποδίων για εξάσκηση στον προγραμματισμό τους.

Θα αρχίσουμε με ... μίνι γκολφ. Ο παίκτης ρίχνει το (σημειακό) μπαλάκι σε ένα ορθογώνιο επίπεδο κουτί μήκους πλευρών L_x, L_y το οποίο είναι ανοιχτό στην πλευρά $x = 0$. Το κουτί έχει μια τρύπα κέντρου (x_c, y_c) και ακτίνας R. Αν η μπάλα πέσει μέσα, ο παίκτης κερδίζει. Αν η μπάλα βγει από την ανοιχτή πλευρά ο παίκτης χάνει. Για να ελέγξουμε αν το υλικό σημείο μπήκε στην περιοχή της τρύπας όταν είναι στη θέση (x, y) αρκεί να ελέγξουμε αν $(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 \leq R^2$.

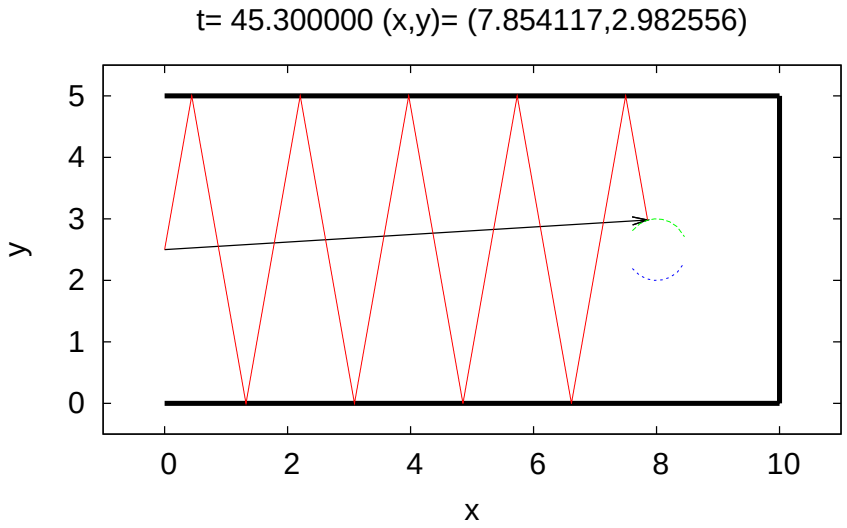
Το υλικό σημείο υποτίθεται πως για $t_0 = 0$ βρίσκεται στη θέση $(0, L_y/2)$ και ο παίκτης το εκτοξεύει με ταχύτητα μέτρου v_0 με γωνία θ μοίρες που σχηματίζει με τον άξονα x. Το πρόγραμμα δίνεται



Σχήμα 2.23: Η τροχιά του υλικού σημείου του Σχήματος 2.22 τη χρονική στιγμή $t = 48$. Η αρχή του βέλους είναι η αρχική θέση του υλικού σημείου και το τέλος η στιγμιαία του θέση. Το κουτί περιγράφεται από τις παχιές γραμμές.

παρακάτω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File MiniGolf.f
C     Motion of a free particle in a box  0<x<Lx 0<y<Ly
C    The box is open at x=0 and has a hole at (xc,yc) of radius R
C    Ball is shot at (0,Ly/2) with speed v0, angle theta (degrees)
C     Use integration with time step dt: x = x + vx*dt y=y+vy*dt
C     Ball stops in hole (success) or at x=0 (failure)
C    ------------------------------------------------------------
      program MiniGolf
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real*8  Lx,Ly,x0,y0,v0x,v0y,t0,tf,dt,t,x,y,vx,vy
      real*8  v0,theta,xc,yc,R,R2,PI
      integer i,nx,ny
      character*7 result
      parameter(PI=3.14159265358979324D0)
```



Σχήμα 2.24: Η τροχιά του υλικού σημείου που παράγεται από το πρόγραμμα `MiniGolf.f` με παραμέτρους αυτές που δίνονται στο κείμενο. Απεικονίζεται η στιγμή της ... επιτυχίας! Τη χρονική στιγμή $t = 45.3$ το υλικό σημείο μπαίνει στην περιοχή της τρύπας με κέντρο $(8, 2.5)$ και ακτίνα 0.5.

```
C     ------------------------------------------------------------
C       Ask user for input:
        print *,'# Enter Lx,Ly:'
        read(5,*)Lx,Ly
        print *,'# Lx = ',Lx,' Ly= ',Ly
        if( Lx .le. 0.0) stop 'Lx must be positive.'
        if( Ly .le. 0.0) stop 'Ly must be positive.'
        print *,'# Enter hole position and radius: (xc,yc), R:'
        read(5,*)xc,yc,R
        print *,'# (xc,yc)= ( ',xc,' , ',yc,' ) R= ',R
        print *,'# Enter v0, theta(degrees):'
        read(5,*)v0,theta
        print *,'# v0= ',v0,' theta= ',theta,' degrees'
        if(v0        .le. 0.0D0 ) stop 'illegal value of v0.'
        if(ABS(theta).ge. 90.0D0) stop 'illegal value of theta.'
        print *,'# Enter dt:'
        read(5,*)dt
        print *,'# dt= ',dt
```

```
C     ------------------------------------------------------------
C       Initialize
        t0 = 0.0D0
        x0 = 0.00001D0 ! small but non-zero
        y0 = Ly/2.0
        R2 = R*R
        theta = (PI/180.0D0)*theta
        v0x   = v0*cos(theta)
        v0y   = v0*sin(theta)
        print *,'# x0= ',x0,' y0= ',y0,' v0x= ',v0x,' v0y= ',v0y
        i  = 0
        nx = 0
        ny = 0
        t  = t0
        x  = x0
        y  = y0
        vx = v0x
        vy = v0y
        open(unit=11,file='MiniGolf.dat')
C     ------------------------------------------------------------
C       Compute:
        do while( .TRUE. ) !forever!
         write(11,*)t,x,y,vx,vy
         i = i  + 1
         t = t0 + i*dt
         x = x  + vx*dt
         y = y  + vy*dt
         if(x .gt. Lx) then
          vx = -vx
          nx =  nx + 1
         endif
         if(y .lt. 0.0 .or. y .gt. Ly) then
          vy = -vy
          ny = ny  + 1
         endif
         if(x .le. 0.0D0)then
          result = 'Failure'
          goto 11
         endif
         if( ((x-xc)*(x-xc)+(y-yc)*(y-yc)) .le. R2)then
          result = 'Success'
```

```
        goto 11
       endif
      enddo
 11   continue !break loop here
      close(11)
      print *,'# Number of collisions:'
      print *,'# Result= ',result,' nx= ',nx,' ny= ',ny
      end
```

Για να το τρέξουμε κάνουμε τα συνηθισμένα:

```
> f77 MiniGolf.f -o mg
> ./mg
 # Enter Lx,Ly:
10 5
 # Lx =   10. Ly=   5.
 # Enter hole position and radius: (xc,yc), R:
8 2.5 0.5
 # (xc,yc)= (   8. ,   2.5 ) R=   0.5
 # Enter v0, theta(degrees):
1 80
 # v0=   1. theta=   80. degrees
 # Enter dt:
0.01
 # dt=   0.01
 # x0=   1.E-05 y0=   2.5 v0x=   0.173648178 v0y=   0.984807753
 # Number of collisions:
 # Result= Success nx=  0 ny=  9
```

Φτιάξτε τα διαγράμματα της θέσης και της ταχύτητας με το χρόνο καθώς και της τροχιάς κατά τα γνωστά. Για διασκέδαση του αναγνώστη παρέχουμε και ειδικό πρόγραμμα animation (μπορείτε να χρησιμοποιήσετε και το `animate2D.gnu`). Αντιγράψτε από το συνοδευτικό λογισμικό το αρχείο `MiniGolf_animate.gnu`, ξεκινήστε το gnuplot και δώστε τις εντολές:

```
gnuplot> file = "MiniGolf.dat"
gnuplot> Lx = 10;Ly = 5
gnuplot> xc = 8; yc = 2.5 ; R = 0.5
gnuplot> t0 = 0; dt = 0.1
gnuplot> load "MiniGolf_animate.gnu"
```

Το Σχήμα 2.24 αποτελεί αδιάψευστη μαρτυρία της επιτυχίας μας!

Η επόμενη εφαρμογή μας θα είναι τρισδιάστατη. Θα μελετήσουμε την κίνηση ενός υλικού σημείου το οποίο κινείται μέσα σε ένα κύλινδρο ακτίνας R και ύψους L. Η κρούσεις στα τοιχώματα και τις βάσεις του κυλίνδρου είναι ελαστικές και ο κύλινδρος είναι αμετακίνητος και απαραμόρφωτος. Στο πρόγραμμα που θα γράψουμε παίρνουμε τον κύλινδρο να έχει τον άξονα συμμετρίας τον άξονα των z. Η μία βάση του τοποθετείται στο επίπεδο $z = 0$ και η άλλη στο $z = L$. Η διάταξη φαίνεται στο Σχήμα 2.26.

Το πρόβλημα δεν παρουσιάζει καμία δυσκολία σε σχέση με τα προηγούμενα όσο αφορά την κίνηση στον άξονα των z, το σωμάτιο ανακλάται πάνω στα επίπεδα τοιχώματα των βάσεων του κυλίνδρου. Το μόνο καινούργιο είναι η προβολή της κίνησης στο επίπεδο $x - y$, όπου το υλικό σημείο φαίνεται να κινείται σε ένα επίπεδο και να συγκρούεται ελαστικά στο εσωτερικό ενός κύκλου ακτίνας R και κέντρο πάνω στον άξονα των z. Η κατάσταση περιγράφεται στο Σχήμα 2.25. Κατά την ελαστική ανάκλαση του σωματίου απλά $v_r \to -v_r$ ενώ η v_θ μένει ή ίδια. Η ταχύτητα του σωματιδίου πριν την κρούση είναι

$$\begin{aligned} \vec{v} &= v_x\hat{x} + v_y\hat{y} \\ &= v_r\hat{r} + v_\theta\hat{\theta} \end{aligned} \tag{2.26}$$

ενώ μετά

$$\begin{aligned} \vec{v}' &= v'_x\hat{x} + v'_y\hat{y} \\ &= -v_r\hat{r} + v_\theta\hat{\theta} \end{aligned} \tag{2.27}$$

Από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \cos\theta\hat{x} + \sin\theta\hat{y} \\ \hat{\theta} &= -\sin\theta\hat{x} + \cos\theta\hat{y}\,, \end{aligned} \tag{2.28}$$

και τις σχέσεις $v_r = \vec{v}\cdot\hat{r}$, $v_\theta = \vec{v}\cdot\hat{\theta}$, παίρνουμε

$$\begin{aligned} v_r &= v_x\cos\theta + v_y\sin\theta \\ v_\theta &= -v_x\sin\theta + v_y\cos\theta\,. \end{aligned} \tag{2.29}$$

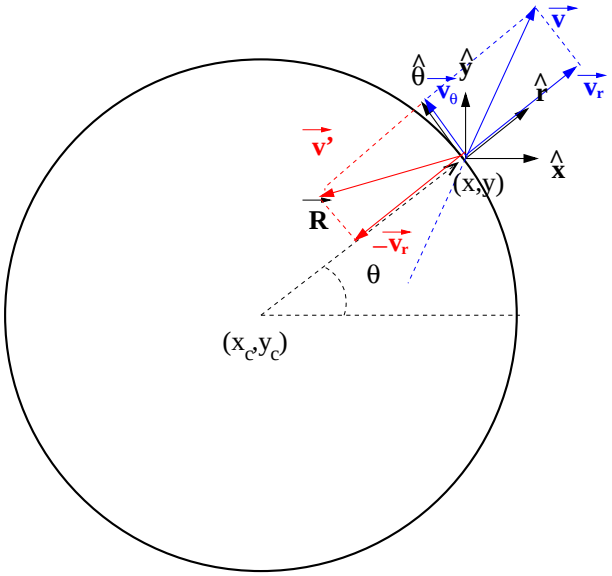
Αντιστρέφοντάς τις παίρνουμε

$$\begin{aligned} v_x &= v_r\cos\theta - v_\theta\sin\theta \\ v_y &= v_r\sin\theta + v_\theta\cos\theta\,. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Με το μετασχηματισμό $v_r \to -v_r$ η νέα ταχύτητα σε καρτεσιανές συντεταγμένες θα είναι

$$\begin{aligned} v'_x &= -v_r \cos\theta - v_\theta \sin\theta \\ v'_y &= -v_r \sin\theta + v_\theta \cos\theta \,. \end{aligned} \tag{2.31}$$

Ο μετασχηματισμός $v_x \to v'_x$, $v_y \to v'_y$ θα υλοποιηθεί σε μια υπορου-



Σχήμα 2.25: Ελαστική ανάκλαση υλικού σημείου που πέφτει στο εσωτερικό κύκλου ακτίνας $R = |\vec{R}|$ και κέντρου $\vec{r}_c = x_c\hat{x} + y_c\hat{y}$ στο σημείο $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y}$. Έχουμε $\vec{R} = (x - x_c)\hat{x} + (y - y_c)\hat{y}$. Η ταχύτητα αρχικά είναι $\vec{v} = v_r\hat{r} + v_\theta\hat{\theta}$ όπου $\hat{r} \equiv \vec{R}/R$. Μετά την ανάκλαση $v_r \to -v_r$ και η νέα ταχύτητα του υλικού σημείου είναι $\vec{v}' = -v_r\hat{r} + v_\theta\hat{\theta}$

τίνα `reflectVonCircle(vx,vy,x,y,xc,yc,R)`. Στην είσοδο της δίνουμε την αρχική ταχύτητα `(vx,vy)`, το σημείο κρούσης `(x,y)`, το κέντρο του κύκλου `(xc,yc)` και την ακτίνα του κύκλου[23] `R`. Στην έξοδο, τα `(vx,vy)` έχουν αντικατασταθεί με τις νέες τιμές[24] (v'_x, v'_y).

Το πρόγραμμα που προκύπτει θα το βρείτε στο αρχείο `Cylinder3D.f`:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     File Cylinder3D.f
C    Motion of a free particle in a cylinder with axis the z-axis,
```

[23] Προφανώς ιδανικά θα ισχύει $R^2 = (x - x_c)^2 + (y - y_c)^2$ αλλά επειδή υπάρχει συστηματικό σφάλμα στη θέση της κρούσης, επιλέγουμε το R να δίνεται.

[24] Επίσης το υλικό σημείο όπως θα δούμε τοποθετείται ακριβώς πάνω στον κύκλο.

```
C     radius R and 0<z<L
C     Use integration with time step dt: x = x + vx*dt
C                                        y = y + vy*dt
C                                        z = z + vz*dt
C     Use subroutine reflectVonCircle for colisions at r=R
C    ------------------------------------------------------------
      program Cylinder3D
      implicit none
C    ------------------------------------------------------------
C     Declaration of variables
      real*8  x0,y0,z0,v0x,v0y,v0z,t0,tf,dt,t,x,y,z,vx,vy,vz
      real*8  L,R,R2,vxy,rxy,r2xy,xc,yc
      integer i,nr,nz
C    ------------------------------------------------------------
C     Ask user for input:
      print *,'# Enter R, L:'
      read(5,*)R,L
      print *,'# R= ',R,' L= ',L
      if( R .le. 0.0) stop 'R must be positive.'
      if( L .le. 0.0) stop 'L must be positive.'
      print *,'# Enter x0,y0,z0,v0x,v0y,v0z:'
      read(5,*)x0,y0,z0,v0x,v0y,v0z
      rxy = DSQRT(x0*x0+y0*y0)
     print *,'# x0 = ',x0 ,' y0 = ',y0 ,' z0=  ',z0, ' rxy= ',rxy
      print *,'# v0x= ',v0x,' v0y= ',v0y,' v0z= ',v0z
     if(rxy .gt. R               ) stop 'illegal value of rxy > R'
     if(z0  .lt. 0.0D0           ) stop 'illegal value of z0  < 0'
     if(z0  .gt. L               ) stop 'illegal value of z0  > L'
    if(v0x**2+v0y**2+v0z**2.eq. 0.0 ) stop 'illegal value of v0 = 0.'
      print *,'# Enter t0,tf,dt:'
      read(5,*)t0,tf,dt
      print *,'# t0= ',t0,' tf= ',tf,' dt= ',dt
C    ------------------------------------------------------------
C     Initialize
      i  = 0
      nr = 0
      nz = 0
      t  = t0
      x  = x0
      y  = y0
      z  = z0
```

```
      vx = v0x
      vy = v0y
      vz = v0z
      R2 = R*R
     xc = 0.0D0 !center of circle which is the projection of the
      yc = 0.0D0 !cylinder on the xy plane
      open(unit=11,file='Cylinder3D.dat')
C    ------------------------------------------------------------
C     Compute:
      do while(t .le. tf)
       write(11,100)t,x,y,z,vx,vy,vz
       i = i  + 1
       t = t0 + i *dt
       x = x  + vx*dt
       y = y  + vy*dt
       z = z  + vz*dt
       if(z .lt. 0.0 .or. z .gt. L) then
        vz = -vz           ! reflection on cylinder caps
        nz =  nz + 1
       endif
       r2xy = x*x+y*y
       if( r2xy .gt. R2)then
        call reflectVonCircle(vx,vy,x,y,xc,yc,R)
        nr  = nr + 1
       endif
      enddo
      close(11)
      print *,'# Number of collisions:'
      print *,'# nr= ',nr,' nz= ',nz

 100  FORMAT(100G28.16)
      end
C    ------------------------------------------------------------
C    ============================================================
C    ------------------------------------------------------------
      subroutine reflectVonCircle(vx,vy,x,y,xc,yc,R)
      implicit none
      real*8 vx,vy,x,y,xc,yc,R
      real*8 theta,cth,sth,vr,vth

      theta = atan2(y-yc,x-xc)
```

```
      cth   = cos(theta)
      sth   = sin(theta)

      vr    =  vx*cth + vy *sth
      vth   = -vx*sth + vy *cth

      vx    = -vr*cth - vth*sth !reflect vr -> -vr
      vy    = -vr*sth + vth*cth

      x     = xc + R*cth        !put x,y on the circle
      y     = yc + R*sth
      end
```

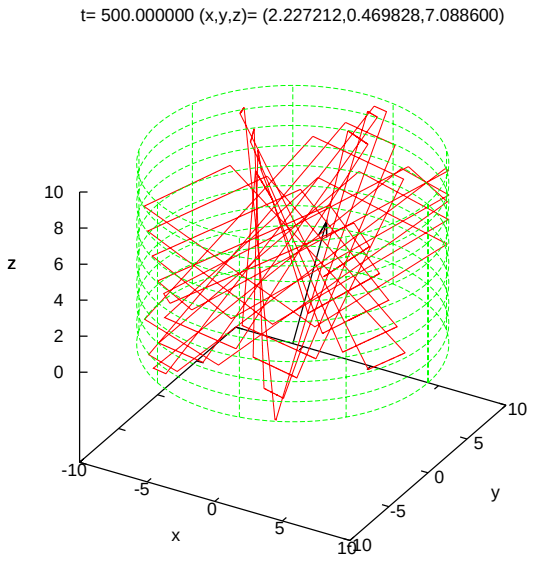
Να επισημάνουμε μόνο τις ακόλουθες λεπτομέρειες: Χρησιμοποιούμε καταρχήν τη συνάρτηση `atan2` για τον προσδιορισμό της γωνίας `theta`. Η συνάρτηση αυτή με ορίσματα `atan2(y,x)` επιστρέφει τη γωνία $\theta = \tan^{-1}(y/x)$ στο σωστό τεταρτημόριο που βρίσκεται το σημείο (x, y). Η γωνία που ζητάμε δίνεται από την εντολή `atan2(y-yc,x-xc)`. Στη συνέχεια εφαρμόζουμε τις σχέσεις (2.29) και (2.31) , ενώ στις τελευταίες δύο γραμμές επιβάλλουμε μετά την κρούση το υλικό σημείο να είναι πάνω στο σημείο του κύκλου $(x_c + R\cos\theta, y_c + R\sin\theta)$.

Η μεταγλώττιση και το τρέξιμο γίνεται κατά τα γνωστά:

```
> f77 Cylinder3D.f -o cl
> ./cl
 # Enter R, L:
10.0 10.0
 # R=   10. L=   10.
 # Enter x0,y0,z0,v0x,v0y,v0z:
1.0 2.2 3.1   0.93 -0.89 0.74
 # x0 =   1. y0 =   2.2 z0=    3.1 rxy=   2.41660919
 # v0x=   0.93 v0y=  -0.89 v0z=   0.74
 # Enter t0,tf,dt:
0.0 500.0 0.01
 # t0=   0. tf=   500. dt=   0.01
 # Number of collisions:
 # nr=  33 nz=  37
```

Για να φτιάξουμε τις γραφικές παραστάσεις της θέσης/ταχύτητας συναρτήσει του χρόνου δίνουμε τις εντολές `gnuplot` κατά τα γνωστά:

```
gnuplot> file="Cylinder3D.dat"
```



Σχήμα 2.26: Η τροχιά του σωματιδίου που ανακλάται στο εσωτερικό κυλίνδρου με $R = 10$, $L = 10$ σύμφωνα με το πρόγραμμα `Cylinder3D.f`. Έχουμε επιλέξει $\vec{r}_0 = 1.0\hat{x} + 2.2\hat{y} + 3.1\hat{z}$, $\vec{v}_0 = 0.93\hat{x} - 0.89\hat{y} + 0.74\hat{z}$, $t_0 = 0$, $t_f = 500.0$, $\delta t = 0.01$.

```
gnuplot> plot file using 1:2 with lines t "  x(t)",\
              file using 1:3 with lines t "  y(t)",\
              file using 1:4 with lines t "  z(t)"
gnuplot> plot file using 1:5 with lines t "v_x(t)",\
              file using 1:6 with lines t "v_y(t)",\
              file using 1:7 with lines t "v_z(t)"
```

Μπορούμε να δούμε και την απόσταση του κινητού από τον άξονα του κυλίνδρου $r(t) = \sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}$ σα συνάρτηση με το χρόνο με την εντολή

```
gnuplot> plot file using 1:(sqrt($2**2+$3**2)) with lines title "r(t)"
```

Για να φτιάξουμε το σχήμα τις τροχιάς μαζί με τον κύλινδρο δίνουμε τις εντολές

```
gnuplot> L = 10 ; R = 10
gnuplot> set urange [0:2.0*pi]
gnuplot> set vrange [0:L]
gnuplot> set parametric
gnuplot> splot file using 2:3:4 with lines notitle,\
                      R*cos(u),R*sin(u),v notitle
```

Με την εντολή `set parametric` μπορούμε να φτιάξουμε τη γραφική παράσταση μιας δισδιάστατης επιφάνειας της μορφής $\vec{r}(u,v) = x(u,v)\,\hat{x} + y(u,v)\,\hat{y} + z(u,v)\,\hat{z}$. Ο κύλινδρος (χωρίς τις βάσεις του) δίνεται από τις παραμετρικές εξισώσεις $\vec{r}(u,v) = R\cos u\,\hat{x} + R\sin u\,\hat{y} + v\,\hat{z}$ με $u \in [0, 2\pi)$, $v \in [0, L]$.

Για το animation της τροχιάς αντιγράψτε το αρχείο `Cylinder3D_animate.gnu` στον κατάλογο που κάνετε την ανάλυση και μέσα από το `gnuplot` δώστε τις εντολές

```
gnuplot> R=10;L=10;t0=0;tf=500;dt=10;load "Cylinder3D_animate.gnu"
```

βάζοντας φυσικά τις παραμέτρους που χρησιμοποιήσατε εσείς. Το αποτέλεσμα φαίνεται στο Σχήμα 2.26.

2.5 Ασκήσεις

2.1 Στο πρόγραμμα `Circle.f` δώστε τις εντολές που απαιτούνται ώστε το πρόγραμμα να τυπώνει τον αριθμό των πλήρων κύκλων που διέγραψε το κινητό.

2.2 Στο πρόγραμμα `Circle.f` προσθέστε όλα τα αναγκαία τεστ στις παραμέτρους που εισάγει ο χρήστης, έτσι ώστε το πρόγραμμα να είναι εγγυημένο ότι θα τρέξει ομαλά. Κάνετε το ίδιο και στα άλλα προγράμματα που δίνονται στο κεφάλαιο αυτό.

2.3 Υλικό σημείο κινείται πάνω σε κύκλο με κέντρο την αρχή των αξόνων με σταθερή γωνιακή ταχύτητα ω. Τη χρονική στιγμή $t_0 = 0$ το σωμάτιο βρίσκεται στο σημείο (x_0, y_0). Γράψτε το πρόγραμμα `CircularMotion.f` που να απεικονίζει την τροχιά. Ο χρήστης θα δίνει στην είσοδο τα $\omega, x_0, y_0, t_0, t_f, \delta t$. Στην έξοδο θα παίρνει τα δεδομένα σύμφωνα με το πρόγραμμα `Circle.f`.

2.4 Μετατρέψτε το πρόγραμμα `SimplePendulum.f` έτσι ώστε ο χρήστης να μπορεί να δίνει και μη μηδενική ταχύτητα ως αρχική συνθήκη.

2.5 Μελετήστε το όριο $k \to 0$ στο πρόβλημα της βολής που δίνεται από τις Σχέσεις (2.10) . Αναπτύξτε το $\mathrm{e}^{-kt} = 1 - kt + \frac{1}{2!}(kt)^2 + \ldots$ και κρατήστε τους όρους που δε μηδενίζονται στο όριο $k \to 0$. Στη συνέχεια κρατήστε τους όρους με την αμέσως μικρότερη δύναμη του k. Προγραμματίστε τις εξισώσεις αυτές σε ένα αρχείο `ProjectileSmallAirResistance.f`. Θεωρήστε τις αρχικές συνθήκες $\vec{v}_0 = \hat{x} + \hat{y}$ και υπολογίστε αριθμητικά το βεληνεκές της τροχιάς με τα δύο προγράμματα `ProjectileSmallAirResistance.f`, `ProjectileAirResistance.f`. Προσδιορίστε τις τιμές του k για τις οποίες τα αποτελέσματά σας συμφωνούν με ακρίβεια καλύτερη από 5%.

2.6 Προγραμματίστε την κίνηση της βολής όταν η δύναμη της αντίστασης του αέρα έχει μέτρο ανάλογο του τετραγώνου της ταχύτητας. Συγκρίνετε το βεληνεκές της τροχιάς που προκύπτει με αυτό που υπολογίζεται από το πρόγραμμα `ProjectileAirResistance.f` για τις παραμέτρους του Σχήματος 2.10.

2.7 Κάνετε τις απαραίτητες μετατροπές στο πρόγραμμα `Lissajous.f` ώστε ο χρήστης να μπορεί να δίνει διαφορετικό πλάτος και αρχική φάση στην κίνηση που γίνεται στη διεύθυνση του άξονα των y. Μελετήστε τις τροχιές όταν το πλάτος είναι ίσο και η διαφορά φάσης

είναι $\pi/4, \pi/2, \pi, -\pi$ και το ίδιο όταν το πλάτος στη διεύθυνση του άξονα των y είναι διπλάσιο.

2.8 Κάνετε τις απαραίτητες μετατροπές στο πρόγραμμα `ProjectileAirResistance.f` ώστε να μπορεί να συμπεριλάβει και τη μελέτη της περίπτωσης $k = 0$.

2.9 Κάνετε τις απαραίτητες μετατροπές στο πρόγραμμα `ProjectileAirResistance.f` ώστε να υπολογίστε την κίνηση του υλικού σημείου στο χώρο. Κάνετε τα διαγράμματα της θέσης/ταχύτητας συναρτήσει του χρόνου και της τρισδιάστατης τροχιάς με την εντολή `splot` στο `gnuplot`. Χρησιμοποιήστε το πρόγραμμα `animate3D.gnu` για να κάνετε animation της τροχιάς.

2.10 Κάνετε τις απαραίτητες μετατροπές στο πρόγραμμα `ChargeInB.f` ώστε να υπολογίζει τον αριθμό των πλήρων στροφών που έχει κάνει η προβολή της τροχιάς του φορτίου στο επίπεδο $x - y$.

2.11 Μεταβάλετε το πρόγραμμα `box1D_1.f` έτσι ώστε να τυπώνει στο `stdout` τον αριθμό των κρούσεων του υλικού σημείου στο αριστερό τοίχωμα, στο δεξί και το συνολικό.

2.12 Επαναλάβετε το ίδιο για το πρόγραμμα `box1D_2.f`. Συμπληρώστε σε δύο στήλες στον πίνακα της Σελ. 118 το συνολικό αριθμό των κρούσεων που προκύπτουν και σχολιάστε.

2.13 Στο πρόγραμμα `box1D_1.f` επιλέξτε `L= 10, v0=1`. Ελαττώστε το `dt` μέχρι το υλικό σημείο να σταματήσει να κινείται. Για ποια τιμή του `dt` συμβαίνει αυτό? Αυξήστε το `v0=10,100`. Μέχρι ποια τιμή του `dt` μπορείτε να φτάσετε τώρα? Γιατί?

2.14 Στο πρόγραμμα `box1D_1.f` αλλάξτε τις δηλώσεις `REAL`→`REAL*8` και στις σταθερές προσθέστε τον εκθέτη `D0` (λ.χ. `0.0`→`0.0D0`). Μελετήστε τη διαφορά στα αποτελέσματα που πήρατε στην ανάλυση της παραγράφου 2.3.2. Επαναλάβετε την άσκηση 2.13. Τι παρατηρείτε?

2.15 Κάντε το ίδιο στα προγράμματα `box1D_2.f`, `box1D_3.f` και επαναλάβετε την ανάλυση της παραγράφου 2.3.2.

2.16 Μεταβάλλετε το πρόγραμμα `box1D_1.f` ώστε να μελετήσετε την περίπτωση που το κινητό συγκρούεται μη ελαστικά με τα τοιχώματα του κουτιού, έτσι ώστε $v' = -ev$, $0 < e \leq 1$.

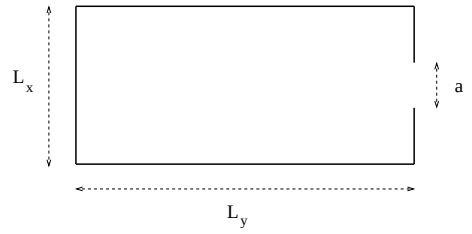
2.17 Μεταβάλλετε το πρόγραμμα `box2D_1.f` ώστε να μελετήσετε την περίπτωση που το κινητό συγκρούεται μη ελαστικά με τα τοιχώματα του κουτιού, έτσι ώστε $v'_x = -ev_x$, $v'_y = -ev_y$, $0 < e \leq 1$.

2.18 Χρησιμοποιείστε τη μέθοδο υπολογισμού του χρόνου που βρίσκεται στα προγράμματα `box1D_4.f`, `box1D_5.f`, `box1D_6.f` και αναπαράγετε τα αποτελέσματα του Σχήματος 2.21.

2.19 Κινητό πέφτει ελεύθερα στην κατακόρυφη διεύθυνση ξεκινώντας από ηρεμία από ύψος h. Στο δάπεδο υφίσταται μη ελαστική κρούση έτσι ώστε μετά την κρούση $v'_y = -ev_y$ με $0 < e \leq 1$ παράμετρος. Μελετήστε γράφοντας κατάλληλο πρόγραμμα την κίνηση για $e = 0.1, 0.5, 0.9, 1.0$.

2.20 Γενικεύστε το προηγούμενο πρόγραμμα για $\vec{v}_0 = v_{0x}\,\hat{x}$. Κάνετε το animation της τροχιάς.

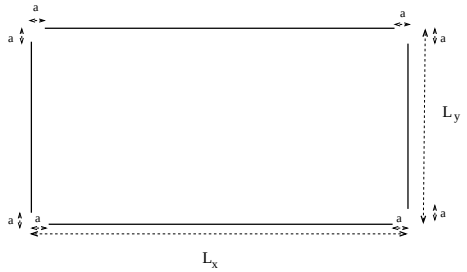
2.21 Μελετήστε την κίνηση υλικού σημείου στο κουτί του Σχήματος 2.27. Μετρήστε σε κάθε βολή πόσες κρούσεις παίρνετε μέχρι το υλικό σημείο να βγει από το κουτί.



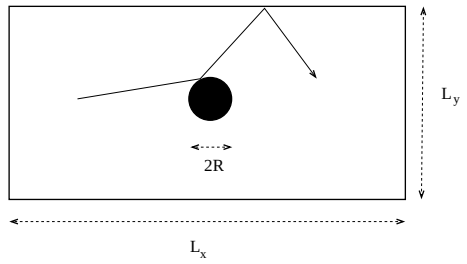
Σχήμα 2.27: Άσκηση 2.21.

2.22 Μελετήστε την κίνηση υλικού σημείου στο "μπιλιάρδο" του Σχήματος 2.28. Μετρήστε σε κάθε βολή πόσες κρούσεις έχετε μέχρι να πετύχετε μία "τρύπα". Το πρόγραμμα να σημειώνει σε ποια τρύπα μπήκε η μπίλια.

2.23 Προγραμματίστε την κίνηση ενός υλικού σημείου μέσα στο επίπεδο κουτί του Σχήματος 2.29. Στο κέντρο του υπάρχει κύκλος πάνω στον οποίο το υλικό σημείο σκεδάζεται ελαστικά (Υποδ.: Χρησιμοποιείστε την υπορουτίνα `reflectVonCircle` του προγράμματος `Cylinder3D.f`).



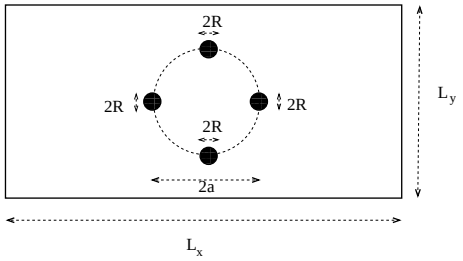
Σχήμα 2.28: Άσκηση 2.22.



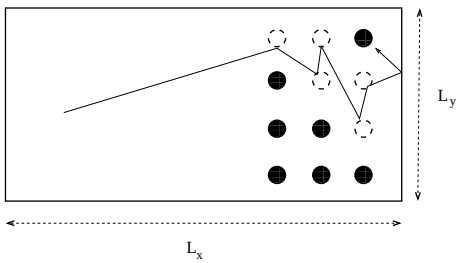
Σχήμα 2.29: Άσκηση 2.23.

2.24 Τοποθετήστε στο κουτί της προηγούμενης άσκησης 4 κύκλους πάνω στους οποίους θα ανακλάται το υλικό σημείο (Σχήμα 2.30).

2.25 Θεωρήστε τη διάταξη του Σχήματος 2.31. Κάθε φορά που το υλικό σημείο σκεδάζεται σε ένα κύκλο, ο κύκλος "εξαφανίζεται". Η κίνηση σταματάει όταν όλοι οι κύκλοι εξαφανιστούν. Κάθε φορά που το υλικό σημείο χτυπάει τον αριστερό τοίχο χάνετε ένα πόντο. Προσπαθήστε να διαλέξτε τροχιές που ελαχιστοποιούν τους χαμένους πόντους.



Σχήμα 2.30: Άσκηση 2.24.



Σχήμα 2.31: Άσκηση 2.25.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Κίνηση Σωματιδίου

Στο κεφάλαιο αυτό μελετάται αριθμητικά η επίλυση των κλασικών εξισώσεων κίνησης μονοδιάστατων μηχανικών συστημάτων, όπως λ.χ. αυτή του σημειακού σωματιδίου σε μια ευθεία, του απλού εκκρεμούς κλπ. Γίνεται εισαγωγή σε μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης διαφορικών εξισώσεων με αρχικές συνθήκες και ιδιαίτερα στη μέθοδο Runge–Kutta 4ης τάξης. Τέλος, μελετώνται τα συστήματα του αρμονικού ταλαντωτή και του απλού εκκρεμούς με απόσβεση και οδήγηση από εξωτερική χρονοεξαρτημένη δύναμη. Το τελευταίο σύστημα είναι μη γραμμικό και γίνεται μια εισαγωγή στις χαοτικές ιδιότητές του.

3.1 Αριθμητική Ολοκλήρωση Εξισώσεων Νεύτωνα

Το πρόβλημα της λύσης των εξισώσεων κίνησης σωματιδίου υπό την επίδραση δυνάμεων που δίνονται από το νόμο του Νεύτωνα μπορούν να γραφτούν υπό τη μορφή

$$\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = \vec{a}(t, \vec{x}, \vec{v})\,, \tag{3.1}$$

όπου

$$\vec{a}(t, \vec{x}, \vec{v}) \equiv \frac{\vec{F}}{m} \qquad \vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}\,. \tag{3.2}$$

Η κλάση των προβλημάτων που θα θεωρήσουμε είναι προβλήματα αρχικών τιμών, δηλ. δίνονται οι αρχικές συνθήκες

$$\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0 \qquad \vec{v}(t_0) = \vec{v}_0\,, \tag{3.3}$$

οι οποίες προσδιορίζουν μία μοναδική λύση $\vec{x}(t)$. Η διαφορικές εξισώσεις (3.1) είναι δεύτερης τάξης ως προς τις συναρτήσεις $\vec{x}(t)$. Για την αριθμητική λύση τους είναι βολικό να ανάγουμε τις εξισώσεις αυτές σε ένα σύστημα από διπλάσιο αριθμό εξισώσεων πρώτου βαθμού:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v} \qquad \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{a}(t, \vec{x}, \vec{v})\,. \tag{3.4}$$

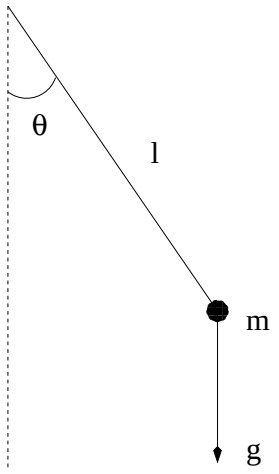
Ειδικά θα ενδιαφερθούμε για την κίνηση σωματιδίου πάνω στην ευθεία (1 διάσταση) και το επίπεδο (2 διαστάσεις) οπότε το σύστημα των εξισώσεων γίνεται

$$\frac{dx}{dt} = v \qquad \frac{dv}{dt} = a(t, x, v) \quad \text{1-διάσταση}\,, \tag{3.5}$$

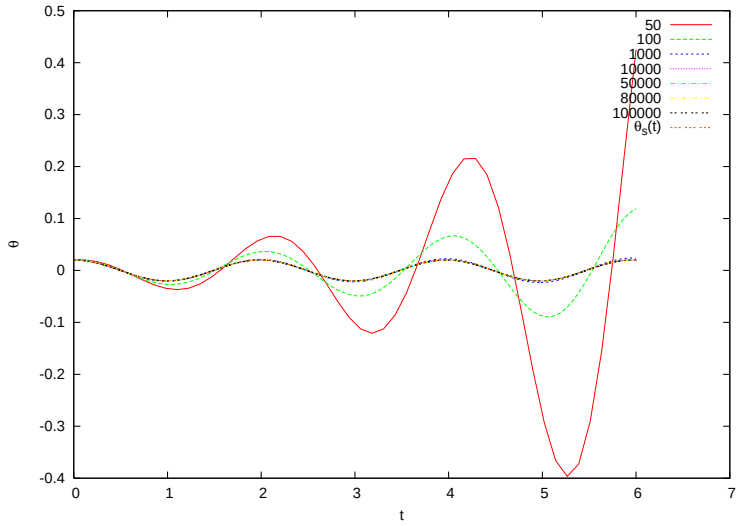
$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x & \frac{dv_x}{dt} &= a_x(t, x, v_x, y, v_y) \quad \text{2-διαστάσεις} \\ \frac{dy}{dt} &= v_y & \frac{dv_y}{dt} &= a_y(t, x, v_x, y, v_y)\,, \end{aligned} \tag{3.6}$$

3.2 Πρελούδιο: Μέθοδοι Euler

Για να πάρουμε μια πρώτη γεύση του προβλήματος θα μελετήσουμε το πρόβλημα του εκκρεμούς μήκους l μέσα σε ομογενές πεδίο βαρύτητας g (Σχήμα 3.1). Οι εξισώσεις κίνησης δίνονται από το σύστημα



Σχήμα 3.1: Το εκκρεμές μήκους l μέσα σε ομογενές πεδίο βαρύτητας g.



Σχήμα 3.2: Σύγκλιση της μεθόδου Euler για το απλό εκκρεμές με περίοδο $T \approx 1.987 (\omega^2 = 10.0)$ για διαφορετικές τιμές του βήματος χρόνου Δt που καθορίζεται από των αριθμό των βημάτων steps= $50 - 100,000$. Η λύση είναι για $\theta_0 = 0.2$, $\omega_0 = 0.0$ και συγκρίνεται με τη γνωστή λύση για μικρές γωνίες με $\alpha(t) \approx -(g/l)\,\theta$.

διαφορικών εξισώσεων

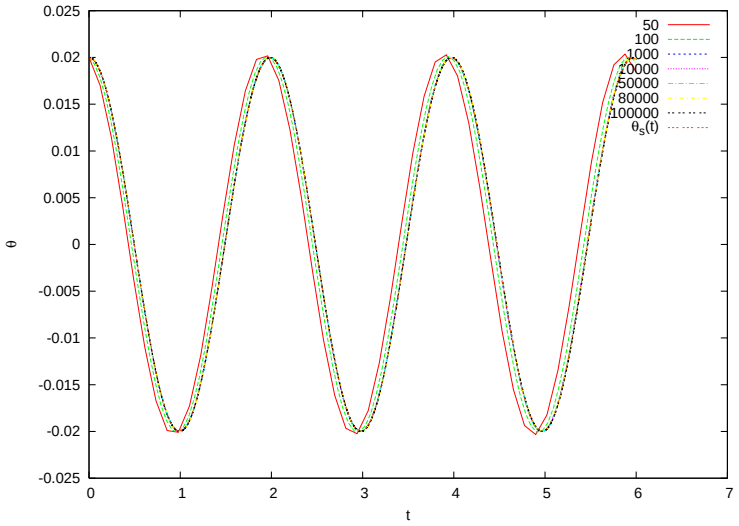
$$\begin{aligned} \frac{d^2\theta}{dt^2} &= -\frac{g}{l}\sin\theta \\ \frac{d\theta}{dt} &= \omega\,, \end{aligned} \tag{3.7}$$

που εύκολα ανάγεται στο σύστημα πρώτης τάξης

$$\begin{aligned} \frac{d\theta}{dt} &= \omega \\ \frac{d\omega}{dt} &= -\frac{g}{l}\sin\theta \qquad , \end{aligned} \tag{3.8}$$

Το παραπάνω σύστημα πρέπει να γραφτεί σε διακριτή μορφή έτσι ώστε να επιτευχθεί η αριθμητική του επίλυση με τη βοήθεια υπολογιστή. Ο πιο απλός τρόπος είναι να θεωρήσουμε την ολοκλήρωση του συστήματος από τον αρχικό χρόνο $t_0 = 0$ μέχρι τελικό χρόνο t_f χωρίζοντας το χρονικό διάστημα $t_f - t_0$ σε $N-1$ ίσα διαστήματα πλάτους[1] $\Delta t \equiv h$, όπου $h = (t_f - t_0)/(N-1)$ και προσεγγίζοντας τις παραγώγους από τις σχέσεις

[1] Εχουμε N διακριτούς χρόνους $t_0, t_1, \ldots, t_{N-2}, t_{N-1} \equiv t_f$

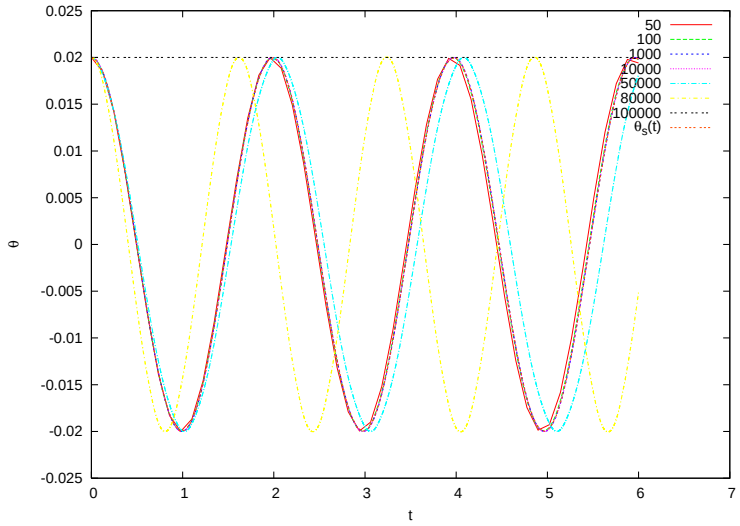


Σχήμα 3.3: Σύγκλιση της μεθόδου Euler-Cromer, παρόμοια με το Σχήμα 3.2. Παρατηρούμε πως η μέθοδος συγκλίνει πολύ γρηγορότερα από την Euler.

$(x_{n+1} - x_n)/\Delta t \approx x'_n$:

$$\begin{aligned} \omega_{n+1} &= \omega_n + \alpha_n \Delta t \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \omega_n \Delta t \,. \end{aligned} \tag{3.9}$$

όπου $\alpha = -(g/l)\sin\theta$ η γωνιακή επιτάχυνση. Η μέθοδος αυτή ακούει στο όνομα "μέθοδος Euler". Το σφάλμα που εισάγεται από τη μέθοδο σε κάθε βήμα είναι της τάξης του $(\Delta t)^2$. Πράγματι αυτό προκύπτει από απλή ανάπτυξη κατά Taylor γύρω από το σημείο t_n αγνοώντας όλους τους όρους από τη δεύτερη παράγωγο και πάνω. Κατά την ολοκλήρωση από t_0 σε t_f, το συνολικό σφάλμα είναι τάξης Δt! Ο λόγος είναι ότι τα σφάλματα αυτά προστίθενται σε κάθε βήμα και αφού ο αριθμός των βημάτων $N \sim 1/\Delta t$ το συνολικό σφάλμα είναι $\sim (\Delta t)^2 \times (1/\Delta t) = \Delta t$. Η μέθοδος Euler λέμε ότι είναι μια μέθοδος πρώτης τάξης και ως εκ τούτου έχει περιορισμένη ακρίβεια. Σαν να μην έφτανε αυτό η μέθοδος αυτή έχει προβλήματα ευστάθειας, ειδικά σε προβλήματα που παρουσιάζουν περιοδικότητα. Η μέθοδος είναι ασύμμετρη γιατί χρησιμοποιεί για την προώθηση της λύσης πληροφορία για τη συνάρτηση μόνο στην αρχή του διαστήματος $(t, t + \Delta t)$. Με μια απλή παραλλαγή παίρνουμε τη μέθοδο Euler–Cromer η οποία παρουσιάζει βελτιωμένη συμπεριφορά ως προς την ευστάθεια αν και αυτή είναι πρώτης τάξης με συνολικό σφάλμα $\sim \Delta t$. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούμε για την προώθηση της γωνίας



Σχήμα 3.4: Σύγκλιση της μεθόδου Euler-Verlet, παρόμοια με το Σχήμα 3.2. Παρατηρούμε πως η μέθοδος συγκλίνει πολύ γρηγορότερα από την Euler αλλά τα σφάλματα στρογγυλοποίησης κάνουν τη μέθοδο άχρηστη για steps$\gtrsim 50,000$ (προσέξτε τι γίνεται για steps$= 100,000$. Γιατί?).

θ την *καινούργια* τιμή της γωνιακής ταχύτητας

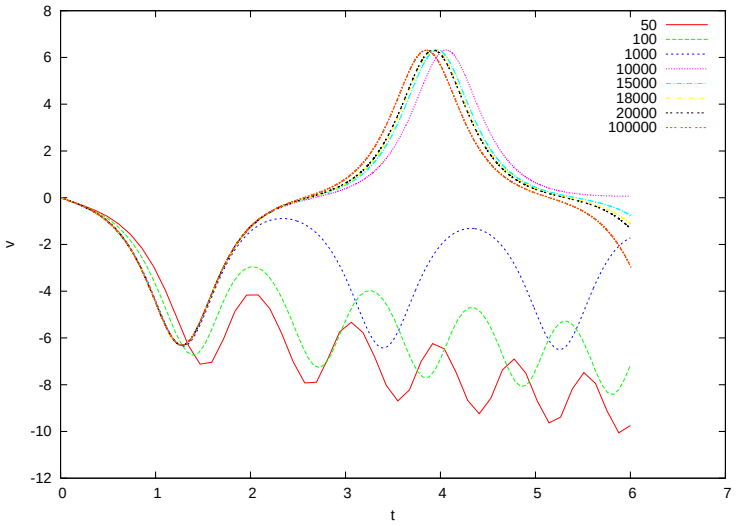
$$\begin{aligned} \omega_{n+1} &= \omega_n + \alpha_n \Delta t \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \omega_{n+1} \Delta t \,. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Μια μέθοδος που βελτιώνει τους παραπάνω αλγόριθμους ως προς το σφάλμα διακριτοποίησης είναι ο αλγόριθμος Euler–Verlet ο οποίος δίνει ολικό σφάλμα[2] $\sim (\Delta t)^2$. Αυτός δίνεται από τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \theta_{n+1} &= 2\theta_n - \theta_{n-1} + \alpha_n (\Delta t)^2 \\ \omega_n &= \frac{\theta_{n+1} - \theta_{n-1}}{2\Delta t} \,. \end{aligned} \tag{3.11}$$

Η μέθοδος Euler–Verlet (3.11) είναι μια μέθοδος δύο βημάτων, αφού για την προώθηση της λύσης είναι αναγκαίο να γνωρίζουμε την τιμή της συνάρτησης σε δύο προηγούμενα βήματα. Άρα πρέπει να καθορίσουμε προσεκτικά τις αρχικές συνθήκες για τα δύο πρώτα βήματα. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούμε τον αλγόριθμο Euler για να προωθήσουμε τις αρχικές συνθήκες ένα βήμα *πίσω*. Αν $\theta_1 = \theta(t_0)$, $\omega_1 = \omega(t_0)$ είναι οι

[2]Δείτε το Παράρτημα 3.7 για τις λεπτομέρειες.



Σχήμα 3.5: Σύγκλιση της μεθόδου Euler για το απλό εκκρεμές παρόμοια με το Σχήμα 3.2 αλλά για $\theta_0 = 3.0$, $\omega_0 = 0.0$. Εδώ δείχνουμε τη συμπεριφορά της γωνιακής ταχυτήτας και παρατηρούμε μεγάλη αστάθεια για $\texttt{steps} \lesssim 1,000$.

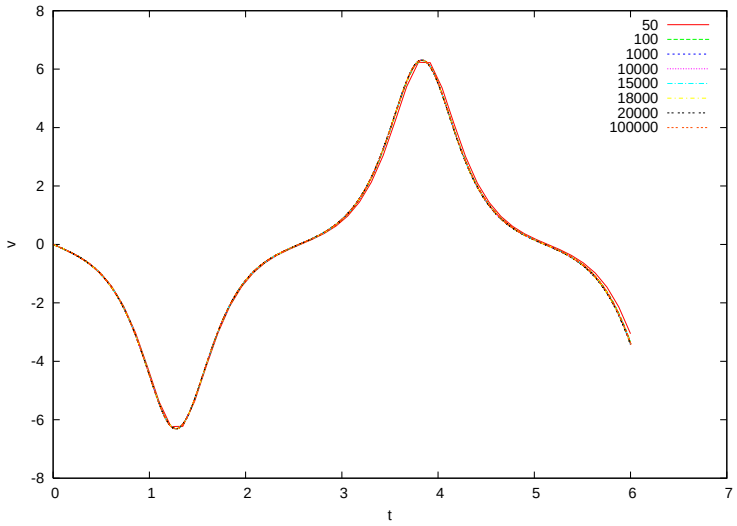
αρχικές συνθήκες, τότε ορίζουμε

$$\theta_0 = \theta_1 - \omega_1 \Delta t + \frac{1}{2}\alpha_1 (\Delta t)^2 \,. \tag{3.12}$$

Επίσης στο τελευταίο βήμα θα πρέπει να πάρουμε

$$\omega_N = \frac{\theta_N - \theta_{N-1}}{\Delta t} \,. \tag{3.13}$$

Παρόλο που η μέθοδος έχει μικρότερο συνολικό σφάλμα από τη μέθοδο Euler, το πρόβλημά της είναι ότι παρουσιάζεται ασταθής. Στη δεύτερη των εξισώσεων (3.11) η γωνιακή ταχύτητα προκύπτει από το λόγο δύο μικρών αριθμών, εκ των οποίων ο παρονομαστής είναι η διαφορά δύο μεγάλων αριθμών. Για μικρό χρόνο Δt, η πληροφορία βρίσκεται αρκετά δεκαδικά ψηφία πέρα από τα αρχικά και αφού ο υπολογιστής έχει πεπερασμένη ακρίβεια σε κάποια στιγμή η ακρίβεια της πληροφορίας γίνεται πολύ μικρή ή και χάνεται τελείως. Στην πρώτη των εξισώσεων (3.11) , ο όρος $\alpha_n \Delta t^2$ είναι κατά μία τάξη ως προς Δt μικρότερος από τον αντίστοιχο όρο $\alpha_n \Delta t$ της μεθόδου Euler. Μειώνοντας το Δt, γρήγορα έχουμε $\alpha_n \Delta t^2 \ll 2\theta_n - \theta_{n-1}$ και η ακρίβεια της μεθόδου εκμηδενίζεται λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας των πραγματικών αριθμών στη μνήμη του υπολογιστή.

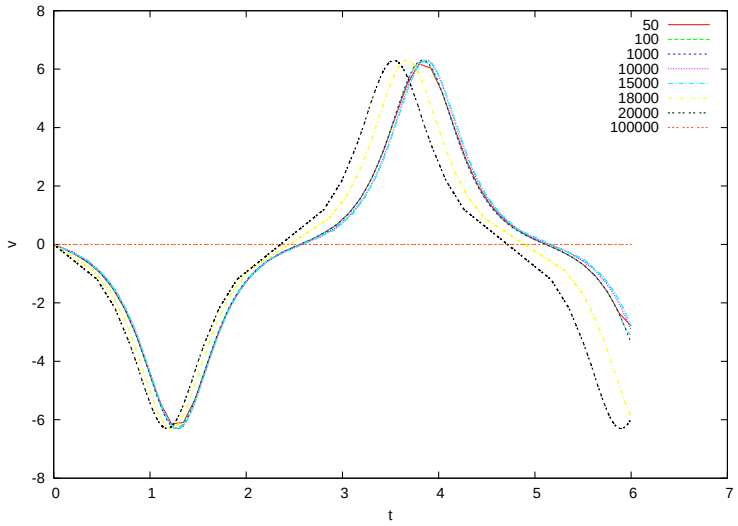


Σχήμα 3.6: Σύγκλιση της μεθόδου Euler-Cromer, παρόμοια με το Σχήμα 3.5. Παρατηρούμε πως η μέθοδος συγκλίνει πολύ γρηγορότερα από την Euler.

Ο προγραμματισμός των μεθόδων αυτών είναι ιδιαίτερα απλός. Γράφουμε ένα πρόγραμμα που θα κάνει σύγκριση και των τρίων μεθόδων, Euler, Euler-Cromer και Euler-Verlet. Για το λόγο αυτό το κυρίως πρόγραμμα είναι απλά ένα interface με το χρήστη και για τους υπολογισμούς καλούνται διαφορετικές υπορουτίνες `euler`, `euler_cromer` και `euler_verlet`. Ο χρήστης απλά πρέπει να προγραμματίσει την κοινή σε όλους του υπολογισμούς συνάρτηση `accel(x)` που δίνει τη γωνιακή επιτάχυνση συναρτήσει της γωνίας θ (εδώ η μεταβλητή `REAL x`). Στην παράγραφο αυτή παίρνουμε `accel(x)= -10.0 * sin(x)`.

Η δομή των δεδομένων είναι πολύ απλή: Σε τρία arrays `REAL T(P)`, `X(P)` και `V(P)` αποθηκεύονται αντίστοιχα οι χρόνοι t_n, γωνιακές θέσεις θ_n και γωνιακές ταχύτητες ω_n για $n = 1, \ldots,$ `steps`. Ο χρήστης προσδιορίζει το χρονικό διάστημα της ολοκλήρωσης από $t_i = 0$ σε $t_f =$ `Tfi` καθώς και τον αριθμό των βημάτων ολοκλήρωσης `steps` τα οποία πρέπει να είναι λιγότερα από το μέγεθος `P` των arrays. Δίνει τις αρχικές συνθήκες $\theta_0 =$ `Xin` και $\omega_0 =$ `Vin`. Στη συνέχεια οι υπορουτίνες των μεθόδων καλούνται και στην είσοδο τους παρέχουμε τις αρχικές συνθήκες, διάστημα ολοκλήρωσης και αριθμό βημάτων `Xin,Vin,Tfi,steps` ενώ στην έξοδο μας παρέχουν τα αποτελέσματα αποθηκευμένα στα arrays `T,X,V`. Στη συνέχεια τα αποτελέσματα τυπώνονται στα αρχεία `euler.dat`, `euler_cromer.dat` και `euler_verlet.dat`.

Οι υπορουτίνες υπολογισμού ακολουθούν τη διαδικασία καθορισμού



Σχήμα 3.7: Σύγκλιση της μεθόδου Euler-Verlet, παρόμοια με το Σχήμα 3.5. Παρατηρούμε πως η μέθοδος συγκλίνει πολύ γρηγορότερα από την Euler αλλά τα σφάλματα στρογγυλοποίησης κάνουν τη μέθοδο πολύ γρήγορα ασταθή για steps$\gtrsim 18,000$.

των αρχικών συνθηκών, υπολογισμού του χρόνου $\Delta t \equiv \mathtt{h} = \mathtt{Tfi}/(\mathtt{steps}-1)$ και εκτελούν τους βρόχους που θα προωθούν τη λύση με βήμα Δt. Σε κάθε βήμα τα αποτελέσματα αποθηκέυονται στα arrays `T,X,V`. Έτσι το απλό τμήμα του κώδικα

```
T(1) = 0.0
X(1) = Xin
V(1) = Vin
h    = Tfi/(steps-1)
do i = 2,steps
 T(i) = T(i-1)+h
 X(i) = X(i-1)+V(i-1)*h
 V(i) = V(i-1)+accel(X(i-1))*h
enddo
```

εκτελεί τις απαραίτητες εντολές για τη μέθοδο Euler. Λίγη προσοχή πρέπει να δοθεί στη μέθοδο Euler-Verlet όπου πρέπει να καθοριστούν τα δύο πρώτα βήματα, καθώς και το τελευταίο για την ταχύτητα:

```
T(1)    = 0.0
X(1)    = Xin
V(1)    = Vin
X0      =     X(1)   - V(1) * h + accel(X(1))  *h*h/2.0
```

```
      T(2)    = h
      X(2)    = 2.0*X(1)   - X0       + accel(X(1))  *h*h
      do i    = 3,steps
      ..............
      enddo
      V(steps)= (X(steps)-X(steps-1))/h
```

Για διευκόλυνση του αναγνώστη παραθέτουμε ολόκληρο το πρόγραμμα παρακάτω:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to integrate equations of motion for accelerations
C    which are functions of x with the method of Euler, Euler-Cromer
C     and Euler-Verlet.
C     The user sets initial conditions and the subroutines return
C    X(t) and V(t)=dX(t)/dt in arrays T(1..STEPS),X(1..STEPS),V(1..STEPS)
C     The user provides number of integration STEPS and the final
C    time TFI.Initial time is assumed to be t_0=0 and the integration
C     step h = TFI/(STEPS-1)
C     The user programs a real function accel(x) which gives the
C     acceleration  dV(t)/dt as function of X.
C    NOTE: T(1) = 0 T(STEPS) = TFI and there are STEPS-1 aditional
C           steps after the initial point
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program diff_eq_euler
     implicit none         ! We force ourselved to declare all variables
     integer P            ! The size of the arrays, should be larger
      parameter(P=110000)       ! than number of steps
      real T(P),X(P),V(P)       ! time t,x(t),v(t)=dx/dt
      real Xin,Vin,Tfi          ! initial conditions
      integer steps,i
      !t_0 = 0.0

C    The user provides initial conditions X_0,V_0 final time t_f and
C     number of steps:
      print *,'Enter X_0,V_0,t_f,number of steps (t_0=0):'
      read(5,*)Xin,Vin,Tfi,steps
C     This check is necessary to avoid memory violations:
      if(steps .ge. P )then
     print *,'steps must be strictly less than P. steps,P= ',steps,P
       stop
```

```
      endif

C    Xin= X(1), Vin=V(1), T(1)=0 and the routine gives evolution in
C    T(2..STEPS), X(2..STEPS), V(2..STEPS) which we print in a file
      call euler(Xin,Vin,Tfi,steps,T,X,V)
     open(unit=20,file="euler.dat") !filename euler.dat given here
      do i=1,steps
C     Each line in data file has time, position, velocity:
       write(20,*) T(i),X(i),V(i)
      enddo
      close(20) !we close the unit to be reused below

C     We repeat everything for each method
      call euler_cromer(Xin,Vin,Tfi,steps,T,X,V)
      open(unit=20,file="euler_cromer.dat")
      do i=1,steps
       write(20,*) T(i),X(i),V(i)
      enddo
      close(20)

      call euler_verlet(Xin,Vin,Tfi,steps,T,X,V)
      open(unit=20,file="euler_verlet.dat")
      do i=1,steps
       write(20,*) T(i),X(i),V(i)
      enddo
      close(20)

      end


C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Function which returns the value of acceleration at
C     position x used in the integration subroutines
C     euler, euler_cromer and euler_verlet
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      real function accel(x)
      implicit none
      real x
      accel = -10.0*sin(x)
      end
```

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Driver routine for integrating equations of motion
C     using the Euler method
C     Input:
C     Xin=X(1), Vin=V(1) -- initial condition at t=0,
C    Tfi the final time and steps the number of steps of integration
C     (the initial point is counted as the first one)
C     Output:
C     The arrays T(1..steps), X(1..steps), V(1..steps) which
C     gives x(t_i)=X(i), dx/dt(t_i)=V(i), t_i=T(i) i=1..steps
C     where for i=1 we have the initial condition.
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine euler(Xin,Vin,Tfi,steps,T,X,V)
      implicit none
      integer P
      parameter(P=110000)
      real T(P),X(P),V(P) !time t,x(t),v(t)=dx/dt
      real Xin,Vin,Tfi
      integer steps,i
     real h,accel    !**Note: we have to declare the function accel**
C     Initial conditions set here:
      T(1) = 0.0
      X(1) = Xin
      V(1) = Vin
C     h is the time step Dt
      h    = Tfi/(steps-1)
      do i = 2,steps
       T(i) = T(i-1)+h          ! time advances by Dt
     X(i) = X(i-1)+V(i-1)*h  ! advancement and storage of position
     V(i) = V(i-1)+accel(X(i-1))*h !... and velocity. Here we call accel(x)
      enddo

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Driver routine for integrating equations of motion
C     using the Euler-Cromer method
C     Input:
C     Xin=X(1), Vin=V(1) -- initial condition at t=0,
C    Tfi the final time and steps the number of steps of integration
C     (the initial point is counted as the first one)
```

```
C     Output:
C     The arrays T(1..steps), X(1..steps), V(1..steps) which
C     gives x(t_i)=X(i), dx/dt(t_i)=V(i), t_i=T(i) i=1..steps
C     where for i=1 we have the initial condition.
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine euler_cromer(Xin,Vin,Tfi,steps,T,X,V)
      implicit none
      integer P
      parameter(P=110000)
      real T(P),X(P),V(P) !time t,x(t),v(t)=dx/dt
      real Xin,Vin,Tfi
      integer steps,i
      real h,accel

      T(1) = 0.0
      X(1) = Xin
      V(1) = Vin
      h    = Tfi/(steps-1)
      do i = 2,steps
       T(i) = T(i-1)+h
       V(i) = V(i-1)+accel(X(i-1))*h
     X(i) = X(i-1)+V(i)*h  !here is the difference compared to Euler
      enddo

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Driver routine for integrating equations of motion
C     using the Euler - Verlet method
C     Input:
C     Xin=X(1), Vin=V(1) -- initial condition at t=0,
C    Tfi the final time and steps the number of steps of integration
C     (the initial point is counted as the first one)
C     Output:
C     The arrays T(1..steps), X(1..steps), V(1..steps) which
C     gives x(t_i)=X(i), dx/dt(t_i)=V(i), t_i=T(i) i=1..steps
C     where for i=1 we have the initial condition.
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine euler_verlet(Xin,Vin,Tfi,steps,T,X,V)
      implicit none
      integer P
```

```
      parameter(P=110000)
      real T(P),X(P),V(P) !time t,x(t),v(t)=dx/dt
      real Xin,Vin,Tfi
      integer steps,i
      real h,g_over_l
      parameter(g_over_l=10.0)
      real h2,X0,o2h
      real accel

C     Initial conditions set here:
      T(1)    = 0.0
      X(1)    = Xin
      V(1)    = Vin
      h       = Tfi/(steps-1)   ! time step
      h2      = h*h             ! time step squared
      o2h     = 0.5/h           ! h/2
C    We have to initialize one more step: X0 corresponds to 'X(0)'
      X0      =     X(1)   - V(1) * h + accel(X(1))  *h2/2.0
      T(2)    = h
      X(2)    = 2.0*X(1)   - X0       + accel(X(1))  *h2
C     Now i starts from 3:
      do i    = 3,steps
       T(i)   = T(i-1)+h
       X(i)   = 2.0*X(i-1) - X(i-2)   + accel(X(i-1))*h2
       V(i-1) = o2h * (X(i)-X(i-2))
      enddo
C     Notice that we have one more step for the velocity:
      V(steps)= (X(steps)-X(steps-1))/h

      end
```

Η μεταγλώττιση και το τρέξιμο του προγράμματος γίνονται πολύ απλά με τις εντολές:

```
> f77 euler.f -o euler
> ./euler
 Enter X_0,V_0,t_f,number of steps (t_0=0):
0.2 0.0 6.0 1000
> ls  euler*.dat
euler_cromer.dat  euler.dat  euler_verlet.dat
> head -n 5 euler.dat
```

```
 0.000000      0.2000000       0.000000
6.0060062E-03  0.2000000      -1.1932093E-02
1.2012012E-02  0.1999283      -2.3864185E-02
1.8018018E-02  0.1997850      -3.5792060E-02
2.4024025E-02  0.1995700      -4.7711499E-02
```

Η τελευταία εντολή μας δείχνει τις 5 πρώτες γραμμές του αρχείου `euler.dat` όπου βλέπουμε τις 3 στήλες με το χρόνο, θέση και ταχύτητα που δίνει η μέθοδος. Για να δούμε γραφικά τα αποτελέσματα μπορούμε να χρησιμοποιοήσουμε το πρόγραμμα `gnuplot`[3]:

```
> gnuplot
        G N U P L O T
        Version 4.0 patchlevel 0
        last modified Thu Apr 15 14:44:22 CEST 2004
.....
gnuplot> plot "euler.dat" using 1:2 with lines
gnuplot> plot "euler.dat" using 1:3 with lines
```

κάνει απλές γραφικές παραστάσεις των θέσεων και ταχυτήτων αντίστοιχα συναρτήσει του χρόνου. Στην τελευταία μπορούμε να προσθέσουμε και τα αποτελέσματα των άλλων μεθόδων δίνοντας στη συνέχεια τις εντολές:

```
gnuplot> replot "euler_cromer.dat" using 1:3 with lines
gnuplot> replot "euler_verlet.dat" using 1:3 with lines
```

Τα αποτελέσματα φαίνονται στα Σχήματα 3.2–3.7. Παρατηρούμε ότι η μέθοδος Euler είναι ασταθής εκτός αν πάρουμε το βήμα χρόνου πάρα πολύ μικρό. Η μέθοδος Euler–Verlet έχει πολύ καλύτερη συμπεριφορά. Τα αποτελέσματα συγκλίνουν γρήγορα και παραμένουν σταθερά και για μεγάλο αριθμό βημάτων `steps`$\sim 100,000$. Η μέθοδος Euler–Verlet συγκλίνει γρήγορα αλλά σύντομα παρατηρούμε τα σφάλματα συσσώρευσης γίνονται φανερά εξαιτίας της Σχέσης (3.11) . Το φαινόμενο αυτό είναι εντονότερο για αρχικές συνθήκες με μεγάλη αρχική γωνιακή απόκλιση, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.7. Στα Σχήματα 3.2–3.4. όπου η αρχική γωνιακή απόκλιση είναι μικρή, συγκρίνουμε τη λύση που παίρνουμε με τη λύση για το αρμονικό εκκρεμές ($\sin(\theta) \approx \theta$):

$$\begin{aligned} \alpha(\theta) &= -\frac{g}{l}\,\theta \equiv -\Omega^2\,\theta \\ \theta(t) &= \theta_0 \cos(\Omega t) + (\omega_0/\Omega)\sin(\Omega t) \\ \omega(t) &= \omega_0 \cos(\Omega t) - (\theta_0\Omega)\sin(\Omega t)\,, \end{aligned} \tag{3.14}$$

[3] `www.gnuplot.info`

όπου παρατηρούμε ταύτιση για τις τιμές του Δt που οι μέθοδοι συγκλίνουν. Με τον τρόπο αυτό ελέγχουμε τον κώδικα για πιθανά σφάλματα και για την ορθότητα των αποτελεσμάτων. Για το γράφημα των παραπάνω συναρτήσεων μπορούμε να δώσουμε τις παρακάτων εντολές στο πρόγραμμα gnuplot:

```
gnuplot> set dummy t #makes t the independent variable in functions
gnuplot> omega2  = 10
gnuplot> X0      = 0.2
gnuplot> V0      = 0.0
gnuplot> omega   = sqrt(omega2)
gnuplot> x(t)    = X0 * cos(omega * t) +(V0/omega)*sin(omega*t)
gnuplot> v(t)    = V0 * cos(omega * t) -(omega*X0)*sin(omega*t)
gnuplot> plot x(t), v(t)
```

Η σύγκριση των αποτελεσμάτων με τα θεωρητικά, ιδιαίτερα όταν οι διαφορές δεν διακρίνονται με γυμνό μάτι ή όταν η ποσοτική ανάλυση είναι επιθυμητή, μπορεί να γίνει αναπαριστώντας γραφικά τις διαφορές των υπολογισθέντων από τις θεωρητικές τιμές. Οι σχετικές γραφικές παραστάσεις γίνονται με τις εντολές:

```
gnuplot> plot "euler.dat" using 1:($2-x($1)) with lines
gnuplot> plot "euler.dat" using 1:($3-v($1)) with lines
```

Οι εντολή `using 1:($2-x($1))` σε απλά ελληνικά λέει "Κάνε τη γραφική παράσταση χρησιμοποιώντας στο άξονα των y την τιμή της 2ης στήλης του `euler.dat` μείον την τιμή της συνάρτησης `x(t)` για `t` ίσο με την αντίστοιχη τιμή της πρώτης στήλης". Με τον τρόπο αυτό (και με μικρή μετατροπή για να υπολογίζουμε την απόλυτη τιμή της διαφοράς) φτιάχνουμε τα Σχήματα 3.11-3.14.

3.3 Μέθοδοι Runge–Kutta

Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε μία μέθοδο πεπερασμένων διαφορών ενός βήματος πρώτης τάξης, τη μέθοδο Euler. Αυτό σημαίνει πως όταν προσεγγίζουμε την ολοκλήρωση με N διακριτά βήματα από χρόνο t_i σε χρόνο t_f με βήμα $\Delta t \equiv h = (t_f - t_0)/N$ το σφάλμα διακριτοποίησης είναι τάξης $\sim \mathcal{O}(h)$. Γεννάται το ερώτημα αν είναι δυνατόν να βρεθεί αλγόριθμος ολοκλήρωσης ο οποίος να κάνει τα σφάλματα να είναι ανώτερης τάξης. Μια κλάση τέτοιων μεθόδων είναι οι μέθοδοι Runge–Kutta. Οι μέθοδοι αυτοί είναι επαγωγικοί ενός βήματος, δηλ. η

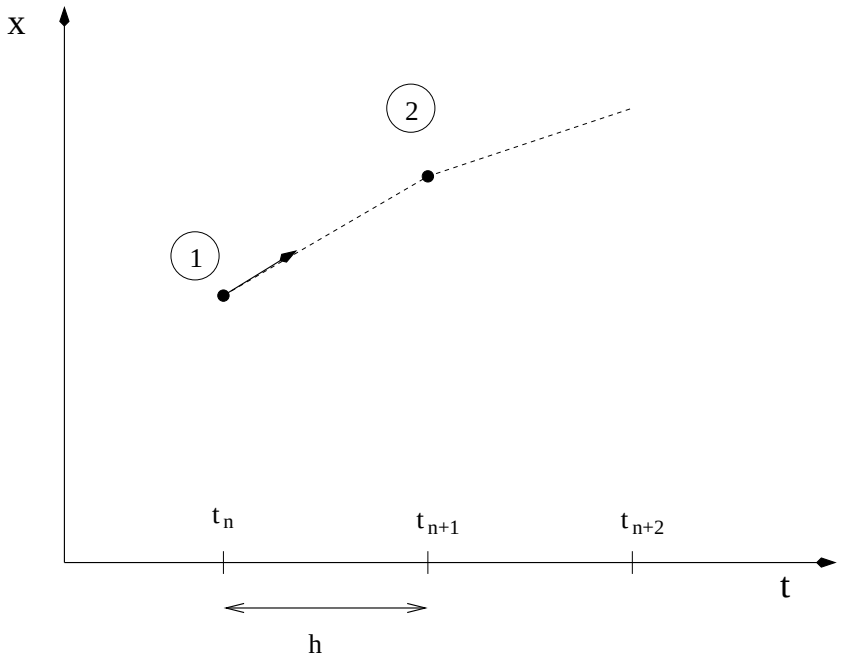
επόμενη θέση προκύπτει απλά από τη γνώση της προηγούμενης. Αυτό είναι σε αντίθεση με μεθόδους δύο ή πολλαπλών βημάτων όπως η μέθοδος Euler–Verlet όπου η γνώση της επόμενης θέσης απαιτεί να γνωρίζουμε τη θέση του σωματιδίου για δύο προηγούμενα βήματα. Η μέθοδος Runge–Kutta τάξης p έχει σφάλμα $\sim \mathcal{O}(h^p)$. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε βήμα εισάγεται σφάλμα διακριτοποίησης τάξης $\sim \mathcal{O}(h^{p+1})$ αφού τότε το σφάλμα μετα από $N = (t_f - t_0)/\Delta t$ βήματα θα είναι τάξης

$$\sim \mathcal{O}(h^{p+1}) \times N = \mathcal{O}(h^{p+1}) \times \frac{t_f - t_0}{\Delta t} \sim \mathcal{O}(h^{p+1}) \times \frac{1}{h} = \mathcal{O}(h^p)\,. \qquad (3.15)$$

Ας θεωρήσουμε για απλότητα το πρόβλημα με μια άγνωστη συνάρτηση $x(t)$ η οποία εξελίσεται στο χρόνο σύμφωνα με τη διαφορική εξίσωση:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x)\,. \qquad (3.16)$$

Ας δούμε πρώτα μία μέθοδο πρώτης τάξης. Η πιό αφελής προσέγ-



Σχήμα 3.8: Η γεωμετρία του βήματος της μεθόδου 1ης τάξης που δίνεται από την Εξίσωση (3.17) .

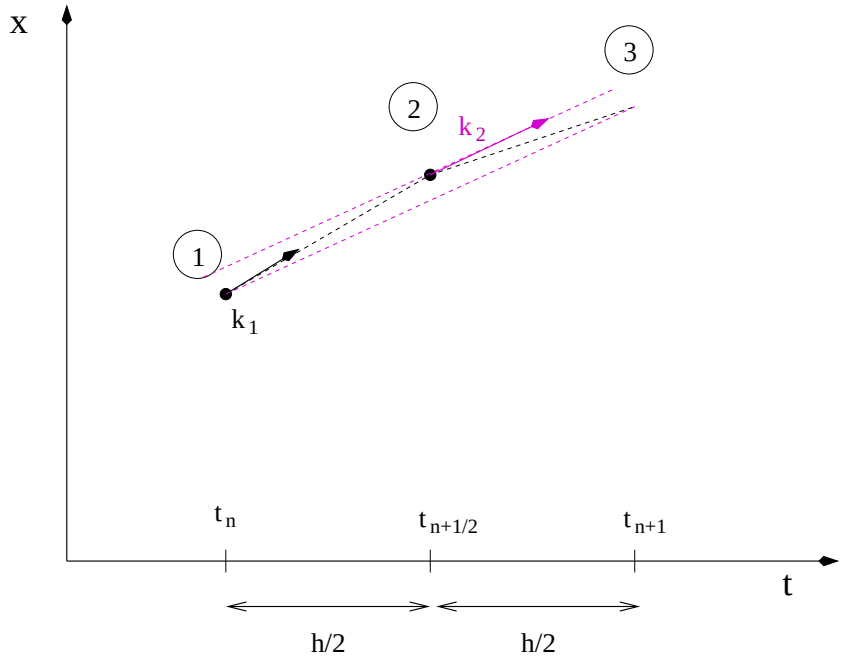
γιση θα ήταν να πάρουμε την παράγωγο να μας δίνει την πεπερασμένη διαφορά, δηλ.

$$\frac{dx}{dt} \approx \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} = f(t_n, x_n) \Rightarrow x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n) \qquad (3.17)$$

Αναπτύσσοντας κατά Taylor βλέπουμε ότι το σφάλμα σε κάθε βήμα είναι $\mathcal{O}(h^2)$, άρα το σφάλμα για την εξέλιξη από $t_i \to t_f$ είναι $\mathcal{O}(h)$. Πράγματι

$$x_{n+1} = x(t_n+h) = x_n + h\frac{dx}{dt}(x_n) + \mathcal{O}(h^2) = x_n + hf(t_n, x_n) + \mathcal{O}(h^2)\,. \quad (3.18)$$

Η γεωμετρία του βήματος φαίνεται στο Σχήμα 3.8. Επιλέγεται το σημείο 1 και από εκεί με γραμμική επέκταση στην κατεύθυνση της παραγώγου $k_1 \equiv f(t_n, x_n)$ προσδιορίζουμε το σημείο x_{n+1}.



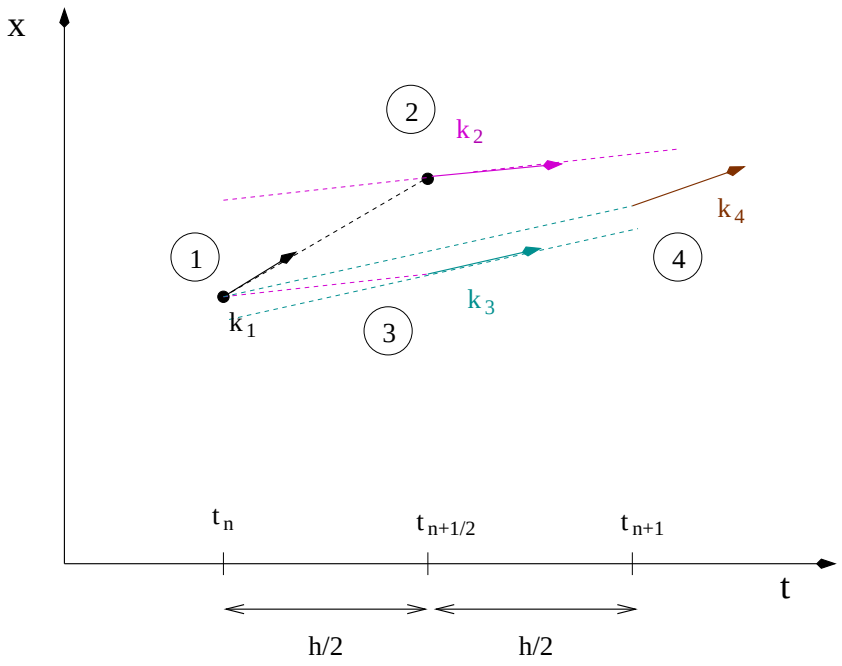
Σχήμα 3.9: Η γεωμετρία του βήματος της μεθόδου 2ης τάξης που δίνεται από την Εξίσωση (3.19) .

Βελτίωση της μεθόδου προκύπτει αν πάρουμε ένα ενδιάμεσο σημείο 2. Αυτη η διαδικασία φαίνεται στο Σχήμα 3.9 και έγκειται στο να πάρουμε το ενδιάμεσο σημείο 2 στο μέσο του διαστήματος (t_n, t_{n+1}) με γραμμική προέκταση από το x_n χρησιμοποιώντας την κλίση που δίνεται από την παράγωγο στο x_n $k_1 \equiv f(t_n, x_n)$. Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε ως εκτιμητή της παραγώγου στο διάστημα αυτό την κλίση στο σημείο 2 δηλ. $k_2 \equiv f(t_{n+1/2}, x_{n+1/2}) = f(t_n + h/2, x_n + (h/2)k_1)$ και τη χρησιμοποιούμε για να προεκτείνουμε γραμμικά από το x_n στο x_{n+1}.

Συνοψίζοντας έχουμε

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, x_n) \\ k_2 &\equiv f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2} k_1) \\ x_{n+1} &= x_n + h k_2 \,. \end{aligned} \tag{3.19}$$

Αυτό που θα δείξουμε είναι ότι παρόλο που χρειάζεται να υπολογίσουμε τη συνάρτηση f δύο φορές σε κάθε βήμα, διπλασιάζοντας ουσιαστικά τον υπολογιστικό χρόνο, το σφάλμα στο βήμα (3.19) είναι $\mathcal{O}(h^3)$ άρα το συνολικό σφάλμα είναι $\mathcal{O}(h^2)$, οπότε αναγκαστικά η (3.19) θα υπερτερήσει της (3.17) σε ακρίβεια ακόμα και αν συγκριθούν σε δεδομένο υπολογιστικό χρόνο, δηλ. η (3.19) σε βήμα h και η (3.17) σε $h/2$.[4]



Σχήμα 3.10: Η γεωμετρία του βήματος της μεθόδου 4ης τάξης που δίνεται από την Εξίσωση (3.20) .

Η βελτίωση γίνεται περισσότερο αισθητή με τη μέθοδο Runge–Kutta 4ης τάξης. Στην περίπτωση αυτή έχουμε 4 υπολογισμούς τη συνάρτησης f αλλά το συνολικό σφάλμα είναι τώρα $\mathcal{O}(h^4)$, οπότε για τους ίδιους

[4] Όπως φαίνεται στην πράξη, η (3.17) πάσχει και από προβλήματα σταθερότητας περισσότερο από την (3.19) οπότε συνίσταται να απογεύγεται.

λόγους η μέθοδος θα υπερτερήσει τελικά σε ακρίβεια της (3.19) [5]. Η διαδικασία που θα ακολουθήσουμε εξηγήται γεωμετρικά στο Σχήμα 3.10. Χρησιμοποιούμε τώρα 3 ενδιάμεσα σημεία για την προώθηση από το x_n στο x_{n+1}. Αρχικά χρησιμοποιώντας την κλίση που δίνεται από την παράγωγο στο x_n $k_1 \equiv f(t_n, x_n)$, βρίσκουμε το ενδιάμεσο σημείο 2 στο μέσο του διαστήματος $(t_n, t_{n+1} = t_n + h)$ δηλ. $x_2 = x_n + (h/2)k_1$. Υπολογίζουμε την παράγωγο της συνάρτησης στο σημείο 2 δηλ. $k_2 \equiv f(t_n + h/2, x_n + (h/2)k_1)$ και τη χρησιμοποιούμε για να προεκτείνουμε γραμμικά από το x_n στο ενδιάμεσο σημείο 3, πάλι στο μέσο του διαστήματος (t_n, t_{n+1}), δηλ. $x_3 = x_n + (h/2)k_2$. Υπολογίζουμε την παράγωγο της συνάρτησης $k_3 \equiv f(t_n + h/2, x_n + (h/2)k_2)$ και τη χρησιμοποιούμε για να προεκτείνουμε προς το σημείο 4, το οποίο τώρα το παίρνουμε στο άκρο του διαστήματος δηλ. με $t_4 = t_n + h$, οπότε παίρνουμε $x_4 = x_n + hk_3$. Κάνουμε ένα τέταρτο υπολογισμό της παραγώγου $k_4 \equiv f(t_n + h, x_n + hk_3)$ και χρησιμοποιούμε και τις 4 παραγώγους k_1, k_2, k_3 και k_4 ως εκτιμητές της παραγώγου της συνάρτησης. Εκείνο που έδειξαν οι Runge–Kutta είναι ότι το σφάλμα διακριτοποιήσης σε κάθε βήμα στην προώθηση της συνάρτησης γίνεται $\mathcal{O}(h^5)$ αν πάρουμε:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, x_n) \\ k_2 &= f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}\, k_1) \\ k_3 &= f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}\, k_2) \\ k_4 &= f(t_n + h, x_n + h\, k_3) \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\,. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Ο δεύτερος όρος στην τελευταία εξίσωση είναι ένας μέσος όρος των 4 παραγώγων με το κατάλληλο βάρος ώστε να πετύχουμε την εξουδετέρωση των σφαλμάτων μέχρι τάξης h^5.

Τέλος θα κλείσουμε συζητώντας μία απορία που πιθανώς θα έχει δημιουργθεί στον αναγνώστη: Συζητήσαμε πώς είναι δυνατόν κανείς να μειώσει τα σφάλματα διακριτοποίησης χρησιμοποιώντας αλγόριθμους των οποίων τα σφάλματα αυτά μειώνονται κατα το δυνατόν γρηγορότερα με το βήμα στο χρόνο h, συνήθως σαν $\sim h^p$. Άρα μπορεί κανείς να υποθέσει ότι CPU χρόνου επιτρέποντος -το οποίο δεν αποτελεί σοβαρό εμπόδιο στις απλές περιπτώσεις- μπορούμε να πλησιάσουμε αυθαίρετα κοντά στην αναλυτική λύση σε επίπεδο ακρίβειας μηχανής. Αυτό όμως

[5] Πάντα? Χμμμμ, όχι πάντα! Μεγαλύτερης τάξης δεν σημαίνει αναγκαστικά και μεγαλύτερης ακρίβειας αν και τις περισσότερες φορές αυτό είναι σωστό.

δεν είναι σωστό. Μια άλλη κατηγορία σφαλμάτων είναι τα σφάλματα στρογγυλοποίησης τα οποία προστίθενται σε κάθε βήμα εφαρμογής της μεθόδου. Αυτά συσσωρεύονται ανάλογα με τον αριθμό των βημάτων, οπότε για πολύ μικρό h, άρα και πολύ μεγάλο αριθμό βημάτων, αυτά θα γίνουν μεγαλύτερα από την επιθυμητή ακρίβεια. Αυτή η κατηγορία σφαλμάτων εξαρτάται από το hardware, τη γλώσσα προγραμματισμού ή/και το μεταγλωττιστή και τέλος από τον αλγόριθμο. Για το τελευταίο ας δώσουμε ένα παράδειγμα: Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε την παράγωγο μιάς συνάρτησης από τη σχέση

$$f'(t) = \frac{f(t+h) - f(t)}{h},$$

παίρνοτας το h αυθαίρετα μικρό. Αν υποθέσουμε ότι η παράγωγος και οι τιμές της συνάρτησης είναι πεπερασμένοι αριθμοί $\sim \mathcal{O}(1)$, τότε ο αριθμητής θα πρέπει να είναι $\sim \mathcal{O}(h)$. Όταν το h γίνει της τάξης της ακρίβειας των `REAL` (ή των `REAL*8` κλπ) τότε ο αριθμητής που είναι η διαφορά δύο αριθμών περίπου ίσων και της τάξης της μονάδας θα αρχίσει να χάνει σημαντικά σε ακρίβεια σε σχέση με την πραγματική τιμή μέχρι που θα είναι ένας άχρηστος αριθμός. Αυτό συμβαίνει γενικά όταν αφαιρούμε αριθμούς περίπου ίσους ή όταν προσθέτουμε αριθμούς που η τάξη μεγέθους τους διαφέρει περισσότερο από την ακρίβεια του υπολογιστή. Άρα και όταν χρησιμοποιούμε τη σχέση

$$x_{n+1} = x_n + h\mathcal{O}(x_n)$$

για πολύ μικρό βήμα h και $\mathcal{O}(x)$ της τάξης μεγέθος του x_n, τα σφάλματα στρογγυλοποίησης θα είναι σημαντικά και θα αυξάνουν προσθετικά με τον αριθμό των βημάτων.

3.3.1 Προγραμματισμός της Runge–Kutta 4ης τάξης

Ας συζητήσουμε τώρα τον προγραμματισμό της μεθόδου Runge–Kutta 4ης τάξης για την περίπτωση της κίνησης ενός σωματιδίου σε μία διάσταση. Για το λόγο αυτό θα πρέπει να ολοκληρώσουμε το σύστημα διαφορικών εξισώσεων (3.5) που είναι ένα σύστημα εξισώσεων για τις δύο συναρτήσεις του χρόνου $x_1(t) \equiv x(t)$ και $x_2(t) \equiv v(t)$ για τις οποίες έχουμε

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(t, x_1, x_2) \qquad \frac{dx_2}{dt} = f_2(t, x_1, x_2) \tag{3.21}$$

Στην περίπτωση αυτή η μέθοδος Runge–Kutta 4ης τάξης που δίνεται

στην εξίσωση (3.20) γενικεύεται ως εξής:

$$\begin{aligned}
k_{11} &= f_1(t_n, x_{1,n}, x_{2,n}) \\
k_{21} &= f_2(t_n, x_{1,n}, x_{2,n}) \\
k_{12} &= f_1(t_n + \frac{h}{2}, x_{1,n} + \frac{h}{2}\,k_{11}, x_{2,n} + \frac{h}{2}\,k_{21}) \\
k_{22} &= f_2(t_n + \frac{h}{2}, x_{1,n} + \frac{h}{2}\,k_{11}, x_{2,n} + \frac{h}{2}\,k_{21}) \\
k_{13} &= f_1(t_n + \frac{h}{2}, x_{1,n} + \frac{h}{2}\,k_{12}, x_{2,n} + \frac{h}{2}\,k_{22}) \\
k_{23} &= f_2(t_n + \frac{h}{2}, x_{1,n} + \frac{h}{2}\,k_{12}, x_{2,n} + \frac{h}{2}\,k_{22}) \\
k_{14} &= f_1(t_n + h, x_{1,n} + h\,k_{13}, x_{2,n} + h\,k_{23}) \\
k_{24} &= f_2(t_n + h, x_{1,n} + h\,k_{13}, x_{1,n} + h\,k_{23}) \\
x_{1,n+1} &= x_{1,n} + \frac{h}{6}(k_{11} + 2k_{12} + 2k_{13} + k_{14}) \\
x_{2,n+1} &= x_{1,n} + \frac{h}{6}(k_{21} + 2k_{22} + 2k_{23} + k_{24})\,. \qquad (3.22)
\end{aligned}$$

Ο προγραμματισμός της μεθόδου είναι απλός. Στο κυρίως πρόγραμμα έχουμε απλό interface με το χρήστη και του ζητάμε τα απαραίτητα δεδομένα: Το χρόνο ολοκλήρωσης από $t_0 =$ `T0` έως $t_f =$ `TF` και τον αριθμό των βημάτων $N =$ `STEPS+1`. Τις αρχικές συνθήκες $x_1(t_0) =$ `X10`, $x_2(t_0) =$ `X20`. Η δομή των δεδομένων είναι απλή: Τρία arrays `T(P)`, `X1(P)`, `X2(P)` αποθηκεύουν τις τιμές του χρόνου $t_1, t_2, \ldots, t_{\texttt{STEPS+1}}$ και τις αντίστοιχες τιμές των συναρτήσεων $x_1(t_i)$ και $x_2(t_i)$. Το πρόγραμμα καλεί την υπορουτίνα `RK(T,X1,X2,T0,TF,X10,X20,STEPS,PSIZE)` η οποία είναι ο οδηγός της μεθόδου, δηλ. οδηγεί την καρδιά του προγράμματος την υπορουτίνα `RKSTEP(t,x1,x2,dt)` η οποία εφαρμόζει τους τύπους (3.22) και προωθεί τις τιμές των συναρτήσεων `x1`, `x2` τη χρονική στιγμή `t` κατά ένα βήμα $h =$ `dt`. Κάθε βήμα, αφού οριστούν οι αρχικές συνθήκες καταγράφεται στην `RK` στα arrays `T`, `X1` και `X2`. Όταν η `RK` επιστρέψει τον έλεγχο στο κυρίως πρόγραμμα, τα αποτελέσματα είναι καταχωρημένα στα `T`, `X1` και `X2`, τα οποία τυπώνονται στο αρχείο `rk.dat`. Παρακάτων παραθέτουμε το πρόγραμμα για να διευκολύνουμε τον αναγνώστη:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to solve a 2 ODE system using Runge-Kutta Method
C     User must supply derivatives
C     dx1/dt=f1(t,x1,x2) dx2/dt=f2(t,x1,x2)
C     as real functions
```

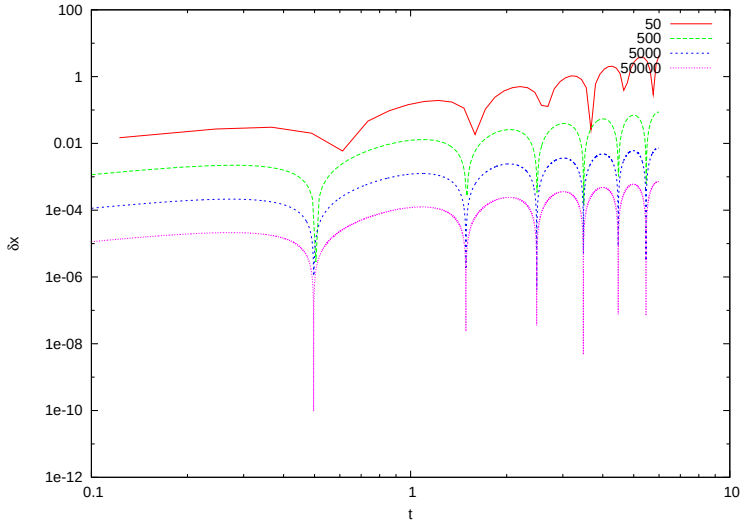
```
C     Output is written in file rk.dat
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      program rk_solve
      implicit none
      integer P
      parameter(P=10000)
      real T0,TF,X10,X20
      integer STEPS,PSIZE
      real T(P),X1(P),X2(P)
      integer i

C     Input:
      print *,'Runge-Kutta Method for 2-ODEs Integration'
      print *,'Enter STEPS,T0,TF,X10,X20:'
      read(5,*) STEPS,T0,TF,X10,X20
      print *,'No. Steps= ',STEPS
      print *,'Time: Initial T0 =',T0,' Final TF=',TF
      print *,'           X1(T0)=',X10,' X2(T0)=',X20

C     The Calculation:
      PSIZE=P
      call RK(T,X1,X2,T0,TF,X10,X20,STEPS,PSIZE)

C     Output:
      open(unit=11,file='rk.dat')
      do i=1,STEPS+1
       write(11,*)T(i),X1(i),X2(i)
      enddo
      close(11)

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     The functions f1,f2(t,x1,x2) provided by the user
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      real function f1(t,x1,x2)
      implicit none
      real t,x1,x2
      f1=x2           !dx1/dt= v = x2
      end
```

```
      real function f2(t,x1,x2)
      implicit none
      real t,x1,x2
      f2=-10.0D0*x1   !dx2/dt=dv/dt=a harmonic oscillator
      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     RK(T,X1,X2,T0,TF,X10,X20,STEPS,PSIZE) is the driver
C     for the Runge-Kutta integration routine RKSTEP
C     Input: Initial and final times T0,T1
C            Initial values at t=T0  X10,X20
C            Number of steps of integration STEPS
C            Size of arrays T,X1,X2
C     Output: real arrays T(PSIZE),X1(PSIZE),X2(PSIZE) where
C     T(1) = T0 X1(1) = X10 X2(1) = X20
C                X1(i) = X1(at t=T(i)) X2(i) = X2(at t=T(i))
C     T(STEPS+1)=TF
C     Therefore we must have PSIZE>STEPS
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine RK(T,X1,X2,T0,TF,X10,X20,STEPS,PSIZE)
      implicit none
      integer STEPS,PSIZE
      real T(PSIZE),X1(PSIZE),X2(PSIZE),T0,TF,X10,X20
      real dt
      real TS,X1S,X2S !values of time and X1,X2 at given step
      integer i

C     Some checks:
      if(STEPS .le. 1 )then
       print *,'rk: STEPS must be >= 1'
       stop
      endif
      if(STEPS .ge. PSIZE)then
       print *,'rk: STEPS must be < ',PSIZE
       stop
      endif

C     Initialize variables:
      dt    = (TF-T0)/STEPS
      T (1) = T0
```

```
      X1(1) = X10
      X2(1) = X20
      TS    = T0
      X1S   = X10
      X2S   = X20
C    Make RK steps: The arguments of RKSTEP are replaced with the new ones!
      do i=2,STEPS+1
       call RKSTEP(TS,X1S,X2S,dt)
       T(i)  = TS
       X1(i) = X1S
       X2(i) = X2S
      enddo

      end


C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Subroutine RKSTEP(t,x1,x2,dt)
C     Runge-Kutta Integration routine of ODE
C     dx1/dt=f1(t,x1,x2) dx2/dt=f2(t,x1,x2)
C     User must supply derivative functions:
C     real function f1(t,x1,x2)
C     real Function f2(t,x1,x2)
C     Given initial point (t,x1,x2) the routine advnaces it
C     by time dt.
C     Input : Inital time t    and function values x1,x2
C     Output: Final  time t+dt and function values x1,x2
C     Careful!: values of t,x1,x2 are overwritten...
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine RKSTEP(t,x1,x2,dt)
      implicit none
      real t,x1,x2,dt
      real f1,f2
      real k11,k12,k13,k14,k21,k22,k23,k24
      real h,h2,h6

      h =dt                           !h =dt, integration step
      h2=0.5D0*h                      !h2=h/2
      h6=0.16666666666666666666D0*h   !h6=h/6

      k11=f1(t,x1,x2)
```

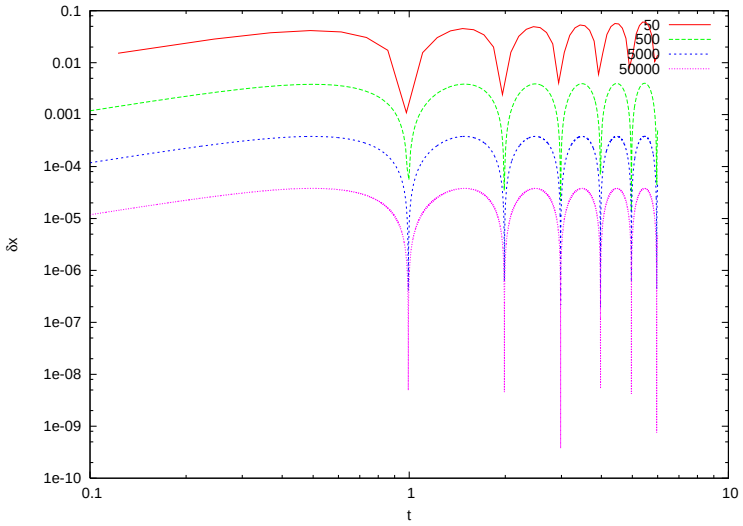
```
k21=f2(t,x1,x2)
k12=f1(t+h2,x1+h2*k11,x2+h2*k21)
k22=f2(t+h2,x1+h2*k11,x2+h2*k21)
k13=f1(t+h2,x1+h2*k12,x2+h2*k22)
k23=f2(t+h2,x1+h2*k12,x2+h2*k22)
k14=f1(t+h ,x1+h *k13,x2+h *k23)
k24=f2(t+h ,x1+h *k13,x2+h *k23)

t =t+h
x1=x1+h6*(k11+2.0D0*(k12+k13)+k14)
x2=x2+h6*(k21+2.0D0*(k22+k23)+k24)

end
```

3.4 Σύγκριση των Μεθόδων



Σχήμα 3.11: Η απόκλιση της αριθμητικής λύσης με τη μέθοδο Euler από την αναλυτική για τον απλό αρμονικό ταλαντωτή. Οι παράμετροι είναι $\omega^2 = 10$, $t_0 = 0$, $t_f = 6$, $x(0) = 0.2$, $v(0) = 0$ και ο αριθμός των βημάτων είναι $N = 50, 500, 5,000, 50,000$. Παρατηρούμε ότι κάθε φορά το σφάλμα περίπου υποδεκαπλασιάζεται σύμφωνα με την αναμενόμενη ακρίβεια της μεθόδου $\sim \mathcal{O}(\Delta t)$.

Στην παράγραφο αυτή θα κάνουμε έλεγχο ορθότητας των προγραμμάτων μας και θα μετρήσουμε την ακρίβειά τους ως προς τα ολικά



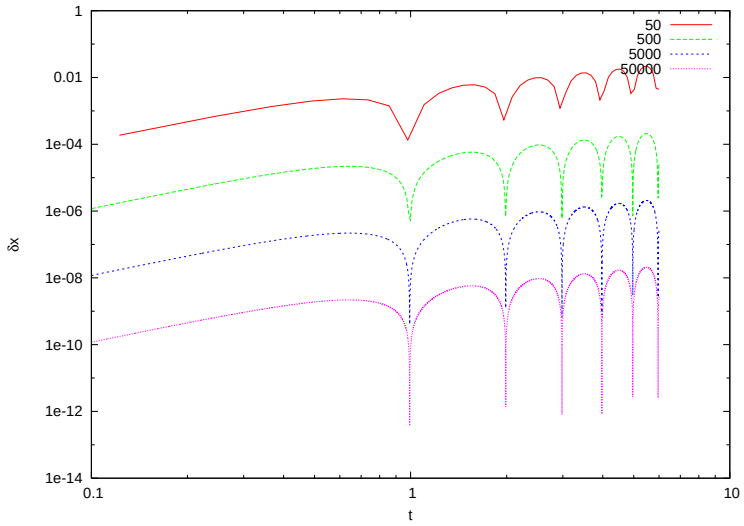
Σχήμα 3.12: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 για τη μέθοδο Euler-Cromer. Το σφάλμα περίπου υποδεκαπλασιάζεται σύμφωνα με την αναμενόμενη ακρίβεια της μεθόδου $\sim \mathcal{O}(\Delta t)$.

σφάλματα διακριτοποίησης. Το πιο απλό τεστ στο οποίο μπορούμε να τα υποβάλλουμε είναι να συγκρίνουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα σε ένα σύστημα για το οποίο έχουμε γνωστή την αναλυτική λύση. Θα διαλέξουμε να το κάνουμε για την περίπτωση του απλού αρμονικού ταλαντωτή. Οι αλλαγές που θα κάνουμε στα προγράμματα είναι μικρές και θα τις αναφέρουμε περιληπτικά. Κατ' αρχήν μετατρέπουμε όλες τις μεταβλητές `REAL` σε διπλής ακρίβειας `REAL*8`. Απλά αλλάζουμε τις δηλώσεις στα κατάλληλα σημεία του προγράμματος και προσθέτουμε ένα `D0` σε όλες τις σταθερές (λ.χ. `0.5` → `0.5D0` κλπ). Στη συνέχεια μετατρέπουμε τις συναρτήσεις της επιτάχυνσης σε αυτή του αρμονικού ταλαντωτή $a = -\omega^2 x$ και παίρνουμε $\omega^2 = 10$ ($T \approx 1.987$). Έτσι στο πρόγραμμα `euler.f` έχουμε

```
real*8 function accel(x)
implicit none
real*8 x
accel = -10.0D0*x
end
```

ενώ στο πρόγραμμα `rk.f` έχουμε

```
real*8 function f2(t,x1,x2)
implicit none
```



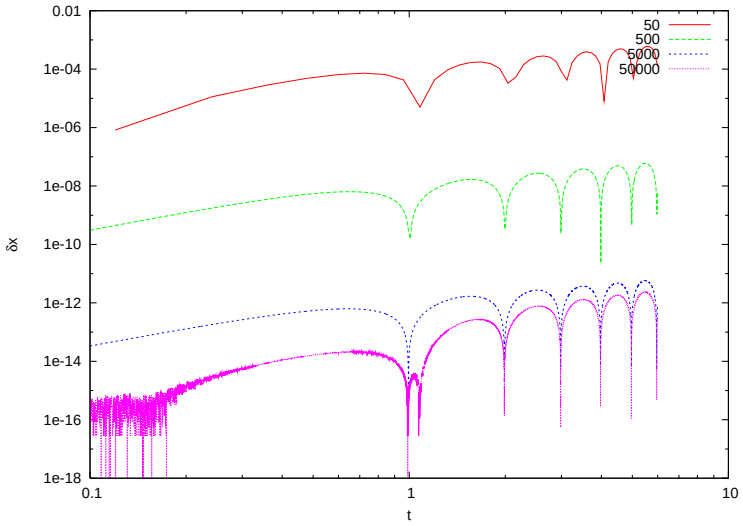
Σχήμα 3.13: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 για τη μέθοδο Euler-Verlet. Το σφάλμα περίπου υποεκατονταπλασιάζεται σύμφωνα με την αναμενόμενη ακρίβεια της μεθόδου $\sim \mathcal{O}(\Delta t^2)$.

```
real*8 t,x1,x2
f2=-10.0D0*x1
end
```

Στη συνέχεια τρέχουμε τα προγράμματα για δεδομένο χρονικό διάστημα από $t_0 = 0$ σε $t_f = 6$ με αρχικές συνθήκες $x_0 = 0.2$, $v_0 = 0$ και μεταβάλλουμε το χρονικό βήμα Δt αλλάζοντας τον αριθμό των βημάτων `steps`. Στη συνέχεια συγκρίνουμε τη λύση που παίρνουμε με αυτή του απλού αρμονικού ταλαντωτή

$$\begin{aligned} a(x) &= -\omega^2 x \\ x_h(t) &= x_0 \cos(\omega t) + (v_0/\omega) \sin(\omega t) \\ v_h(t) &= v_0 \cos(\omega t) - (x_0 \omega) \sin(\omega t)\,, \end{aligned} \tag{3.23}$$

και μελετούμε τη σχέση των αποκλίσεων $\delta x(t) = |x(t) - x_h(t)|$ και $\delta v(t) = |v(t) - v_h(t)|$ με το βήμα Δt. Τα αποτελέσματά μας φαίνονται στα Σχήματα 3.11–3.14. Παρατηρούμε πως για τις μεθόδους Euler και Euler-Cromer τα σφάλματα είναι τάξης $\mathcal{O}(\Delta t)$ όπως είχαμε προβλέψει, αλλά για τη δεύτερη τα σφάλματα είναι αριθμητικά μικρότερα από αυτά της πρώτης έχοντας πιο ευσταθή συμπεριφορά για το συγκεκριμένο περιοδικό σύστημα. Για τη μέθοδο Euler–Verlet το σφάλμα βρίσκεται να είναι τάξης $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ ενώ για την Runge-Kutta είναι τάξης $\mathcal{O}(\Delta t^4)$.



Σχήμα 3.14: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 για τη μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης. Το σφάλμα περίπου μειώνεται κατά 10^{-4} σύμφωνα με την αναμενόμενη ακρίβεια της μεθόδου $\sim \mathcal{O}(\Delta t^4)$. Στα $50,000$ βήματα γίνονται φανερά τα σφάλματα στρογγυλοποίησης.

Μία άλλη μέθοδος για να ελένξουμε την ορθότητα των αποτελεσμάτων μας είναι να βρούμε μια διατηρούμενη ποσότητα όπως η ενέργεια, ορμή, στροφορμή κλπ και να εξετάζουμε αν αυτή αποκλίνει από την αρχική της τιμή. Στην περίπτωσή μας υπολογίζουμε τη μηχανική ενέργεια

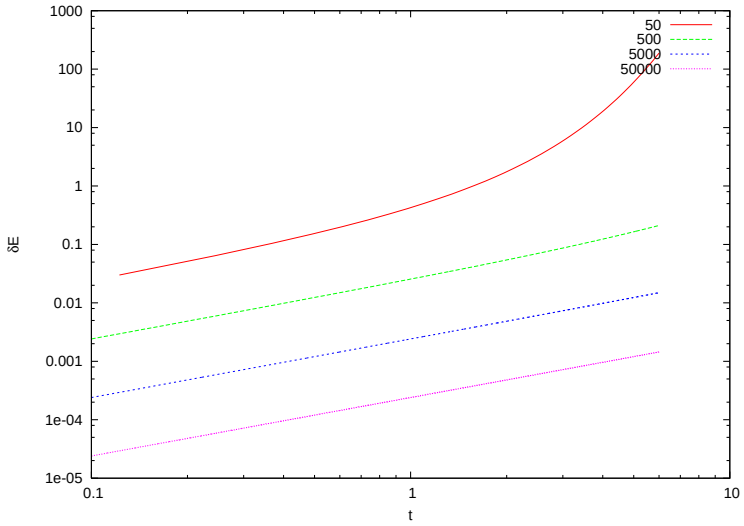
$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{3.24}$$

σε κάθε βήμα και από αυτή την απόκλιση $\delta E = |E - E_0|$. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα σχήματα 3.15–3.18.

3.5 Ο Αρμονικός Ταλαντωτής με Απόσβεση και Εξωτερική Δύναμη.

Στην παράγραφο αυτή θα μελετήσουμε τον απλό αρμονικό ταλαντωτή του οποίου η κίνηση υπόκειται σε απόσβεση ανάλογη της ταχύτητάς του και σε εξωτερική δύναμη, την οποία για απλότητα θα πάρουμε να έχει ημιτονοειδή εξάρτηση από το χρόνο.

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = a_0 \sin\omega t\,, \tag{3.25}$$



Σχήμα 3.15: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 στην περίπτωση της ενέργειας για τη μέθοδο Euler.

με $F(t) = ma_0 \sin \omega t$ και ω η κυκλική συχνότητα της οδηγούσας δύναμης.

Ας θεωρήσουμε αρχικά το σύστημα με $a_0 = 0$. Οι πραγματικές λύσεις της διαφορικής εξίσωσης[6] που είναι πεπερασμένες για $t \to +\infty$ δίνονται, διακρίνοντας τις περιπτώσεις,

$$x_0(t) = c_1 \mathrm{e}^{-(\gamma+\sqrt{\gamma^2-4\omega_0^2})t/2} + c_2 \mathrm{e}^{-(\gamma-\sqrt{\gamma^2-4\omega_0^2})t/2}\,, \quad \gamma^2 - 4\omega_0^2 > 0\,, \tag{3.26}$$

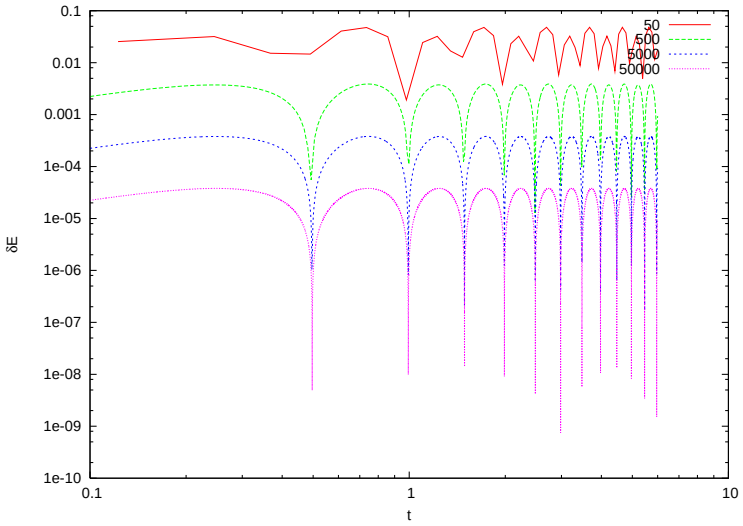
$$x_0(t) = c_1 \mathrm{e}^{-\gamma t/2} + c_2 \mathrm{e}^{-\gamma t/2} t\,, \quad \gamma^2 - 4\omega_0^2 = 0\,, \tag{3.27}$$

$$\begin{aligned} x_0(t) \;\; = \;\; & c_1 \mathrm{e}^{-\gamma t/2} \cos\left(\sqrt{-\gamma^2 + 4\omega_0^2}\; t/2\right) \\ & + c_2 \mathrm{e}^{-\gamma t/2} \sin\left(\sqrt{-\gamma^2 + 4\omega_0^2}\; t/2\right)\,, \quad \gamma^2 - 4\omega_0^2 < 0\,, \end{aligned} \tag{3.28}$$

Στην τελευταία περίπτωση η λύση ταλαντώνεται με πλάτος που φθίνει εκθετικά με το χρόνο.

Για την περίπτωση που $a_0 > 0$, η γενική λύση προκύπτει από το άθροισμα μιας ειδικής λύσης $x_s(t)$ και της λύσης της ομογενούς εξίσωσης $x_0(t)$. Μια ειδική λύση προκύπτει από τη δοκιμαστική λύση $x_s(t) =$

[6] Προκύπτουν εύκολα αντικαθιστώντας τη δοκιμαστική λύση $x(t) = A\mathrm{e}^{-\Omega t}$ και λύνοντας ως προς Ω.



Σχήμα 3.16: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 στην περίπτωση της ενέργειας για τη μέθοδο Euler-Cromer.

$A\sin\omega t + B\cos\omega t$ την οποία αντικαθιστούμε στην (3.25) και λύνουμε για τα A και B. Βρίσκουμε ότι

$$x_s(t) = \frac{a_0\left[(\omega_0^2-\omega^2)\cos\omega t + \gamma\omega\sin\omega t\right]}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2} \tag{3.29}$$

και

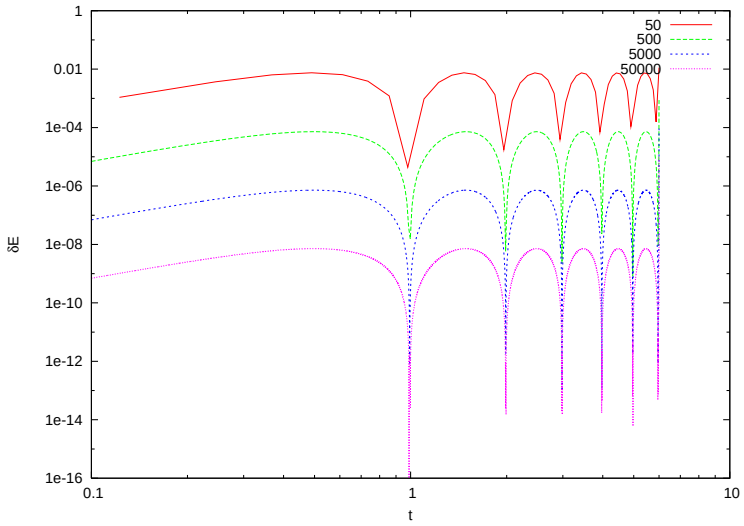
$$x(t) = x_0(t) + x_s(t)\,. \tag{3.30}$$

Η λύση $x_0(t)$ είναι εκθετικά φθίνουσα με το χρόνο και τελικά επικρατεί η $x_s(t)$. Η μόνη περίπτωση που αυτό δεν ισχύει είναι στην περίπτωση του συντονισμού χωρίς απόσβεση $\omega=\omega_0$, $\gamma=0$. Η λύση στην περίπτωση αυτή βρίσκεται εύκολα να είναι η

$$x(t) = c_1\cos\omega t + c_2\sin\omega t + \frac{a_0}{4\omega^2}\left(\cos\omega t + 2(\omega t)\sin\omega t\right)\,. \tag{3.31}$$

Οι δύο πρώτοι όροι είναι αυτοί του απλού αρμονικού ταλαντωτή, ενώ ο τελευταίος όρος αυξάνει το πλάτος της μετατόπισης γραμμικά με το χρόνο καταδεικνύοντας τη συνεχή ροή ενέργειας από την εξωτερική δύναμη στον ταλαντωτή.

Ο προγραμματισμός του συστήματος γίνεται με απλή μετατροπή του κώδικα `rk.f`. Οι βασικές ρουτίνες `RK(T,X1,X2,T0,TF,X10,X20,STEPS,PSIZE)` και `RKSTEP(t,x1,x2,dt)` μένουν ως έχουν και αλλάζει απλά το interface



Σχήμα 3.17: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 στην περίπτωση της ενέργειας για τη μέθοδο Euler-Verlet.

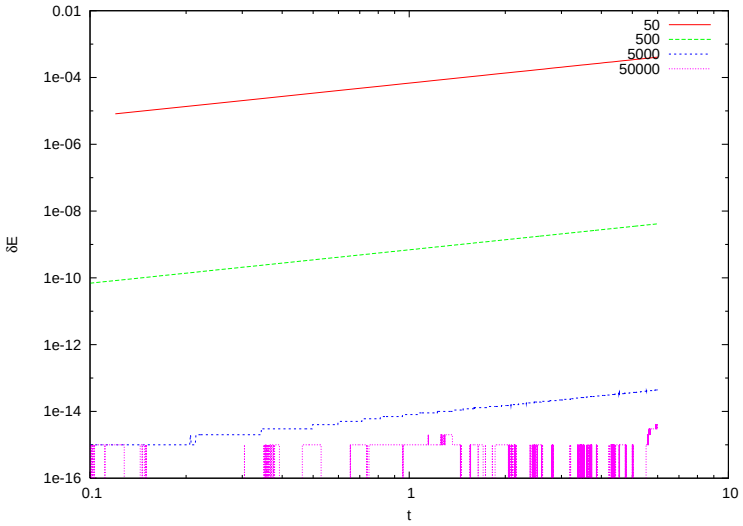
με το χρήστη. Εισάγουμε τις βασικές παραμέτρους ω_0, ω, γ, a_0 διαδραστικά στην καθιερωμένη είσοδο (standard input). Επειδή θέλουμε να τις χρησιμοποιήσουμε στη συνάρτηση `f2(t,x1,x2)` που δίνει την επιτάχυνση χωρίς να αλλάξουμε τη δομή των οδηγών της μεθόδου Runge-Kutta, πρέπει να τις ορίσουμε σε κοινή θέση στη μνήμη για το κυρίως πρόγραμμα και την εν λόγω συνάρτηση. Αυτό στη FORTRAN 77 γίνεται με τη χρήση COMMON BLOCKS. Αυτά ορίζονται μετα τη δήλωση των μεταβλητών και ορίζουν για αυτές μια συγκεκριμένη θέση στη μνήμη στις οποίες αποθηκεύονται οι τιμές τους. Το κομμάτι κώδικα

```
real*8          omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
common /params/omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
```

σε οποιαδήποτε ρουτίνα δίνει πρόσβαση στη μνήμη στη "θέση" `params` στην οποία αποθηκεύονται οι τιμές των μεταβλητών[7]. Το μόνο άλλο σημείο που χρήζει προσοχής στο πρόγραμμα είναι η συνάρτηση της επιτάχυνσης `f2(t,x1,x2)` η οποία τώρα έχει όρο που εξαρτάται από την ταχύτητα που εδώ συμβολίζουμε με τη μεταβλητή `x2`:

```
real*8 function f2(t,x1,x2)
```

[7]Στην πραγματικότητα ο προγραμματιστής μπορεί να αποθηκεύσει ό,τι τύπου μεταβλητή θέλει σε διαφορετικές υπορουτίνες και έτσι να ρυθμίσει την παροχή μνήμης με "οικονομία". Εμείς μόνο για ευκολία χρησιμοποιούμε τις ίδιου τύπου μεταβλητές με τα ίδια ονόματα.



Σχήμα 3.18: Παρόμοια με το Σχήμα 3.11 στην περίπτωση της ενέργειας για τη μέθοδο Runge-Kutta 4ης τάξης. Για μεγάλο αριθμό βημάτων το σφάλμα είναι σφάλμα στρογγυλοποίησης.

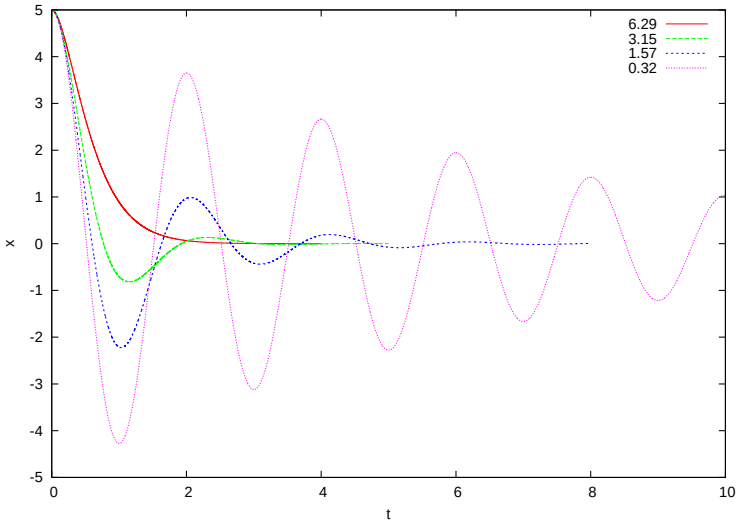
```
      implicit none
      real*8         omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      common /params/omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      real*8 t,x1,x2
      f2=-omega_02*x1-gamma*x2+a_0*dcos(omega*t)
      end
```

Η συνάρτηση `dcos` είναι η γνωστή `cos` η οποία παίρνει όρισμα και δίνει τιμές με ακρίβεια `REAL*8`. Για διευκόλυνση του αναγνώστη παραθέτουμε όλο το interface, παραλείποντας φυσικά τις υπορουτίνες `RK`, `RKSTEP` που έχουμε παραθέσει προτύτερα. Το πρόγραμμα αποθηκεύεται στο αρχείο `dlo.f`.

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to solve Damped Linear Oscillator
C     using 4th order Runge-Kutta Method
C     Output is written in file dlo.dat
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      program dlo_solve
      implicit none
      integer P
```

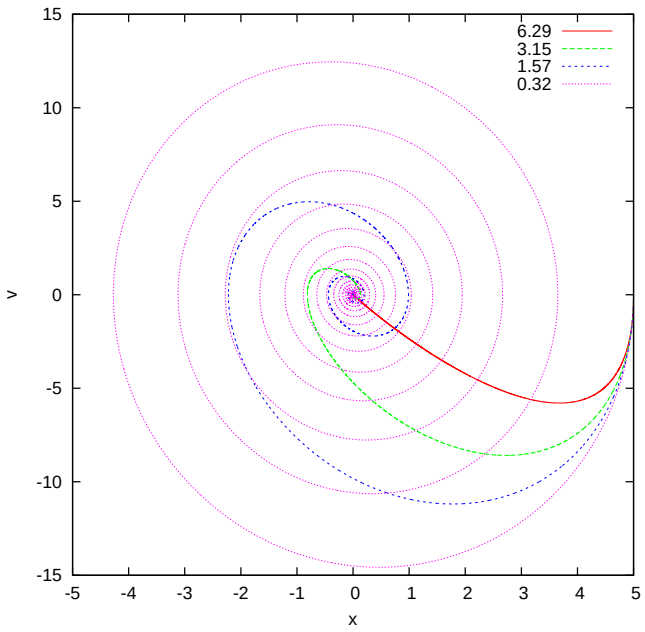
```
      parameter(P=110000)
      real*8 T0,TF,X10,X20
      integer STEPS,PSIZE
      real*8 T(P),X1(P),X2(P)
      real*8 Energy
      real*8         omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      common /params/omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      integer i

C     Input:
      print *,'Runge-Kutta Method for DLO Integration'
      print *,'Enter omega_0, omega, gamma, a_0:'
      read(5,*) omega_0,omega,gamma,a_0
      omega_02 = omega_0*omega_0
      omega2   = omega  *omega
      print *, 'omega_0= ',omega_0,' omega= ', omega
      print *, 'gamma=   ',gamma,  ' a_0=   ',a_0
      print *,'Enter STEPS,T0,TF,X10,X20:'
      read(5,*) STEPS,T0,TF,X10,X20
      print *,'No. Steps= ',STEPS
      print *,'Time: Initial T0 =',T0,' Final TF=',TF
      print *,'           X1(T0)=',X10,' X2(T0)=',X20

C     The Calculation:
      PSIZE=P
      call RK(T,X1,X2,T0,TF,X10,X20,STEPS,PSIZE)

C     Output:
      open(unit=11,file='dlo.dat')
      write(11,*)'# Damped Linear Oscillator - dlo'
      write(11,*)'# omega_0= ',omega_0,' omega= ', omega,
     *     ' gamma= ',gamma,' a_0= ',a_0
      do i=1,STEPS+1
       Energy = 0.5D0*X2(i)*X2(i)+0.5D0*omega_02*X1(i)*X1(i)
       write(11,*)T(i),X1(i),X2(i),Energy
      enddo
      close(11)

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

```
C     The functions f1,f2(t,x1,x2) provided by the user
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      real*8 function f1(t,x1,x2) !velocity function
      implicit none
      real*8 t,x1,x2
      f1=x2            !dx1/dt= v = x2
      end

      real*8 function f2(t,x1,x2) !acceleration function
      implicit none
      real*8         omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      common /params/omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      real*8 t,x1,x2
      f2=-omega_02*x1-gamma*x2+a_0*dcos(omega*t)
      end
```



Σχήμα 3.19: Η θέση συναρτήσει του χρόνου για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση για διαφορετικές τιμές του συντελεστή απόσβεσης γ με $\omega_0 = 3.145$.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στα Σχήματα 3.19–3.22. Στο Σχήμα 3.19 παρατηρούμε τη μετάβαση από την φάση που η κίνηση αποσβένυται χωρίς ταλάντωση για $\gamma > 2\omega_0$ στη φάση που το σύστημα ταλαντώνεται με εκθετικά φθίνων με το χρόνο πλάτος για $\gamma < 2\omega_0$. Η εκθετική μείωση του πλάτους φαίνεται στο Σχήμα 3.21, ενώ η εξάρτηση της περιόδου T του όρου ταλάντωσης (δηλ. του ορίσματος στον



Σχήμα 3.20: Η τροχιά στο χώρο των φάσεων για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση για διαφορετικές τιμές του συντελεστή απόσβεσης γ με $\omega_0 = 3.145$. Παρατηρούμε την ύπαρξη ελκυστή στο $(x, v) = (0, 0)$ στον οποίο καταλήγει στο σύστημα για $t \to +\infty$.

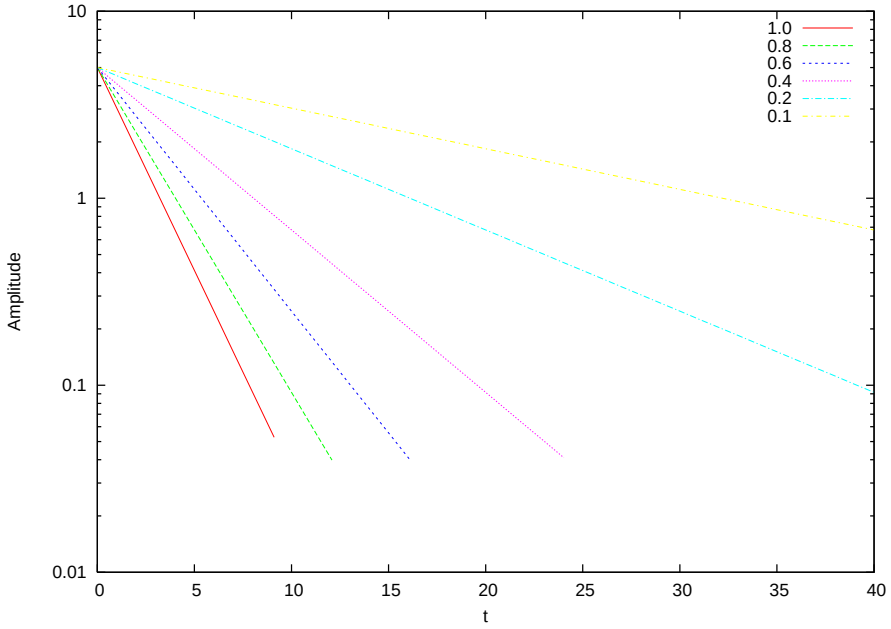
(συν)ημιτονειδή όρο) από το συντελεστή απόσβεσης γ στο Σχήμα 3.22. Το εν λόγω σχήμα προκύπτει από τη Σχέση (3.28) την οποία γράφουμε στη μορφή

$$4\omega_0^2 - \left(\frac{2\pi}{T}\right) = \gamma^2 \,. \tag{3.32}$$

Το δεξί μέλος της εξίσωσης τοποθετείται στον οριζόντιο άξονα ενώ στον κάθετο τοποθετούμε το αριστερό. Η παραπάνω σχέση προβλέπει ότι οι δύο ποσότητες είναι ίσες και οι μετρήσεις πρέπει να βρίσκονται πάνω στη διαγώνιο $y = x$. Οι μετρήσεις για την "περίοδο" T παίρνονται μετρώντας το χρόνο μεταξύ δύο διαδοχικών ακρότατων ($v = 0$) στην τροχιά $x(t)$ (βλ. Σχήμα 3.19).

Τέλος σημαντικό είναι να μελετήσουμε το Σχήμα 3.20 στο οποίο βλέπουμε την τροχιά του συστήματος στο χώρο των φάσεων[8] Το σύστημα για $t \to +\infty$ καταλήγει στο σημείο $(0, 0)$ για οποιαδήποτε τιμή της σταθεράς γ. Το σημείο αυτό για το σύστημα είναι ένας "ελκυστής

[8]Για την ακρίβεια ο χώρος των φάσεων είναι ο χώρος των θέσεων–ορμών, αλλά στην περίπτωσή μας η διαφορά είναι τετριμμένη.



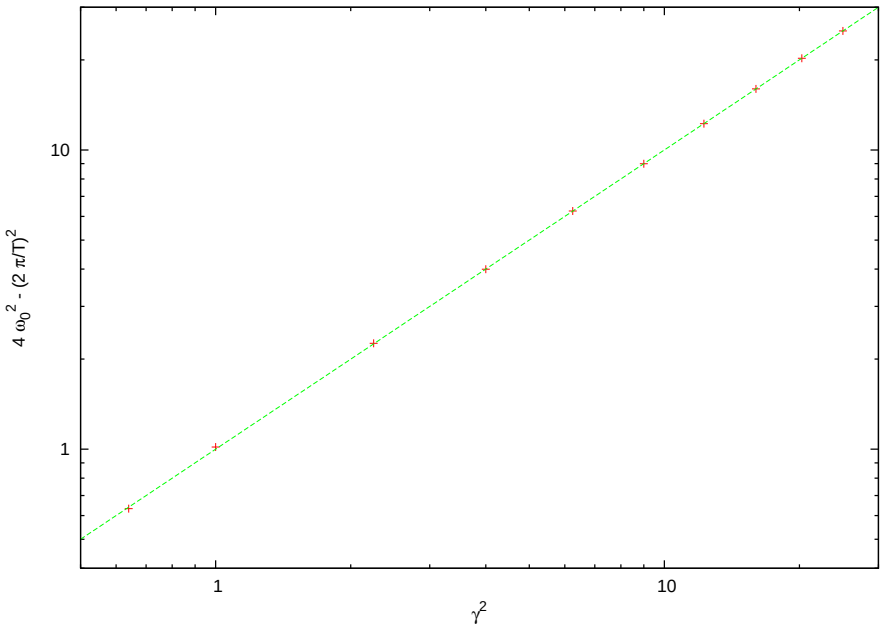
Σχήμα 3.21: Το πλάτος ταλάντωσης για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση για διαφορετικές τιμές του συντελεστή απόσβεσης γ με $\omega_0 = 3.145$. Παρατηρούμε την εκθετική μείωση του πλάτους με το χρόνο.

" (attractor).

Στη συνέχεια προσθέτουμε την εξωτερική δύναμη και μελετούμε την απόκριση του συστήματος σε αυτή. Το πρώτο που παρατηρούμε στο Σχήμα 3.23 είναι ότι το σύστημα μετά από μια παροδική κατάσταση (transient state) η οποία εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες, καταλήγει σε μία σταθερή κατάσταση η οποία δεν εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες. Στη συγκεκριμένη περίπτωση αυτό προβλέπεται εύκολα από τις Σχέσεις (3.26) – (3.28) όπου αφού οι εκθετικοί όροι γίνουν αμελητέοι, επικρατεί ο όρος $x_s(t)$ της (3.29) . Ο τελευταίος μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0(\omega)\cos(\omega t + \delta(\omega)) \\ x_0(\omega) &= \frac{a_0}{\sqrt{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}}, \qquad \tan\delta(\omega) = \frac{\omega\gamma}{\omega^2-\omega_0^2}. \end{aligned} \tag{3.33}$$

Την παραπάνω σχέση την επιβεβαιώνουμε στο Σχήμα 3.24 όπου μελετάμε την εξάρτηση του πλάτους $x_0(\omega)$ από τη γωνιακή συχνότητα της εξωτερικής δύναμης. Τέλος μελετάμε την τροχιά του συστήματος στο χώρο των φάσεων. Παρατηρούμε την ύπαρξη ελκυστή για το σύστημα,

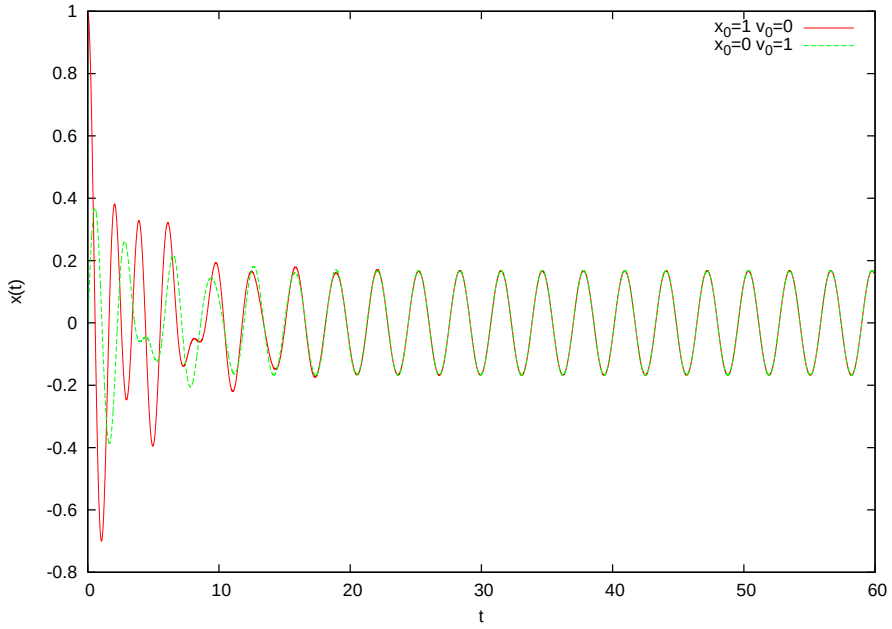


Σχήμα 3.22: Η περίοδος ταλάντωσης για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση για διαφορετικές τιμές του συντελεστή απόσβεσης γ με $\omega_0 = 3.145$. Στους άξονες επιλέγουμε τις κατάλληλες ποσότητες για τη γραφική επιβεβαίωση της Εξίσωσης (3.28), δηλ. $(2\pi/T)^2 = 4\omega_0^2 - \gamma^2$. Τα σημεία είναι οι μετρήσεις ενώ η ευθεία γραμμή είναι η θεωρητική πρόβλεψη, δηλ. η διαγώνιος $y = x$

δηλ. την ύπαρξη υπόχωρου πάνω στον οποίο κινήται το σύστημα όταν $t \to +\infty$ ο οποίος είναι ανεξάρτητος των αρχικών συνθηκών. Στην περίπτωση αυτή ο ελκυστής είναι καμπύλη μιας διάστασης σε αντίθεση με την περίπτωση που δεν έχουμε εξωτερική δύναμη και ο ελκυστής είναι μηδενοδιάστατο σημείο (βλ. Σχήμα 3.20).

3.6 Το Εκκρεμές με Απόσβεση και Εξωτερική Δύναμη.

Στην παράγραφο αυτή θα μελετήσουμε ένα μη γραμμικό δυναμικό σύστημα με μη-τετριμμένες ιδιότητες. Θα ανακαλύψουμε πως πολλά ενδιαφέροντα δυναμικά συστήματα στη φύση, παρ' όλο που η κίνησή τους καθορίζεται από ντετερμινιστικούς νόμους και δεν υπάρχει πρόβλημα αρχής να προσδιοριστεί η κατάστασή τους σε αυθαίρετους χρόνους δεδομένων των αρχικών συνθηκών, η συμπεριφορά τους είναι χαοτική και πολύ σύντομα είναι πρακτικά αδύνατο να κάνουμε προβλέψεις σε βάθος



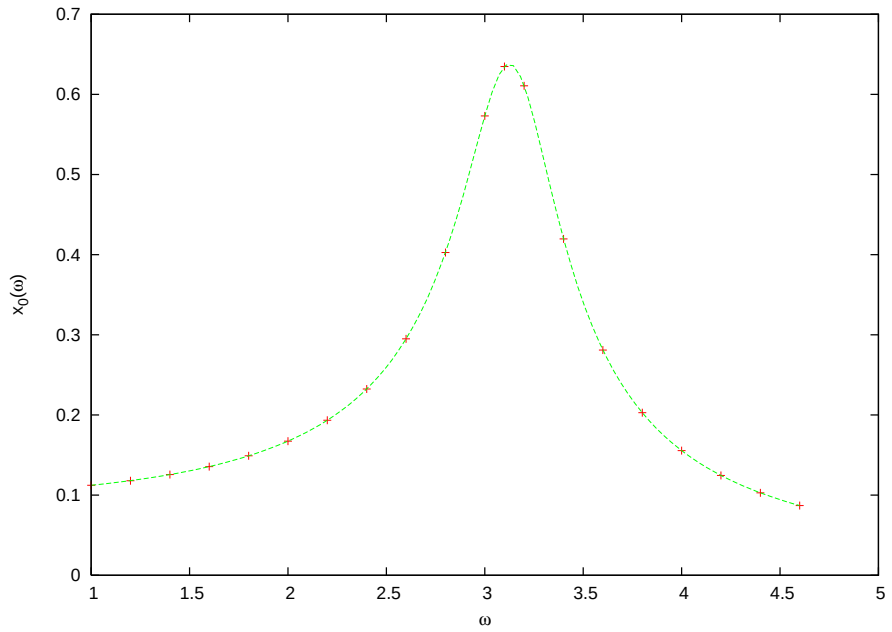
Σχήμα 3.23: Η περίοδος ταλάντωσης για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση και εξωτερική δύναμη για διαφορετικές αρχικές συνθήκες. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 3.145$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.5$ και $a_0 = 1.0$. Παρατηρούμε ότι το σύστημα παρουσιάζει μια μεταβατική κατάσταση μετά το πέρας της οποίας ταλαντώνεται σύμφωνα με τη σχέση $x(t) = x_0(\omega)\cos(\omega t + \delta)$.

χρόνου. Αυτό δίνεται από το εκκρεμές στο ομογενές πεδίο βαρύτητας της γης με δύναμη απόσβεσης ανάλογη της ταχύτητας του εκκρεμούς και μια εξωτερική οδηγούσα δύναμη, κατακόρυφη στη διεύθυνση και μέτρο/φορά που μεταβάλλεται συνημιτονοειδώς με το χρόνο:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \gamma\frac{d\theta}{dt} + \omega_0^2 \sin\theta = -2A\cos\omega t\, \sin\theta\,. \tag{3.34}$$

Στην παραπάνω εξίσωση θ είναι η γωνία με την κατακόρυφο, γ ο συντελεστή απόσβεσης, $\omega_0^2 = g/L$ η φυσική κυκλική συχνότητα του εκκρεμούς και ω, $2A$ η κυκλική συχνότητα και το πλάτος της εξωτερικής γωνιακής επιτάχυνσης που προκαλείται από την εξωτερική δύναμη.

Όταν δεν υπάρχει εξωτερική δύναμη το σύστημα έχει εξ' αιτίας των αποσβέσεων, ελκυστή το σημείο $(\theta, \dot\theta) = (0, 0)$. Αυτό θα συνεχίσει να συμβαίνει καθώς αυξάνουμε το A από μηδέν και ο ελκυστής παραμένει σταθερός για αρκετά μικρό A. Για κάποια τιμή A_c ο ελκυστής γίνεται ασταθής και η συμπεριφορά του συστήματος γίνεται πολυπλοκότερη. Αυτή θα μελετηθεί λεπτομερέστερα σε επόμενο κεφάλαιο, εδω θα κά-

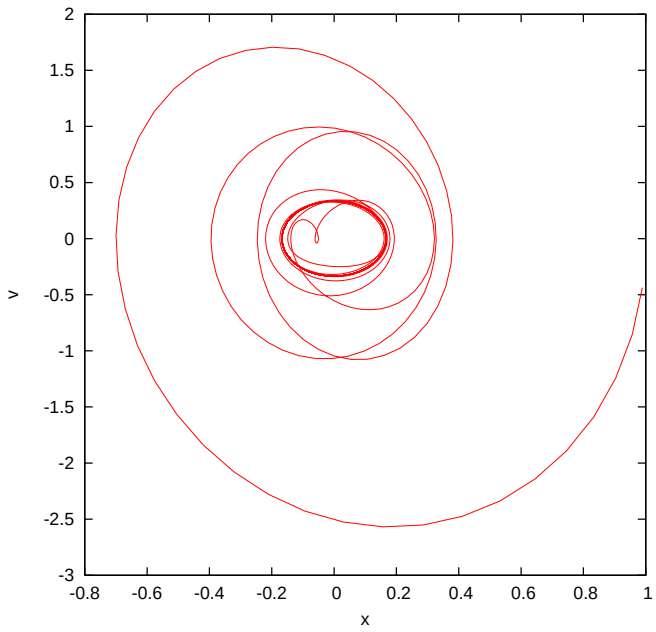


Σχήμα 3.24: Το πλάτος ταλάντωσης $x_0(\omega)$ για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση και εξωτερική δύναμη. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 3.145$, $\gamma = 0.5$ και $a_0 = 1.0$. Παρατηρούμε συντονισμό για $\omega \approx \omega_0$. Τα σημεία είναι οι μετρήσεις μας και η συνεχής γραμμή η θεωρητική πρόβλεψη (3.33) .

νουμε μια εισαγωγική προσέγγιση έχοντας κατά νου ότι το σύστημα αυτό παρουσιάζει ενδιαφέρον.

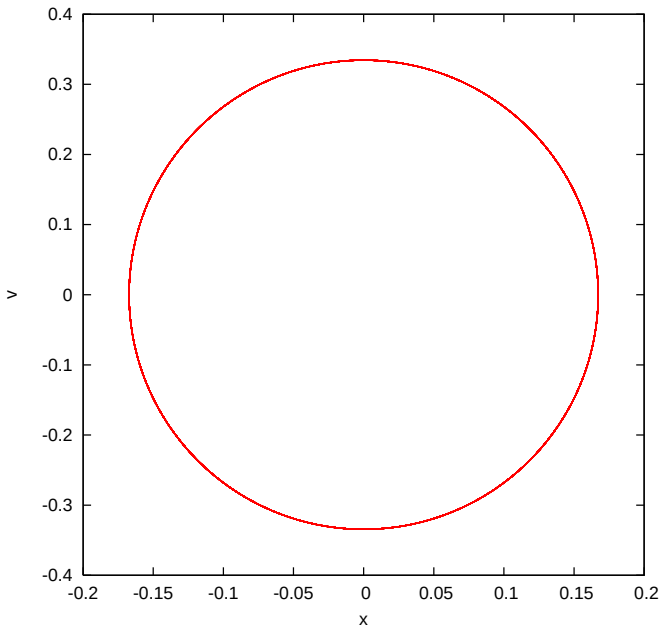
Ο προγραμματισμός του συστήματος γίνεται με τετριμμένες αλλαγές του προγράμματος `dlo.f`. Οι μετατροπές στο πρόγραμμα φαίνονται παρακάτω, έχοντας κατά νου πως `X1` $\leftrightarrow \theta$, `X2` $\leftrightarrow \dot{\theta}$, `a_0` $\leftrightarrow A$. Το πρόγραμμα το αποθηκεύουμε στο αρχείο `fdp.f` (`fdp= Forced Damped Pendulum`). Οι εντολές ανάμεσα στις τελίτσες είναι πανομοιότυπες με τα προγράμματα `dlo.f, rk.f`.

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to solve Forced Damped Pendulum
C     using 4th order Runge-Kutta Method
C     Output is written in file fdp.dat
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      program fdp_solve
      implicit none
      integer P
```



Σχήμα 3.25: Η τροχιά στο χώρο των φάσεων για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση και εξωτερική δύναμη. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 3.145$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.5$ και $a_0 = 1.0$.

```
      parameter(P=110000)
...
       Energy = 0.5D0*X2(i)*X2(i)+omega_02*(1.0D0-dcos(X1(i)))
...
.................................................
      real*8 function f2(t,x1,x2)
      implicit none
      real*8         omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      common /params/omega_0,omega,gamma,a_0,omega_02,omega2
      real*8 t,x1,x2
      f2=-(omega_02+2.0D0*a_0*dcos(omega*t))*dsin(x1)-gamma*x2
      end
.................................................
      subroutine RKSTEP(t,x1,x2,dt)
...
      real*8 h,h2,h6,pi,pi2
      parameter(pi =3.14159265358979324D0)
      parameter(pi2=6.28318530717958648D0)
...
```



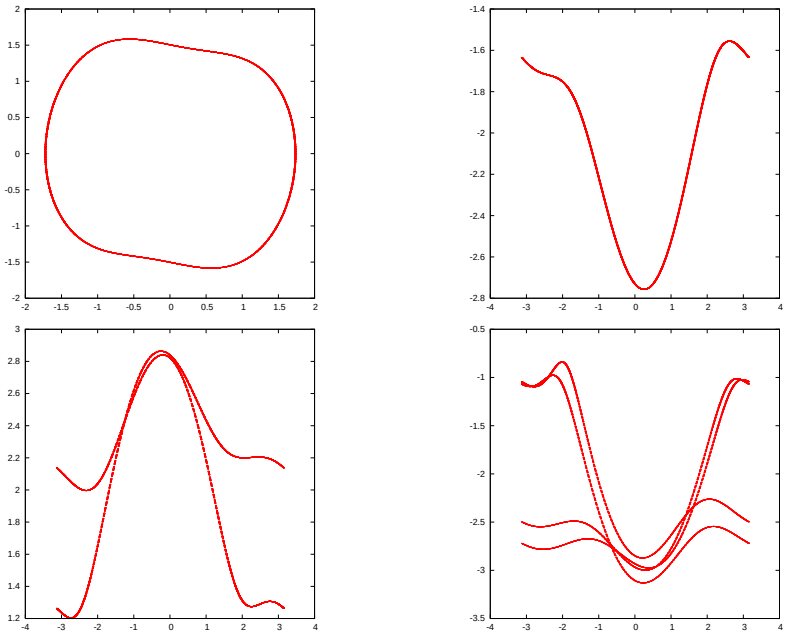
Σχήμα 3.26: Η τροχιά στο χώρο των φάσεων για τον αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση και εξωτερική δύναμη για $t > 100$. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 3.145$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.5$ και $a_0 = 1.0$. Παρατηρούμε τον ελκυστή που τώρα είναι καμπύλη (έλλειψη) μιας διάστασης.

```
x1=x1+h6*(k11+2.0D0*(k12+k13)+k14)
x2=x2+h6*(k21+2.0D0*(k22+k23)+k24)
if( x1 .gt.  pi) x1 = x1 - pi2
if( x1 .lt. -pi) x1 = x1 + pi2
end
```

Τις τελευταίες γραμμές στο πρόγραμμα τις προσθέσαμε ώστε να κρατήσουμε τη γωνία στο διάστημα $[-\pi, \pi]$.

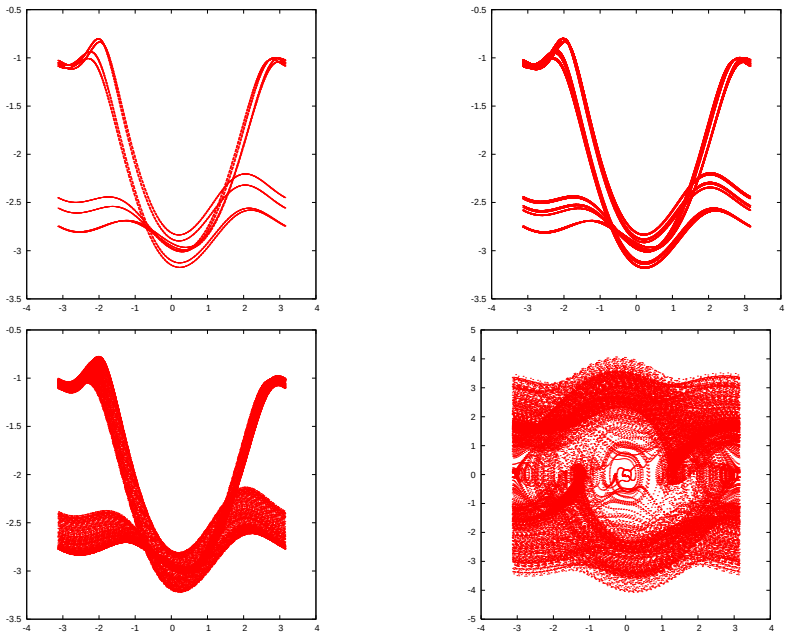
Για να μελετήσουμε τις ιδιότητες του συστήματος θα θέσουμε $\omega_0 = 1$, $\omega = 2$, και $\gamma = 0.2$ εκτός αν αναφέρουμε ρητώς διαφορετικά. Η φυσική περίοδος του εκκρεμούς είναι $T_0 = 2\pi/\omega_0 = 2\pi \approx 6.28318530717958648$ ενώ αυτή της εξωτερικής δύναμης $T = 2\pi/\omega = \pi \approx 3.14159265358979324$. Το σύστημα για $A < A_c$ με $A_c \approx 0.18$ έχει σταθερό ελκυστή το σημείο $(\theta, \dot{\theta}) = (0, 0)$ ενώ για $A_c < A < 0.71$ ο ελκυστής είναι κλειστή καμπύλη. Η περίοδος της ταλάντωσης βρίσκεται να είναι διπλάσια αυτής της εξωτερικής δύναμης. Για $0.72 < A < 0.79$ ο ελκυστής είναι ανοιχτή καμπύλη μια και το εκκρεμές εκτελεί ολόκληρους κύκλους στη σταθερή του κατάσταση. Η περίοδος στο διάστημα αυτό γίνεται ίση με αυτή

της εξωτερικής δύναμης. Για $0.79 < \lesssim 1.033$ η περίοδος διπλασιάζεται διαδοχικά για κρίσιμες τιμές του A, η τροχία όμως συνεχίζει να είναι περιοδική. Για μεγαλύτερες τιμές του A η τροχιά παύει να είναι περιοδική και το σύστημα έχει χαοτική συμπεριφορά. Για $A \approx 3.1$ βρίσκουμε το σύστημα να έχει πάλι περιοδική κίνηση ενώ για $\approx 3.8 - 4.448$ να έχουμε το φανόμενο διπλασιαμού της περιόδου. Για $A \approx 4.4489$ έχουμε καθαρή χαοτική συμπεριφορά κ.ο.κ. Τα αποτελέσματα αυτά περιγράφονται στα Σχήματα 3.27–3.29.



Σχήμα 3.27: Τροχιά στο χώρο των φάσεων για το εκκρεμές με απόσβεση και εξωτερική δύναμη. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 1.0$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.2$ και $A = 0.60, 0.72, 0.85, 1.02$. Παρατηρούμε το φαινόμενο του διπλασιασμού της περιόδου.

Για την ανάλυση της συμπεριφοράς του εκκρεμούς και κυρίως για τη διευκόλυνση της διάκρισης μεταξύ περιοδικής και χαοτικής συμπεριφοράς μπορεί κανείς να μελετήσει τα λεγόμενα διαγράμματα Poinaré. Στα διαγράμματα αυτά τοποθετούμε ένα σημείο στο χώρο των φάσεων κάθε φορά που ο χρόνος είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της περιόδου της εξωτερικής δύναμης. Με τον τρόπο αυτό αν η κίνηση είναι περιοδική με περίοδο ίση με την περίοδο της εξωτερικής δύναμης θα έχουμε ένα σημείο στο διάγραμμα και γενικότερα θα έχουμε n σημεία αν η περίοδος είναι n–πολλαπλάσιο της $T = 2\pi/\omega$. Οπότε κανείς περιμένει όταν παρατηρήται το φαινόμενο διπλασιασμού της περίοδου, το διάγραμμα



Σχήμα 3.28: Τροχιά στο χώρο των φάσεων για το εκκρεμές με απόσβεση και εξωτερική δύναμη. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 1.0$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.2$ και $A = 1.031, 1.033, 1.04, 1.4$. Παρατηρούμε την εμφάνιση χαοτικής συμπεριφοράς.

Poincaré να αποκτά επί πλέον μεμονομένα σημεία ενώ όταν η συμπεριφορά είναι χαοτική, τα σημεία να ανήκουν σε έναν υπόχωρο του χώρου των φάσεων που να έχει πολυπλοκότερη δομή. Αυτό μπορούμε εύκολα να το προγραμματίσουμε στον κώδικά μας στο `fdo.f` ή εναλλακτικά να πάρουμε τη σχετική πληροφορία από το αρχείο εξόδου `fdo.dat` με το πρόγραμμα `awk` το οποίο τρέχουμε από τη γραμμή εντολών[9]:

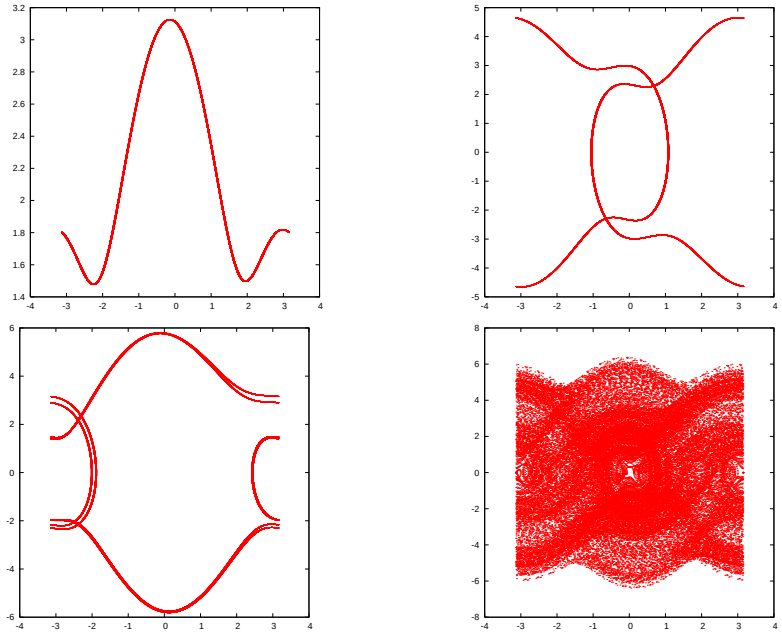
```
awk -v o=$omega -v s=$STEPS -v tf=$TF \
 'BEGIN{T=6.283185307179/o;dt=tf/s;} $1%T<dt{print $2,$3}' fdp.dat
```

όπου `$omega`, `$STEPS`, `$TF` οι τιμές της κυκλικής συχνότητας ω, αριθμού βημάτων ολοκλήρωσης και τελικού χρόνου t_f[10]. Στο πρόγραμμα υπολογίζουμε την περίοδο `T` και το βήμα χρόνου `dt`. Στη συνέχεια τυπώνομε εκείνες τις γραμμές του αρχείου των οποίων ο χρόνος είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της περιόδου με ακρίβεια χρόνου `dt`[11]. Αυτό γίνεται με

[9] Η εντολή μπορεί να γραφτεί σε μία γραμμή χωρίς το τελικό \ της πρώτης γραμμής

[10] Αντικαταστήστε με απλές αριθμητικές τιμές αν δεν ξέρετε να χρησιμοποιήτε μεταβλητές φλοιού.

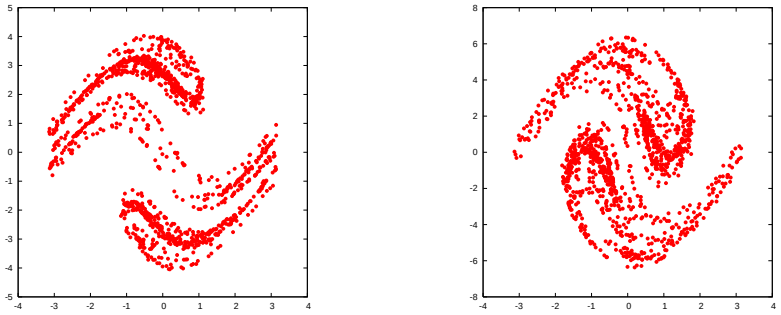
[11] Φυσικά αυτό κάνει τα μεμονομένα σημεία να γίνονται συγκεχυμένα στο διάγραμμα Poincaré.



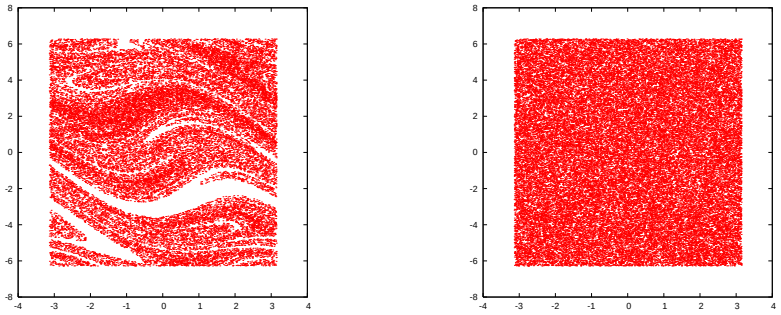
Σχήμα 3.29: Τροχιά στο χώρο των φάσεων για το εκκρεμές με απόσβεση και εξωτερική δύναμη. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 1.0$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.2$ και $A = 1.568, 3.8, 4.44, 4.5$. Παρατηρούμε την παύση και επανεμφάνιση χαοτικής συμπεριφοράς.

την πράξη modulo `$1 % T < dt` που είναι `TRUE` όταν το υπόλοιπο της διαίρεσης της πρώτης στήλης (`$1`) του αρχείου `fdo.dat` έχει υπόλοιπο διαίρεσης με την περίοδο `T` μικρότερο από `dt`. Τα αποτελέσματα για τη χαοτική φάση φαίνονται στο Σχήμα 3.30.

Κλείνουμε τη μελέτη μας με την παρουσίαση μιας ακόμα έννοιας που μας βοηθάει στην ανάλυση τβν ιδιοτήτων του εκκρεμούς. Αυτή είναι η έννοια της "λεκάνης του ελκυστή" (basin of an attractor) η οποία είναι το σύνολο των αρχικών συνθηκών στο χώρο των φάσεων που οδηγούν το σύστημα στο συγκεκριμένο ελκυστή. Στην περίπτωσή μας το εκκρεμές για $A > 0.79$ εκτελεί κυκλική κίνηση είτε με θετική είτε με αρνητική φορά (μετα την παρέλευση της παροδικής φάσης φυσικά) η οποίες αποτελούν τους δύο ελκυστές του συστήματος. Παίρνοντας ένα μεγάλο δείγμα από αρχικές συνθήκες και σημειώνοντας το πρόσημο της γωνιακής ταχύτητας μετά την παρέλευση της παροδικής φάσης παίρνουμε το Σχήμα 3.31. Στην περιοδική φάση διακρίνουμε περιοχές, των οποίων τα περιγράμματα δεν είναι καθαρά, οι οποίες δεν οδηγούν στο συγκεκριμένο ελκυστή.



Σχήμα 3.30: Διάγραμμα Poincaré για το εκκρεμές με απόσβεση και εξωτερική δύναμη όταν παρουσιάζει χαοτική συμπεριφορά. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 1.0$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.2$ και $A = 1.4, 4.5$.



Σχήμα 3.31: Basin of attractor για το εκκρεμές με απόσβεση και εξωτερική δύναμη. Έχουμε πάρει $\omega_0 = 1.0$, $\omega = 2.0$, $\gamma = 0.2$ και $A = 0.85, 1.4$. Διακρίνουμε την περιοδική από τη χαοτική συμπεριφορά.

3.7 Παράρτημα: Στη Μέθοδο Euler–Verlet

Η Σχέσεις (3.11) προκύπτουν από το ανάπτυγμα κατά Taylor

$$\begin{aligned}
\theta(t+\Delta t) &= \theta(t) + (\Delta t)\theta'(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\theta''(t) + \frac{(\Delta t)^3}{3!}\theta'''(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\
\theta(t-\Delta t) &= \theta(t) - (\Delta t)\theta'(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\theta''(t) - \frac{(\Delta t)^3}{3!}\theta'''(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4)\,.
\end{aligned}$$

Προσθέτοντας και αφαιρώντας κατά μέλη παίρνουμε

$$\begin{aligned}
\theta(t+\Delta t) + \theta(t-\Delta t) &= 2\theta(t) + (\Delta t)^2\theta''(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\
\theta(t+\Delta t) - \theta(t-\Delta t) &= 2(\Delta t)\theta'(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^3)
\end{aligned} \tag{3.35}$$

που δίνουν

$$\begin{aligned} \theta(t+\Delta t) &= 2\theta(t) - \theta(t-\Delta t) + (\Delta t)^2\alpha(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ \omega(t) &= \frac{\theta(t+\Delta t) - \theta(t-\Delta t)}{2(\Delta t)} + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \end{aligned} \tag{3.36}$$

που είναι οι σχέσεις (3.11) .

Στις προσομοιώσεις το σημαντικό είναι το συνολικό σφάλμα που συσσωρεύτεται μετά από τα $N-1$ βήματα της ολοκλήρωσης. Ειδικά για τη συγκεκριμένη μέθοδο πρέπει να δούμε τα σφάλματα που συσσωρεύονται ιδιαίτερα προσεκτικά:

- Το σφάλμα στην ταχύτητα $\omega(t)$ δε συσσωρεύεται γιατί υπολογίζεται από τη *διαφορά* των θέσεων $\theta(t+\Delta t) - \theta(t-\Delta t)$.

- Στη θέση το σφάλμα συσσωρεύεται ως εξής: Έστω $\delta\theta(t)$ το *συνολικό* σφάλμα που έχει συσσωρευτεί από την ολοκλήρωση από χρόνο t_0 έως t. Τότε σύμφωνα με τα αναπτύγματα (3.36) το σφάλμα στο πρώτο βήμα είναι $\delta\theta(t_0+\Delta t) = \mathcal{O}((\Delta t)^4)$. Τότε[12]

$$\begin{aligned} \theta(t_0+2\Delta t) &= 2\theta(t_0+\Delta t) - \theta(t_0) + \Delta t^2\alpha(t_0+\Delta t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \Rightarrow \\ \delta\theta(t_0+2\Delta t) &= 2\delta\theta(t_0+\Delta t) - \delta\theta(t_0) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ &= 2\mathcal{O}((\Delta t)^4) - 0 + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ &= 3\mathcal{O}((\Delta t)^4) \end{aligned}$$

  Στα επόμενα βήματα παίρνουμε

$$\begin{aligned} \theta(t_0+3\Delta t) &= 2\theta(t_0+2\Delta t) - \theta(t_0+\Delta t) + \Delta t^2\alpha(t_0+2\Delta t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \Rightarrow \\ \delta\theta(t_0+3\Delta t) &= 2\delta\theta(t_0+2\Delta t) - \delta\theta(t_0+\Delta t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ &= 6\mathcal{O}((\Delta t)^4) - \mathcal{O}((\Delta t)^4) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ &= 6\mathcal{O}((\Delta t)^4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \theta(t_0+4\Delta t) &= 2\theta(t_0+3\Delta t) - \theta(t_0+2\Delta t) + \Delta t^2\alpha(t_0+3\Delta t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \Rightarrow \\ \delta\theta(t_0+4\Delta t) &= 2\delta\theta(t_0+3\Delta t) - \delta\theta(t_0+2\Delta t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ &= 12\mathcal{O}((\Delta t)^4) - 3\mathcal{O}((\Delta t)^4) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\ &= 10\mathcal{O}((\Delta t)^4) \end{aligned}$$

[12]Θυμίζουμε ότι η επιτάχυνση $\alpha(t)$ δίνεται, οπότε $\delta\alpha(t) = 0$.

Και επαγωγικά, αν $\delta\theta(t_0+(n-1)\Delta t) = \frac{(n-1)n}{2}\mathcal{O}((\Delta t)^4)$ στο επόμενο βήμα παίρνουμε

$$\begin{aligned}
\theta(t_0+n\Delta t) &= 2\theta(t_0+(n-1)\Delta t) - \theta(t_0+(n-2)\Delta t) + \Delta t^2\alpha(t_0+(n-1)\Delta t) \\
&\quad +\mathcal{O}((\Delta t)^4) \Rightarrow \\
\delta\theta(t_0+n\Delta t) &= 2\delta\theta(t_0+(n-1)\Delta t) - \delta\theta(t_0+(n-2)\Delta t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\
&= 2\frac{(n-1)n}{2}\mathcal{O}((\Delta t)^4) - \frac{(n-2)(n-1)}{2}\mathcal{O}((\Delta t)^4) + \mathcal{O}((\Delta t)^4) \\
&= \frac{n(n+1)}{2}\mathcal{O}((\Delta t)^4)
\end{aligned}$$

Άρα τελικά

$$\delta\theta(t_0+n\Delta t) = \frac{n(n+1)}{2}\mathcal{O}((\Delta t)^4) \sim \frac{1}{\Delta t^2}\mathcal{O}((\Delta t)^4) \sim \mathcal{O}((\Delta t)^2) \quad (3.37)$$

Άρα το ολικό σφάλμα είναι $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$.

Για πληρότητα αναφέρουμε και τον αλγόριθμο Velocity Verlet ή μέθοδο Leapfrog. Στην περίπτωση αυτη χρησιμοποιούμε ρητά την ταχύτητα:

$$\begin{aligned}
\theta_{n+1} &= \theta_n + \omega_n\Delta t + \frac{1}{2}\alpha_n\Delta t^2 \\
\omega_{n+\frac{1}{2}} &= \omega_n + \frac{1}{2}\alpha_n\Delta t \\
\omega_{n+1} &= \omega_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\alpha_{n+1}\Delta t\,. \qquad (3.38)
\end{aligned}$$

Στο τελευταίο βήμα χρειαζόμαστε την επιτάχυνση α_{n+1} οπότε πρέπει αυτή να εξαρτάται μόνο από τη θέση θ_{n+1} και όχι από την ταχύτητα.

Οι μέθοδοι Verlet είναι δημοφιλείς σε προσομοιώσεις molecular dynamics, κυρίως συστημάτων με πολλά σωμάτια. Έχουν το ιδιαίτερο προσόν ότι υλοποιούνται σχετικά εύκολα οι περιορισμοί (constraints) στους οποίους υπόκειται τα σωματίδια που αποτελούν το σύστημα.

3.7.1 Παράρτημα: Runge–Kutta 2ης τάξης

Στην παράγραφο αυτή θα δείξουμε με δύο τρόπους γιατί η επιλογή του ενδιάμεσου σημείου 2 στην Εξίσωση (3.17) μειώνει το σφάλμα κατά μία δύναμη του βήματος h. Όπως θα φανεί, η επιλογή του μέσου του διαστήματος για το σημείο 2 δεν είναι τυχαία (οπότε λ.χ. το σημείο με $t = t_n+0.4h$ δεν θα είχε το ίδιο αποτέλεσμα). Πράγματι από τη σχέση

$$\frac{dx}{dt} = f(t,x) \Rightarrow x_{n+1} = x_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t,x)\,dx\,. \qquad (3.39)$$

Αναπτύσσοντας κατά Taylor γύρω από το σημείο $(t_{n+1/2}, x_{n+1/2})$ παίρνουμε

$$f(t,x) = f(t_{n+1/2}, x_{n+1/2}) + (t - t_{n+1/2})\frac{df}{dt}(t_{n+1/2}) + \mathcal{O}(h^2)\,. \tag{3.40}$$

Οπότε

$$\begin{aligned}
&\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t,x)\,dx \\
&= f(t_{n+1/2}, x_{n+1/2})(t_{n+1} - t_n) + \frac{df}{dt}(t_{n+1/2})\,\frac{(t - t_{n+1/2})^2}{2}\Bigg|_{t_n}^{t_{n+1}} \\
&\quad + \mathcal{O}(h^2)(t_{n+1} - t_n) \\
&= f(t_{n+1/2}, x_{n+1/2})h + \frac{df}{dt}(t_{n+1/2})\left\{\frac{(t_{n+1} - t_{n+1/2})^2}{2} - \frac{(t_n - t_{n+1/2})^2}{2}\right\} \\
&\quad + \mathcal{O}(h^2)h \\
&= f(t_{n+1/2}, x_{n+1/2})h + \frac{df}{dt}(t_{n+1/2})\left\{\frac{h^2}{2} - \frac{(-h)^2}{2}\right\} + \mathcal{O}(h^3) \\
&= f(t_{n+1/2}, x_{n+1/2})h + \mathcal{O}(h^3)\,.
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Παρατηρούμε ότι για την εξαφάνιση του όρου $\mathcal{O}(h)$ είναι αναγκαία η τοποθέτηση του βοηθητικού σημείου στο χρόνο $t_{n+1/2}$.

Η επιλογή αυτή δεν είναι μοναδική. Αυτό μπορεί να φανεί και από μια διαφορετική ανάλυση του αναπτύγματος κατά Taylor. Αναπτύσσοντας τώρα γύρω από το σημείο (t_n, x_n) παίρνουμε

$$\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + (t_{n+1} - t_n)\frac{dx_n}{dt} + \frac{1}{2}(t_{n+1} - t_n)^2\frac{d^2x_n}{dt^2} + \mathcal{O}(h^3) \\
&= x_n + hf_n + \frac{h^2}{2}\frac{df_n}{dt} + \mathcal{O}(h^3) \\
&= x_n + hf_n + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} + \frac{\partial f_n}{\partial x}\frac{dx_n}{dt}\right) + \mathcal{O}(h^3) \\
&= x_n + hf_n + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} + \frac{\partial f_n}{\partial x}f_n\right) + \mathcal{O}(h^3)\,,
\end{aligned} \tag{3.42}$$

όπου για συντομία θέσαμε $f_n \equiv f(t_n, x_n)$, $\frac{dx_n}{dt} \equiv \frac{dx}{dt}(x_n)$ κ.ο.κ. Ορίζουμε

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_n, x_n) = f_n \\
k_2 &= f(t_n + ah, x_n + bhk_1) \\
x_{n+1} &= x_n + h(c_1k_1 + c_2k_2)\,.
\end{aligned} \tag{3.43}$$

και θα προσδιορίσουμε τις συνθήκες έτσι ώστε το σφάλμα οι όροι $\mathcal{O}(h^2)$ της τελευταίας εξίσωσης να ταυτίζονται με αυτούς της (3.42) . Αναπτύσσοντας την k_2 παίρνουμε

$$\begin{aligned} k_2 &= f(t_n + ah, x_n + bhk_1) \\ &= f(t_n, x_n + bhk_1) + ha\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, x_n + bhk_1) + \mathcal{O}(h^2) \\ &= f(t_n, x_n) + hbk_1\frac{\partial f}{\partial x}(t_n, x_n) + ha\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, x_n) + \mathcal{O}(h^2) \\ &= f_n + h\left\{a\frac{\partial f_n}{\partial t} + bk_1\frac{\partial f_n}{\partial x}\right\} + \mathcal{O}(h^2) \\ &= f_n + h\left\{a\frac{\partial f_n}{\partial t} + bf_n\frac{\partial f_n}{\partial x}\right\} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \tag{3.44}$$

Αντικαθιστώντας στην (3.43) παίρνουμε

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + h(c_1k_1 + c_2k_2) \\ &= x_n + h\left\{c_1f_n + c_2f_n + c_2h\left(a\frac{\partial f_n}{\partial t} + bf_n\frac{\partial f_n}{\partial x}\right) + \mathcal{O}(h^2)\right\} \\ &= x_n + h(c_1 + c_2)f_n + \frac{h^2}{2}\left((2c_2a)\frac{\partial f_n}{\partial t} + (2c_2b)f_n\frac{\partial f_n}{\partial x}\right) \\ &\quad + \mathcal{O}(h^3)\,. \end{aligned} \tag{3.45}$$

Αρκεί λοιπόν να επιλέξουμε

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= 1 \\ 2c_2a &= 1 \\ 2c_2b &= 1\,. \end{aligned} \tag{3.46}$$

Επιλογή $c_1 = 0$, $c_2 = 1$, $a = b = 1/2$ μάς δίνει τη μέθοδο (3.19) . Άλλες επιλογές στη βιβλιογραφία είναι $c_2 = 1/2$ και $c_2 = 3/4$.

3.8 Ασκήσεις

3.1 Αποδείξτε ότι το συνολικό σφάλμα στη μέθοδο Euler-Cromer είναι τάξης Δt

3.2 Αναπαράγετε τα αποτελέσματα των σχημάτων 3.11–3.18

3.3 Βελτιώστε τον υπολογισμό του χρόνου στα προγράμματα των μεθόδων Euler, Euler-Cromer, Euler-Verlet, Runge-Kutta ώστε να μήν έχουμε προσθετική συσσώρευση σφαλμάτων στο χρόνο όταν η παράμετρος `h` είναι πολύ μικρή (λ.χ. στις εντολές `T(i)=T(i-1)+h`). Επαναλάβατε την ανάλυση της προηγούμενης άσκησης.

3.4 Μεταβάλλετε τα προγράμματα των μεθόδων Euler, Euler-Cromer, Euler-Verlet, Runge-Kutta ώστε `REAL`→`REAL*8` (προσοχή στις σταθερές: να της ορίσετε ρητά να είναι διπλής ακρίβειας προσθέτοντας τον εκθέτη `D0`). Επαναλάβατε την ανάλυση της προηγούμενης άσκησης.

3.5 Να επαναλάβετε τη σύγκριση των μεθόδων Euler, Euler-Cromer, Euler-Verlet, Runge-Kutta για τα παρακάτω συστήματα των οποίων η αναλυτική λύση είναι γνωστή:

(α′) Σωματίδιο που πέφτει ελεύθερα στο ομογενές πεδίο βαρύτητας. Θεωρήστε $v(0) = 0$, $m = 1$, $g = 10$.

(β′) Σωματίδιο που πέφτει στο ομογενές πεδίο βαρύτητας μέσα σε ρευστό από το οποίο δέχεται δύναμη $F = -kv$. Θεωρήστε $v(0) = 0$, $m = 1$, $g = 10$ $k = 0.1, 1.0, 2.0$. Υπολογίστε την ορική ταχύτητα του σωματιδίου αριθμητικά και συγκρίνετέ τη με τη θεωρητική της τιμή.

(γ′) Επαναλάβετε για δύναμη αντίστασης $F = -kv^2$.

3.6 Μελετήστε το σύστημα του αρμονικού ταλαντωτή με απόσβεση

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0\,. \tag{3.47}$$

Πάρτε $\omega_0 = 3.145$, $\gamma = 0.5$ και υπολογίστε την ενέργεια συναρτήσει του χρόνου. Είναι η τιμή της μονοτονική? Γιατί? (Δείξτε ότι $d(E/m)/dt = -\gamma v^2$). Επαναλάβατε για $\gamma = 4, 5, 6, 7, 8$. Πότε το σύστημα ταλαντώνεται και πότε όχι? Υπολογίστε αριθμητικά την κρίσιμη τιμή του γ για την οποία το σύστημα μετατρέπεται από ταλαντούμενο σε μή ταλαντούμενο. Συγκρίνετε το αποτέλεσμά σας με την αναλυτική λύση.

3.7 Αναπαράγετε τα αποτελέσματα που οδηγούν στα Σχήματα 3.19–3.22.

3.8 Αναπαράγετε τα αποτελέσματα που οδηγούν στα Σχήματα 3.23–3.26. Υπολογίστε αριθμητικά τη φάση $\delta(\omega)$ και επιβεβαιώστε τη Σχέση (3.33) .

3.9 Θεωρήσετε το μοντέλο για μια κούνια να είναι ο αρμονικός ταλαντωτής με απόσβεση ο οποίος υπόκειται σε περιοδική δύναμη η οποία είναι στιγμιαία ώθηση συχνότητας ω. Ορίστε το "στιγμιαία" να είναι η ώθηση να δίνει επιτάχυνση a_0 το κατάλληλο χρονικό διάστημα διάρκειας Δt και 0 στα υπόλοιπα βήματα. Υπολογίστε το πλάτος $x_0(\omega)$ για $\omega_0 = 3.145$ και $\gamma = 0.5$.

3.10 Θεωρήστε την εξωτερική δύναμη να είναι το "μισό συνημίτονο" δίνοντας επιτάχυνση στον ο αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση

$$a(t) = \begin{cases} a_0 \cos \omega t & \cos \omega t > 0 \\ 0 & \cos \omega t \leq 0 \end{cases}$$

Μελετήστε τη μετάβαση του συστήματος στη σταθερή κατάσταση και υπολογίστε το πλάτος $x_0(\omega)$ για $\omega_0 = 3.145$ και $\gamma = 0.5$.

3.11 Θεωρήστε την εξωτερική δύναμη να δίνει επιτάχυνση στον ο αρμονικό ταλαντωτή με απόσβεση

$$a(t) = \frac{1}{\pi} + \frac{1}{2} \cos \omega + \frac{2}{3\pi} \cos 2\omega t - \frac{2}{15\pi} \cos 4\omega t$$

Μελετήστε τη μετάβαση του συστήματος στη σταθερή κατάσταση και υπολογίστε το πλάτος $x_0(\omega)$ για $\omega_0 = 3.145$ και $\gamma = 0.5$. Συγκρίνετε τα αποτελέσματά σας με αυτά της προηγούμενης άσκησης. Τι συμπεραίνετε?

3.12 Γράψτε ένα πρόγραμμα που να προσομοιώνει ταυτόχρονα N όμοιους αρμονικούς ταλαντωτές. Πάρτε $N = 20$ και δώστε τυχαίες αρχικές συνθήκες σε κάθε ένα από αυτούς και παρακολουθήστε τις τροχιές τους στο χώρο των φάσεων. Παρατηρήστε αν οι τροχιές τέμνονται και εξηγήστε τα αποτελέσματά σας.

3.13 Στην προηγούμενη άσκηση τοποθετήστε τους $N = 20$ αρμονικούς ταλαντωτές στο χώρο των φάσεων σε ένα μικρό τετράγωνο με κέντρο την αρχή των αξόνων. Παρακολουθήστε την εξέλιξη του συστήματος στο χρόνο. Αλλάζει το σχήμα με το χρόνο? Αλλάζει το εμβαδόν? Εξηγήστε...

3.14 Επαναλάβατε την προηγούμενη άσκηση όταν υπάρχει απόσβεση με $\gamma = 0.5$. Πάρτε $\omega_0 = 3.145$.

3.15 Στην περίπτωση του εκκρεμούς με απόσβεση και εξωτερική δύναμη, πάρτε $\omega = 2$, $\omega_0 = 1.0$, $\gamma = 0.2$ μελετήστε την παροδική φάση στα διαγράμματα $\theta(t)$, $\dot{\theta}(t)$ για $A = 0.1, 0.5, 0.79, 0.85, 1.03, 1.4$.

3.16 Στην περίπτωση του εκκρεμούς με απόσβεση και εξωτερική δύναμη, πάρτε $\omega = 2$, $\omega_0 = 1.0$, $\gamma = 0.2$ μελετήστε τις τροχιές στο χώρο της φάσης για $A = 0.1$, 0.19, 0.21, 0.25, 0.5, 0.71, 0.79, 0.85, 1.02, 1.031, 1.033, 1.05, 1.08, 1.1, 1.4, 1.8, 3.1, 3.5, 3.8, 4.2, 4.42, 4.44, 4.445, 4.447, 4.4488.

3.17 Αναπαράγετε τα Σχήματα 3.30.

3.18 Αναπαράγετε τα Σχήματα 3.31.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Κίνηση στο Επίπεδο

4.1 Runge–Kutta στις δύο διαστάσεις.

Στις δύο διαστάσεις, το πρόβλημα αρχικών τιμών που έχουμε να λύσουμε δίνεται από το σύστημα (3.6)

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x & \frac{dv_x}{dt} &= a_x(t,x,v_x,y,v_y) \\ \frac{dy}{dt} &= v_y & \frac{dv_y}{dt} &= a_y(t,x,v_x,y,v_y)\,. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Ο κώδικας που θα τρέχει τη μέθοδο Runge–Kutta 4ης τάξης προκύπτει με μικρές μετατροπές του κώδικα `rk.f`. Κατ' αρχήν για διευκόλυνση της μελέτης πολλών δυνάμεων ξεχωρίζουμε τον κοινό κώδικα με το user interface και τον αλγόριθμο της μεθόδου από τις συναρτήσεις της επιτάχυνσης που αλλάζουν ανάλογα με τη δύναμη σε ξεχωριστά αρχεία. Στο αρχείο `rk2.f` τοποθετούμε τα πρώτα και σε αρχείο `rk_XXX.f` τα δεύτερα. `XXX` είναι ακολουθία χαρακτήρων που ταυτοποιούν τη δύναμη λ.χ. `rk2_hoc.f` έχει την επιτάχυνση του αρμονικού ταλαντωτή, `rk2_g.f` την επιτάχυνση από ομογενές πεδίο βαρύτητας $\vec{g} = -g\hat{j}$ κ.ο.κ.

Στον κώδικα στο `rk2.f` κάνουμε μερικές μικροαλλαγές στο user interface. Τοποθετούμε δυο απροσδιόριστες σταθερές σύζευξης `k1, k2` που μπορούν να δοθούν διαδραστικά από το χρήστη και να προσδιορίσουν το μέγεθος της δύναμης που ασκήται κάθε φορά στο σώμα. Τοποθετούνται σε `common block`

```
double precision k1,k2
common /couplings/k1,k2
```

το οποίο θα "φαίνεται" και από τις συναρτήσεις επιτάχυνσης `f3, f4` και της ενέργειας `energy`. Ο χρήστης πρέπει τώρα να παρέχει τις αρχικές συνθήκες και για τις δύο συντεταγμένες στο επίπεδο x, y. Αυτές

αντιστοιχούν στις μεταβλητές X10 $\leftrightarrow x_0$, X20 $\leftrightarrow y_0$, V10 $\leftrightarrow v_{x0}$, V20 $\leftrightarrow v_{y0}$, ενώ οι συναρτήσεις του χρόνου αντιστοιχούν στα arrays X1(P) $\leftrightarrow x(t)$, X2(P) $\leftrightarrow y(t)$, V1(P) $\leftrightarrow v_x(t)$, V2(P) $\leftrightarrow v_y(t)$. Η ολοκλήρωση γίνεται όπως και πρίν καλώντας

```
call RK(T,X1,X2,V1,V2,T0,TF,X10,X20,V10,V20,STEPS,PSIZE)
```

και στο αρχείο rk2.dat αποθηκεύουμε τα αποτελέσματα μαζί με τη συνολική μηχανική ενέργεια που υπολογίζεται από τη συνάρτηση energy(t,x1,x2,v1,v2) η οποία βρίσκεται στο ίδιο αρχείο με τις επιταχύνσεις μια και η μορφή της εξαρτάται από τον τύπο της δύναμης:

```
open(unit=11,file='rk2.dat')
do i=1,STEPS+1
 write(11,*)T(i),X1(i),X2(i),V1(i),V2(i),
*      energy(T(i),X1(i),X2(i),V1(i),V2(i))
enddo
```

Τέλος αλλαγές πρέπει να γίνουν στον κώδικα της βασικής υπορουτίνας RKSTEP(t,x1,x2,x3,x4,dt) λόγω του μεγαλύτερου αριθμού μεταβλητών στο πρόβλημα. Παραθέτουμε ολόκληρο τον κώδικα για να διευκολύνουμε τον αναγνώστη[1]:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to solve a 4 ODE system using Runge-Kutta Method
C     User must supply derivatives
C     dx1/dt=f1(t,x1,x2,x3,x4) dx2/dt=f2(t,x1,x2,x3,x4)
C     dx3/dt=f3(t,x1,x2,x3,x4) dx4/dt=f4(t,x1,x2,x3,x4)
C     as real*8 functions
C     Output is written in file rk2.dat
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program rk2_solve
      implicit none
      integer P
      parameter(P=510000)
      double precision T0,TF,X10,X20,V10,V20
      integer STEPS,PSIZE
      double precision T(P),X1(P),X2(P),V1(P),V2(P)
      integer i
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
```

[1] double precision είναι συνώνυμο με real*8.

```
      double precision energy

C     Input:
      print *,'Runge-Kutta Method for 4-ODEs Integration'
      print *,'Enter coupling constants:'
      read(5,*) k1,k2
      print *,'k1= ',k1,' k2= ',k2
      print *,'Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,V10,V20:'
      read(5,*) STEPS,T0,TF,X10,X20,V10,V20
      print *,'No. Steps= ',STEPS
      print *,'Time: Initial T0 =',T0,' Final TF=',TF
      print *,'           X1(T0)=',X10,' X2(T0)=',X20
      print *,'           V1(T0)=',V10,' V2(T0)=',V20

C     The Calculation:
      PSIZE=P
      call RK(T,X1,X2,V1,V2,T0,TF,X10,X20,V10,V20,STEPS,PSIZE)

C     Output:
      open(unit=11,file='rk2.dat')
      do i=1,STEPS+1
       write(11,*)T(i),X1(i),X2(i),V1(i),V2(i),
     *      energy(T(i),X1(i),X2(i),V1(i),V2(i))
      enddo
      close(11)

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     The velocity functions f1,f2(t,x1,x2,v1,v2)
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      double precision function f1(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      f1=v1           !dx1/dt= v1
      end

      double precision function f2(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      f2=v2           !dx2/dt= v2
```

```
      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C    RK(T,X1,X2,V1,V2,T0,TF,X10,X20,V10,V20,STEPS,PSIZE) is the driver
C     for the Runge-Kutta integration routine RKSTEP
C     Input: Initial and final times T0,T1
C            Initial values at t=T0  X10,X20,V10,V20
C            Number of steps of integration STEPS
C            Size of arrays T,X1,X2,V1,V2
C     Output: real arrays T(PSIZE),X1(PSIZE),X2(PSIZE),
C                                  V1(PSIZE),V2(PSIZE) where
C     T(1) = T0 X1(1) = X10 X2(1) = X20 V1(1) = V10 V2(1) = V20
C               X1(i) = X1(at t=T(i)) X2(i) = X2(at t=T(i))
C               V1(i) = V1(at t=T(i)) V2(i) = V2(at t=T(i))
C     T(STEPS+1)=TF
C     Therefore we must have PSIZE>STEPS
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
    subroutine RK(T,X1,X2,V1,V2,T0,TF,X10,X20,V10,V20,STEPS,PSIZE)
      implicit none
      integer STEPS,PSIZE
      double precision T (PSIZE),T0,TF
      double precision X1(PSIZE),X2(PSIZE),X10,X20
      double precision V1(PSIZE),V2(PSIZE),V10,V20
      double precision dt
    double precision TS,X1S,X2S !values of time and X1,X2 at given step
      double precision    V1S,V2S
      integer i

C     Some checks:
      if(STEPS .le. 1 )then
       print *,'rk: STEPS must be >= 1'
       stop
      endif
      if(STEPS .ge. PSIZE)then
       print *,'rk: STEPS must be < ',PSIZE
       stop
      endif

C     Initialize variables:
      dt    = (TF-T0)/STEPS
      T (1) = T0
```

```
      X1(1) = X10
      X2(1) = X20
      V1(1) = V10
      V2(1) = V20
      TS    = T0
      X1S   = X10
      X2S   = X20
      V1S   = V10
      V2S   = V20
C     Make RK steps: The arguments of RKSTEP are replaced with the new ones!
      do i=2,STEPS+1
       call RKSTEP(TS,X1S,X2S,V1S,V2S,dt)
       T(i)  = TS
       X1(i) = X1S
       X2(i) = X2S
       V1(i) = V1S
       V2(i) = V2S
      enddo

      end

C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Subroutine RKSTEP(t,x1,x2,dt)
C     Runge-Kutta Integration routine of ODE
C     dx1/dt=f1(t,x1,x2,x3,x4) dx2/dt=f2(t,x1,x2,x3,x4)
C     dx3/dt=f3(t,x1,x2,x3,x4) dx4/dt=f4(t,x1,x2,x3,x4)
C     User must supply derivative functions:
C     real function f1(t,x1,x2,x3,x4)
C     real function f2(t,x1,x2,x3,x4)
C     real function f3(t,x1,x2,x3,x4)
C     real function f4(t,x1,x2,x3,x4)
C     Given initial point (t,x1,x2) the routine advnaces it
C     by time dt.
C     Input : Inital time t    and function values x1,x2,x3,x4
C     Output: Final  time t+dt and function values x1,x2,x3,x4
C     Careful!: values of t,x1,x2,x3,x4 are overwritten...
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine RKSTEP(t,x1,x2,x3,x4,dt)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,x3,x4,dt
      double precision f1,f2,f3,f4
```

```
double precision k11,k12,k13,k14,k21,k22,k23,k24
double precision k31,k32,k33,k34,k41,k42,k43,k44
double precision h,h2,h6

h =dt                              !h =dt, integration step
h2=0.5D0*h                         !h2=h/2
h6=0.16666666666666666666D0*h      !h6=h/6

k11=f1(t,x1,x2,x3,x4)
k21=f2(t,x1,x2,x3,x4)
k31=f3(t,x1,x2,x3,x4)
k41=f4(t,x1,x2,x3,x4)

k12=f1(t+h2,x1+h2*k11,x2+h2*k21,x3+h2*k31,x4+h2*k41)
k22=f2(t+h2,x1+h2*k11,x2+h2*k21,x3+h2*k31,x4+h2*k41)
k32=f3(t+h2,x1+h2*k11,x2+h2*k21,x3+h2*k31,x4+h2*k41)
k42=f4(t+h2,x1+h2*k11,x2+h2*k21,x3+h2*k31,x4+h2*k41)

k13=f1(t+h2,x1+h2*k12,x2+h2*k22,x3+h2*k32,x4+h2*k42)
k23=f2(t+h2,x1+h2*k12,x2+h2*k22,x3+h2*k32,x4+h2*k42)
k33=f3(t+h2,x1+h2*k12,x2+h2*k22,x3+h2*k32,x4+h2*k42)
k43=f4(t+h2,x1+h2*k12,x2+h2*k22,x3+h2*k32,x4+h2*k42)

k14=f1(t+h ,x1+h *k13,x2+h *k23,x3+h *k33,x4+h2*k43)
k24=f2(t+h ,x1+h *k13,x2+h *k23,x3+h *k33,x4+h2*k43)
k34=f3(t+h ,x1+h *k13,x2+h *k23,x3+h *k33,x4+h2*k43)
k44=f4(t+h ,x1+h *k13,x2+h *k23,x3+h *k33,x4+h2*k43)

t =t+h
x1=x1+h6*(k11+2.0D0*(k12+k13)+k14)
x2=x2+h6*(k21+2.0D0*(k22+k23)+k24)
x3=x3+h6*(k31+2.0D0*(k32+k33)+k34)
x4=x4+h6*(k41+2.0D0*(k42+k43)+k44)

end
```

4.2 Βολές στο Βαρυτικό Πεδίο τησ Γης.

Θεωρούμε αρχικά σωματίδιο υπό την επίδραση δύναμης που του προσδίδει επιτάχυνση $\vec{g} = -mg\,\hat{j}$

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + v_{0x}t \\ y(t) &= y_0 + v_{0y}t - \frac{1}{2}gt^2 \\ v_x(t) &= v_{0x} \\ v_y(t) &= v_{0y} - gt \\ a_x(t) &= 0 \\ a_y(t) &= -g \end{aligned} \tag{4.2}$$

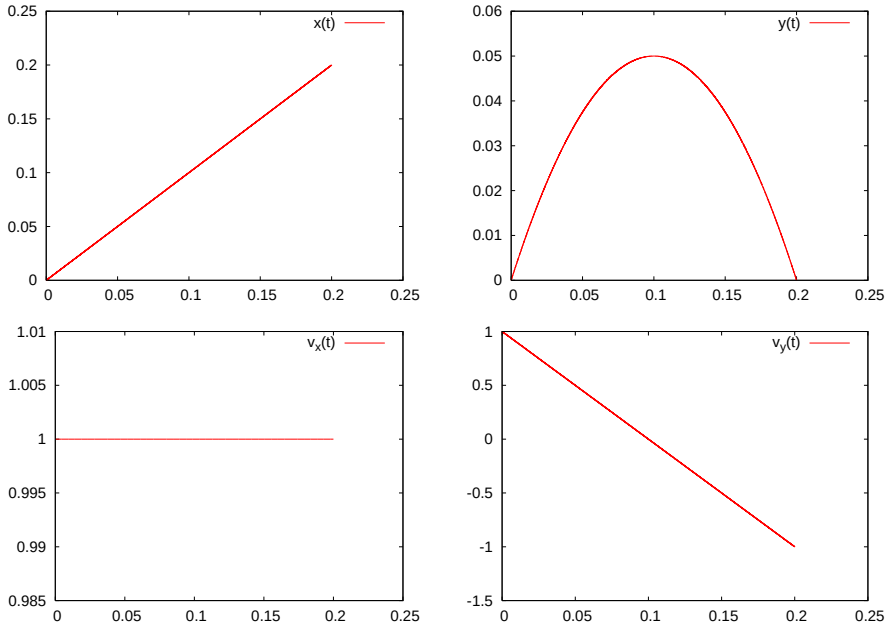
Το σωματίδιο, όπως γνωρίζουμε καλά, κινήται πάνω σε μια παραβολή στην οποία εμείς απλά διαλέγουμε το σημείο στο οποίο τοποθετείται αρχικά το σωμάτιο:

$$\begin{aligned} (y - y_0) &= \left(\frac{v_{0y}}{v_{0x}}\right)(x - x_0) - \frac{1}{2}\frac{g}{v_{0x}^2}(x - x_0)^2 \\ &= \tan\theta\,(x - x_0) - \frac{\tan^2\theta}{4h_{\max}}(x - x_0)^2\,, \end{aligned} \tag{4.3}$$

όπου $\tan\theta = v_{0y}/v_{0x}$ και $h_{\max}$ η γωνία υπό την οποία βάλλεται το σωμάτιο και το μέγιστο ύψος που φτάνει το σωμάτιο ως προς το αρχικό σημείο βολής.

Κωδικοποιούμε την επιτάχυνση $a_x(t) = 0$ $a_y(t) = -g$ ($a_x \leftrightarrow$ `f3` , $a_y \leftrightarrow$ `f4`) καθώς και τη συνολική μηχανική ενέργεια στο αρχείο `rk2_g.f`:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C    The acceleration functions f3,f4(t,x1,x2,v1,v2) provided by the user
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Free fall in constant gravitational field with
C     g = -k2
      double precision function f3(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      f3=0.0D0    !dx3/dt=dv1/dt=a1
      end
```

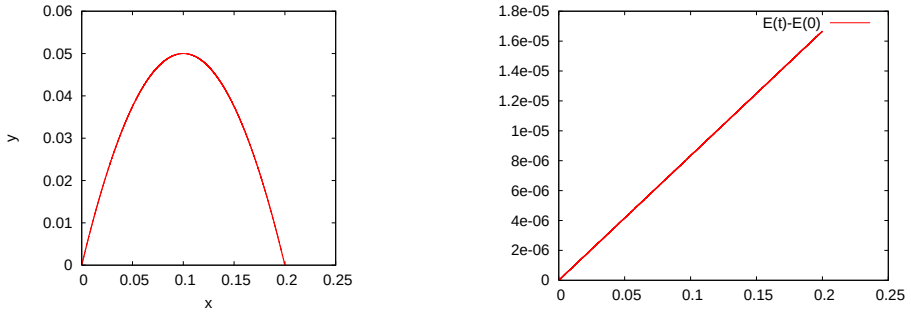


Σχήμα 4.1: Βολή στο βαρυτικό πεδίο με ένταση $\vec{g} = -10.0\hat{j}$ και αρχική ταχύτητα $\vec{v}_0 = \hat{i} + \hat{j}$. Δίνονται τα διαγράμματα $x(t)$, $y(t)$, $v_x(t)$, $v_y(t)$.

```
double precision function f4(t,x1,x2,v1,v2)
implicit none
double precision t,x1,x2,v1,v2
double precision k1,k2
common /couplings/k1,k2
f4=-k1   !dx4/dt=dv2/dt=a2
end

double precision function energy(t,x1,x2,v1,v2)
implicit none
double precision t,x1,x2,v1,v2
double precision k1,k2
common /couplings/k1,k2
energy = 0.5*(v1*v1+v2*v2) + k1*x2
end
```

Στη συνέχεια παραθέτουμε τη σειρά εντολών που δίνει ο χρήστης για να υπολογίσει την τροχιά

```
> f77 -O2 rk2.f rk2_g.f -o rk2
```



Σχήμα 4.2: Βολή στο βαρυτικό πεδίο με ένταση $\vec{g} = -10.0\hat{j}$ και αρχική ταχύτητα $\vec{v}_0 = \hat{i} + \hat{j}$. Φαίνεται η παραβολική τροχιά που ακολουθεί το σωμάτιο. Στο διπλανό σχήμα παρακολουθούμε την απόκλιση της μηχανικής ενέργειας του σωματιδίου από την αρχική της τιμή.

```
> ./rk2
 Runge-Kutta Method for 4-ODEs Integration
 Enter coupling constants:
10.0 0.0
 k1=    10.0000000000000       k2=    0.00000000000000
 Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,V10,V20:
20000 0.0 0.2 0.0 0.0 1.0 1.0
 No. Steps=        20000
 Time: Initial T0 =  0.00000000000000     Final TF= 0.200000000000000
        X1(T0)=  0.00000000000000     X2(T0)=  0.00000000000000
        V1(T0)=  1.00000000000000     V2(T0)=  1.00000000000000
```

Στη συνέχεια επεξεργαζόμαστε τα αποτελέσματά μας αναλύοντας τα δεδομένα από το αρχείο `rk2.dat` με το πρόγραμμα `gnuplot`:

```
> gnuplot
gnuplot> set terminal x11 1
gnuplot> plot "rk2.dat" using 1:2 with lines title "x(t)"
gnuplot> set terminal x11 2
gnuplot> plot "rk2.dat" using 1:3 with lines title "y(t)"
gnuplot> set terminal x11 3
gnuplot> plot "rk2.dat" using 1:4 with lines title "vx(t)"
gnuplot> set terminal x11 4
gnuplot> plot "rk2.dat" using 1:5 with lines title "vy(t)"
gnuplot> set terminal x11 5
gnuplot> plot "rk2.dat" using 1:($6-1.0) with lines title "E(t)-E(0)"
```

```
gnuplot> set terminal x11 6
gnuplot> set size square
gnuplot> set title "Trajectory"
gnuplot> plot "rk2.dat" using 2:3 with lines notit
```

Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήματα 4.1 και 4.2. Παρατηρούμε μικρή αύξηση της ενέργειας που μας δίνει και το μέτρο της ακρίβειας της μεθόδου.

Με τη βοήθεια του gnuplot μπορούμε να φτιάξουμε κινούμενα σχέδια της τροχιάς. Για το λόγο αυτό ομαδοποιούμε μερικές εντολές του gnuplot σε αρχείο σεναρίου, έστω στο rk2_animate.gpl

```
icount = icount+skip
plot  "<cat -n rk2.dat"  \
  using 3:($1<= icount ? $4: 1/0) with lines notitle
# pause 1
if(icount < nlines ) reread
```

Το παραπάνω αρχείο υποθέτει ότι όταν τρέξουμε το gnuplot έχουμε αρχικοποιήσει τις μεταβλητές `icount, skip, nlines` να είναι οι τιμές του αρχικού αριθμού γραμμών του αρχείου `rk2.dat` που θα μπουν στο διάγραμμα, ο αριθμός γραμμών που θα προστίθενται σε κάθε καινούργιο πλαίσιο που σχεδιάζεται στα κινούμενα σχέδια και ο συνολικός αριθμός γραμμών που περιέχει το αρχείο ώστε να σταματήσει η διαδικασία. Η ιδέα είναι ότι οι εντολές του αρχείου διαβάζονται από το gnuplot κάνοντας ένα plot και αν πληρήται το κριτήριο του `if` το αρχείο ξαναδιαβάζεται με την εντολή `reread`. Ας εξηγήσουμε την γραμμή με την εντολή `plot`: Το "αρχείο" `"<cat -n rk2.dat"` είναι το standard output της εντολής `cat -n rk2.dat` η οποία τυπώνει στο standard output το αρχείο `rk2.dat` βάζοντας στην πρώτη στήλη τον αριθμό γραμμής που διαβάζεται. Έτσι η εντολή `plot` διαβάζει δεδομένα στα οποία η πρώτη στήλη είναι ο αριθμός γραμμής, η δέυτερη ο χρόνος, η τρίτη η συντεταγμένη x, η τέταρτη η συντεταγμένη y κ.ο.κ. Η γραμμή

```
  using 3:($1<= icount ? $4: 1/0)
```

λέει να χρησιμοποιηθεί η 2η στήλη στον οριζόντιο άξονα και αν η πρώτη στήλη είναι μικρότερη από την τιμή της μεταβλητής `icount` να μπεί στον κατακόρυφο άξονα η τιμή της 4ης στήλης αλλιώς τίποτα (βάζοντας κάτι που δεν είναι νόμιμο, όπως διαίρεση με το 0 κάνει το gnuplot να αγνοήσει το συγκεκριμένο σημείο). Με τον τρόπο αυτό καθώς η τιμή της μεταβλητής `icount` αυξάνει τοποθετούμε στο διάγραμμα περισσότερα σημεία της τροχιάς δημιουργώντας την ψευδαίσθηση της κίνησης. τη

γραμμή με την εντολή pause την έχουμε βάλει σα σχόλιο. Αν τα κινούμενα είναι πολύ γρηγορα για σας, βγάλτε το χαρακτήρα του σχολίου # και αντικαταστήστε τη μονάδα με τον αριθμό δευτερολέπτων που θέλετε να σταματάει κάθε πλαίσιο. Για να χρησιμοποιήσουμε το σενάριο αυτό από το gnuplot δίνουμε τις εντολές

```
> gnuplot
gnuplot> icount = 10
gnuplot> skip   = 200
gnuplot> nlines = 20000
gnuplot> load "rk2_animate.gpl"
```

Τα παραπάνω σενάρια θα τα βρείτε στο συνοδευτικό λογισμικό του κεφαλαίου. Εκεί θα βρείτε και σενάρια φλοιού τα οποία θα σας βοηθήσουν να αυτοματοποιήσετε πολλές από τις εντολές που περιγράψαμε παραπάνω. Περιγράφουμε τη χρήση δύο από αυτών. Πρώτα το σενάριο rk2_animate.csh:

```
> rk2_animate.csh -h
Usage: rk2_animate.csh -t [sleep time] -d [skip points] <file>
Default file is rk2.dat
Other options:
   -x: set lower value in xrange
   -X: set lower value in xrange
   -y: set lower value in yrange
   -Y: set lower value in yrange
   -r: automatic determination of x-y range
> rk2_animate.csh -r -d 500 rk2.dat
```

Η τελευταία γραμμή πραγματοποιεί τα κινούμενα σχέδια με πλαίσια που κάθε φορά έχουν 500 παραπάνω σημεία, ενώ τα όρια των πλαισίων υπολογίζονται αυτόματα από το σενάριο με το διακόπτη -r. Ο διακόπτης -h δίνει σύντομες οδηγίες για τη χρήση του σεναρίου, μια σύμβαση που την ακολουθούμε συχνά στα σενάρια/προγράμματα που γράφουμε.

Ένα πιο πλήρες σενάριο που κάνει όλες τις δουλειές είναι το rk2.csh. Οδηγίες χρήσης παίρνουμε με την εντολή

```
> ./rk2.csh -h
Usage: rk2.csh -f <force> k1 k2 x10 x20 v10 v20 STEPS t0 tf
Other Options:
 -n Do not animate trajectory
Available forces (value of <force>):
1: ax=-k1             ay= -k2 y           Harmonic oscillator
```

```
2: ax= 0              ay= -k1              Free fall
3: ax= -k2    vx    ay= -k2   vy - k1  Free fall + air resitance ~ v
4: ax= -k2 |v| vx    ay= -k2 |v|vy - k1  Free fall + air resitance ~ v^2
5: ax= k1*x1/r^3      ay= k1*x2/r^3       Coulomb Force
....
```

όπου φαίνεται ότι έχουμε την επιλογή να τρέξουμε το πρόγραμμα με διαφορετικές δυνάμεις που επιλέγονται με το διακόπτη `-f`. Στην υπόλοιπη γραμμή εντολών δίνουμε τα δεδομένα εισόδου για το πρόγραμμα `rk2.f`, τις σταθερές ζεύξης `k1, k2`, τις αρχικές συνθήκες `x10, x20, v10, v20` και τις συνθήκες ολοκλήρωσης `STEPS, t0, tf`.΄Ετσι για παράδειγμα οι εντολές

```
> rk2.csh -f 2 -- 10.0 0.0 0.0 0.0 1.0 1.0 20000 0.0 0.2
> rk2.csh -f 1 -- 16.0 1.0 0.0 1.0 1.0 0.0 20000 0.0 6.29
> rk2.csh -f 5 -- 10.0 0.0 -10 0.2 10. 0.0 20000 0.0 3.00
```

μας δίνουν την κίνηση του σωματιδίου στο πεδίο βαρύτητας που μελετήσαμε ως τώρα, την κίνηση ανομοιογενούς αρμονικού ταλαντωτή (`k1` = $a_x = -\omega_1^2 x$, `k2` = $a_y = -\omega_2^2 y$) και τη σκέδαση φορτίου σε πεδίο Cooulomb - δοκιμάστε τα! Ελπίζω να σας δημιουργηθεί και η περιέργεια να δείτε "μέσα" στα σενάρια έτσι ώστε να τα μεταβάλλετε και δημιουργήτε από μόνοι/ες σας. Από μένα μερικές οδηγίες για τους τεμπέληδες: Αν θελήσετε να προσθέσετε μια δική σας δύναμη στο ρεπερτόριο του σεναρίου ακολουθήστε τη συνταγή: Προγραμματίστε τη δυναμή σας σε αρχείο με όνομα `rk2_myforce.f` συμφωνα με τις προδιαγραφές του `rk2_g.f`. Επεξεργαστήτε το αρχείο `rk2.csh` και αλλάξτε τη γραμμή

```
set forcecode = (hoc g vg v2g cb)
```

σε

```
set forcecode = (hoc g vg v2g cb myforce)
```

(φυσικά μπορεί η μεταβλητή `$forcecode` να έχει και άλλες εγγραφές στο σενάριο αλλά αυτό δεν θα σας εμποδίσει). Μετρήστε σε ποιά σειρά έχετε βάλει το `myforce`, εδώ την 6η, και τρέξτε την εντολή με το διακόπτη `-f 6` όπου το 6 αντικαταστήστε το με τη σειρά στο δικό σας σενάριο (οι τελίτσες οι δικιές σας σταθ. ζεύξης και αρχικές συνθήκες):

```
> rk2.csh -f 6 -- .......
```

Ας μελετήσουμε τώρα την επίδραση της αντίστασης του αέρα ή ενός ρευστού στην πτώση/βολή του σωματιδίου. Για μικρές ταχύτητες η αντίσταση γίνεται ανάλογη της ταχύτητας και έχουμε $\vec{F}_r = -mk\vec{v}$ οπότε

$$\begin{aligned} a_x &= -kv_x \\ a_y &= -kv_y - g \end{aligned} \tag{4.4}$$

παίρνοντας

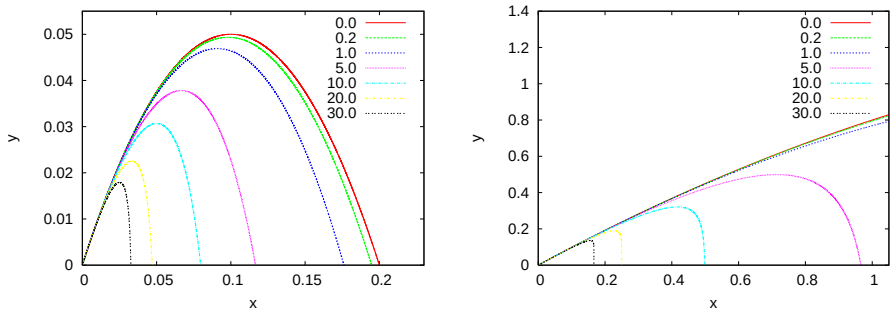
$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \frac{v_{0x}}{k}\left(1 - \mathrm{e}^{-kt}\right) \\ y(t) &= y_0 + \frac{1}{k}\left(v_{0y} + \frac{g}{k}\right)\left(1 - \mathrm{e}^{-kt}\right) - \frac{g}{k}t \\ v_x(t) &= v_{0x}\mathrm{e}^{-kt} \\ v_y(t) &= \left(v_{0y} + \frac{g}{k}\right)\mathrm{e}^{-kt} - \frac{g}{k}\,, \end{aligned} \tag{4.5}$$

από όπου διαβάζουμε την κίνηση του σωματιδίου με ορική ταχύτητα $v_y(+\infty) = -g/k$ ($x(+\infty) = \sigma\tau\alpha\theta.$, $y(+\infty) \sim t$).

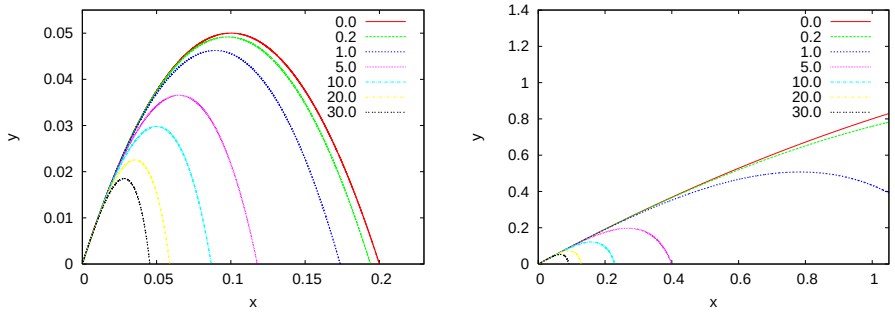
Ο προγραμματισμός της επιτάχυνσης καταγράφεται στο αρχείο (`k1` $\leftrightarrow g$, `k2` $\leftrightarrow k$) `rk2_vg.f`:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C    The acceleration functions f3,f4(t,x1,x2,v1,v2) provided by the user
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Free fall in constant gravitational filed with
C     ax = -k2 vx    ay = -k2 vy - k1
      double precision function f3(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      f3=-k2*v1   !dx3/dt=dv1/dt=a1
      end

      double precision function f4(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      f4=-k2*v2-k1   !dx4/dt=dv2/dt=a2
      end
```

Τα αποτελέσματα καταγράφονται στα Σχήματα 4.3 όπου φαίνεται η επίδραση της αυξανόμενης αντίστασης στην τροχιά του σωματιδίου. Στο Σχήμα 4.4 δίνεται για σύγκριση η επίδραση δύναμης $\vec{F}_r = -mkv^2\hat{v}$.



Σχήμα 4.3: Τροχιά σωματιδίου που βάλλεται στο σταθερό βαρυτικό πεδίο της γής $\vec{g} = -10\hat{j}$ υπό την επίδραση αντίστασης ρευστού $a_r = -k\vec{v}$ για $k = 0, 0.2, 1, 5, 10, 20, 30$. Αριστερά έχουμε $\vec{v}(0) = \hat{i} + \hat{j}$ ενώ δεξιά $\vec{v}(0) = 5\hat{i} + 5\hat{j}$.



Σχήμα 4.4: Τροχιά σωματιδίου που βάλλεται στο σταθερό βαρυτικό πεδίο της γής $\vec{g} = -10\hat{j}$ υπό την επίδραση αντίστασης ρευστού $a_r = -kv^2\hat{v}$ για $k = 0, 0.2, 1, 5, 10, 20, 30$. Αριστερά έχουμε $\vec{v}(0) = \hat{i} + \hat{j}$ ενώ δεξιά $\vec{v}(0) = 5\hat{i} + 5\hat{j}$.

4.3 Κίνηση Πλανητών.

Θα θεωρήσουμε το απλό πλανητικό μοντέλο του "ήλιου" με μάζα M και ενός πλανήτη "γη" με μάζα m έτσι ώστε $m \ll M$. Ο νόμος του Νεύτωνα μας δίνει ότι η επιτάχυνση της "γης " δίνεται από τη σχέση

$$\vec{a} = \vec{g} = -\frac{GM}{r^2}\hat{r} = -\frac{GM}{r^3}\vec{r} \tag{4.6}$$

Θυμίζουμε στον αναγνώστη ότι $G = 6.67 \times 10^{-11} \frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{kgr}\cdot\mathrm{sec}^2}$, $M = 1.99 \times 10^{30}$kgr, $m = 5.99 \times 10^{24}$kgr. Επίσης όταν η υπόθεση $m \ll M$ δεν είναι ικανοποιητική, τότε το πρόβλημα των δύο σωμάτων ανάγεται σε αυτό του ενός χρησιμοποιώντας την ανηγμένη μάζα

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M}\,.$$

Η δύναμη της βαρύτητας είναι κεντρική με αποτέλεσμα να διατηρήται η στροφορμή $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Αυτό σημαίνει ότι η κίνηση γίνεται πάνω σε ένα επίπεδο και μπορούμε να πάρουμε τον άξονα των z έτσι ώστε

$$\vec{L} = L_z \hat{k} = m(xv_y - yv_x)\,. \tag{4.7}$$

Η δύναμη είναι διατηρητική και η ενέργεια

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{GmM}{r} \tag{4.8}$$

διατηρήται. Αν πάρουμε την αρχή των αξόνων να είναι το κέντρο της δύναμης, τότε οι εξισώσεις κίνησης (4.6) γίνονται

$$\begin{aligned} a_x &= -\frac{GM}{r^3}\, x \\ a_y &= -\frac{GM}{r^3}\, y \end{aligned} \tag{4.9}$$

με $r^2 = x^2 + y^2$. Οι εξισώσεις αυτές είναι ένα σύστημα δύο συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων ως προς τις συναρτήσεις $x(t)$, $y(t)$. Οι λύσεις είναι κωνικές τομές που είναι είτε έλλειψη (δεσμευμένη τροχιά - "πλανήτης "), παραβολή (για τη λεγόμενη "ταχύτητα διαφυγής " ή υπερβολή (σκέδαση).

Για την περίοδο περιστροφής των πλανητών ισχύει ο τρίτος νόμος του Κέπλερ

$$T^2 = \frac{4\pi^2}{GM} a^3 \tag{4.10}$$

όπου εδώ a είναι ο μεγάλος ημιάξονας της ελλειπτικής τροχιάς και b ο μικρός ημιάξονας. Το πόσο "πλατιά" είναι η έλλειψη χαρακτηρίζεται από την εκκεντρότητα της τροχιάς

$$e = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}\,, \tag{4.11}$$

η οποία είναι 0 για τον κύκλο και τείνει προς τη 1 όταν την "πατάμε" να γίνει ευθεία. Σε απόσταση ea από το κέντρο της έλλειψης βρίσκονται

οι εστίες της F_1 και F_2. Αυτές έχουν την ιδίοτητα ότι κάθε σημείο P της τροχιάς έχει

$$PF_1 + PF_2 = 2a\,. \tag{4.12}$$

Για να προγραμματίσουμε τη δύναμη του Νεύτωνα γράφουμε στο αρχείο `rk2_cb.f`:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C    The acceleration functions f3,f4(t,x1,x2,v1,v2) provided by the user
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Motion in Coulombic/Newtonian potential:
C     ax= k1*x1/r^3 ay= k1*x2/r^3
      double precision function f3(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      double precision r2,r3
      r2=x1*x1+x2*x2
      r3=r2*dsqrt(r2)
      if(r3.gt.0.0D0)then
       f3=k1*x1/r3              !dx3/dt=dv1/dt=a1
      else
       f3=0.0D0
      endif
      end

      double precision function f4(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      double precision r2,r3
      r2=x1*x1+x2*x2
      r3=r2*dsqrt(r2)
      if(r3.gt.0.0D0)then
       f4=k1*x2/r3              !dx4/dt=dv2/dt=a2
      else
       f4=0.0D0
      endif
      end
```

```
double precision function energy(t,x1,x2,v1,v2)
implicit none
double precision t,x1,x2,v1,v2
double precision k1,k2
common /couplings/k1,k2
double precision r
r=dsqrt(x1*x1+x2*x2)
if( r .gt. 0.0D0)then
 energy = 0.5*(v1*v1+v2*v2) + k1/r
else
 energy = 0.0D0
endif
end
```

Στο παραπάνω πρόγραμμα k1= $-GM$ και έχουμε προσέξει την περίπτωση το σωμάτιο να προσκρούσει στο ιδιάζον σημείο $(0,0)$, το κέντρο της δύναμης. Προφανώς ό ίδιος κώδικας μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για το ηλεκτροστατικό πεδίο Coulomb με k1= $qQ/4\pi\epsilon_0 m$.

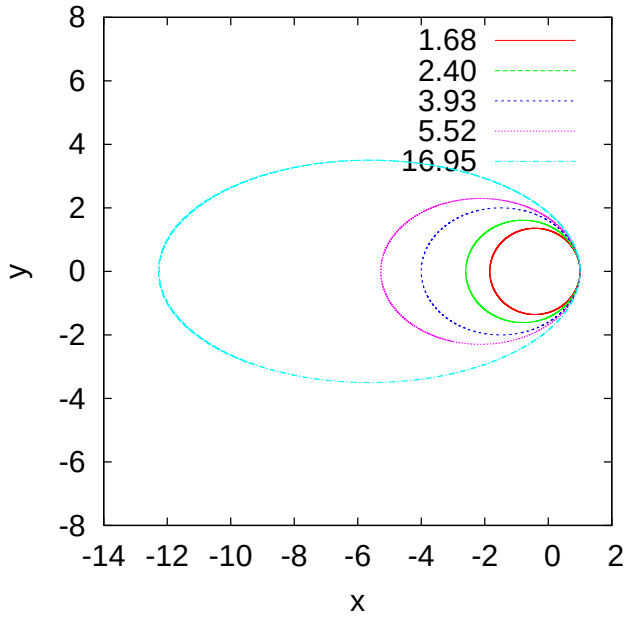
Κατ' αρχήν μελετάμε τροχιές οι οποίες είναι δέσμιες. Διαλέγουμε $GM = 10$, $x(0) = 1.0$, $y(0) = 0$, $v_{0x} = 0$ και v_{0y} μεταβλητό. Μετράμε την περίοδο και το μήκος των ημιαξόνων της έλλειψης. Προκύπτει ο Πίνακας 4.1. Μερικές από τις τροχιές φαίνονται στο σχήμα 4.5 όπου

v_{0x}	$T/2$	$2a$
3.2	1.032	2.051
3.4	1.282	2.371
3.6	1.682	2.841
3.8	2.398	3.598
4.0	3.9288	5.002
4.1	5.5164	6.272
4.2	8.6952	8.481
4.3	16.95	13.256
4.35	28.168	18.6
4.38	42.81	24.58
4.40	61.8	31.393
4.42	99.91	43.252

Πίνακας 4.1: Τα αποτελέσματα για την περίοδο και τον μεγάλο ημιάξονα της ελλειπτικής τροχιάς πλανητικής κίνησης για $GM = 10$, $x(0) = 1.0$, $y(0) = 0$, $v_{0y} = 0$.

φαίνεται η εξάρτηση του μεγέθους της έλλειψης από την περίοδο. Στο

Σχήμα 4.6 επιβεβαιώνουμε τον 3ο νόμο του Κέπλερ, Σχέση (4.10) .



Σχήμα 4.5: Τροχιές πλανήτη για $GM = 10$, $x(0) = 1.0$, $y(0) = 0$, $v_{0y} = 0$ και $v_{0x} = 3.6, 3.8, 4.0, 4.1, 4.3$. Αναγράφονται οι αντίστοιχες ημιπερίοδοι.

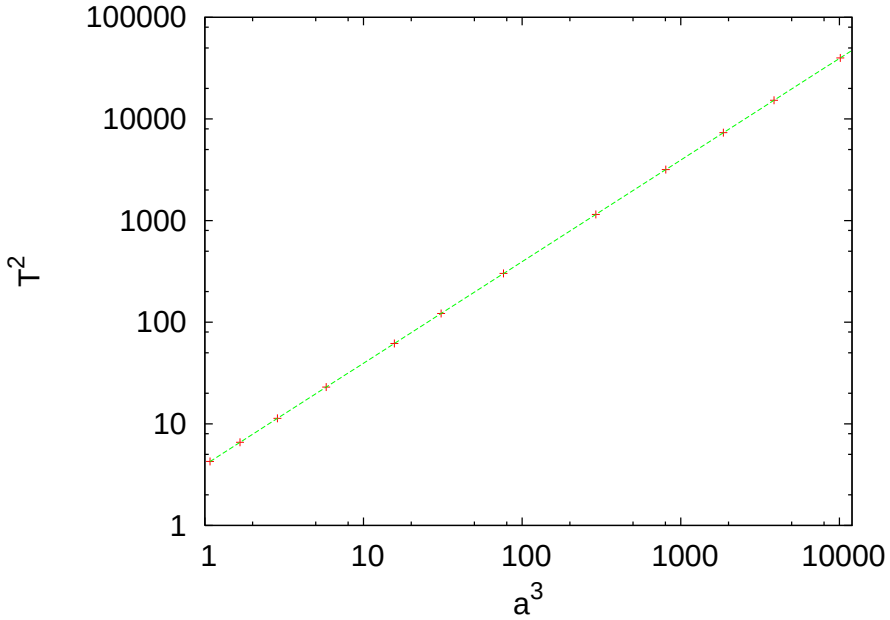
Πώς θα μπορούσαμε να προβλέψουμε το νόμο του Κέπλερ χωρίς να γνωρίζαμε το αποτέλεσμα εκ των προτέρων? Αν πάρουμε το λογάριθμο και στα δύο μέλη της Εξίσωσης (4.10) προκύπτει:

$$\ln T = \frac{3}{2} \ln a + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{4\pi^2}{GM} \right) \tag{4.13}$$

Άρα σε ένα διάγραμμα των σημείων $(\ln a, \ln T)$ τα σημεία πρέπει να βρίσκονται πάνω σε μια ευθεία. Με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων μπορούμε να υπολογίσουμε το συντελεστή κατεύθυνσης και το σημείο τομής των αξόνων που θα πρέπει να είναι $\frac{3}{2}$ και $1/2 \ln (4\pi^2/GM)$ αντίστοιχα. Το αφήνουμε σαν άσκηση για τον αναγνώστη.

Σε περίπτωση που η αρχική ταχύτητα του σωματιδίου υπερβεί την ταχύτητα διαφυγής v_e το σωμάτιο ξεφεύγει από την επίδραση του πεδίου βαρύτητας. Αυτό γίνεται όταν η μηχανική του ενέργεια (4.8) είναι 0 ή όταν

$$v_e^2 = \frac{2GM}{r} \,, \tag{4.14}$$



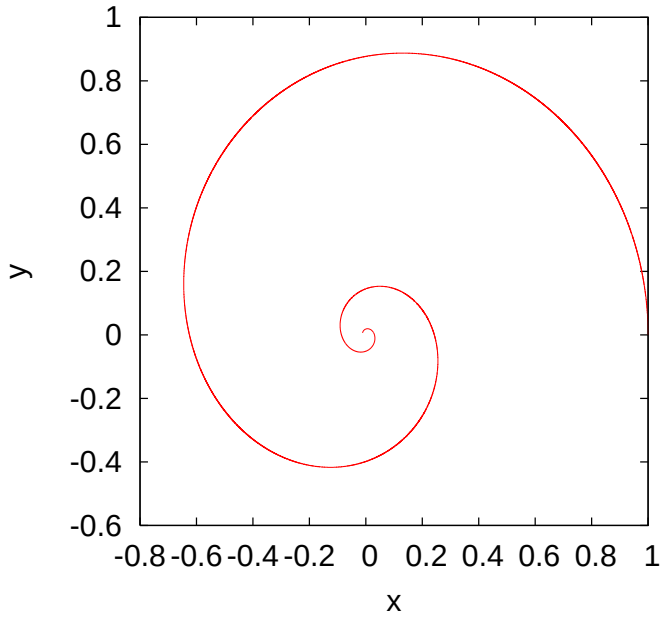
Σχήμα 4.6: Ο τρίτος νόμος του Κέπλερ για $GM = 10$. Τα σημεία είναι οι μετρήσεις από τον Πίνακα 4.1 και η συνεχής γραμμή η αναλυτική λύση (4.10) .

που στην περίπτωση που εξετάζουμε με $GM = 10$ παίρνουμε $v_e \approx 4.4721\ldots$. Δοκιμάστε με πόση ακρίβεια μπορείτε να την προσδιορίσετε αριθμητικά παίρνοντας την αρχική ταχύτητα v_{0x} να πλησιάζει την παραπάνω τιμή από μεγαλύτερες και μικρότερες τιμές και βλέποντας πότε περνάτε από κλειστή σε ανοιχτή τροχιά. Επαναλάβατε τη διαδικασία ενκυβοτίζοντας τα διαστήματα της αρχικής ταχύτητας για τα οποία η ενέργεια αλλάζει πρόσημο.

4.4 Σκέδαση.

Στην παράγραφο αυτή θεωρούμε σκέδαση σωματιδίων από ένα κεντρικό δυναμικό [2]. Υποθέτουμε ότι το δυναμικό αυτό έχει τροχιές που ξεκινούν από το άπειρο και καταλήγουν στο άπειρο, στο οποίο τα σωματίδια κινούνται ελεύθερα από την επίδραση της δύναμης. Έτσι αρχικά τα σωματίδια κινούνται ελεύθερα πρός την περιοχή αλληλεπίδρασης με το κέντρο της δύναμης μέσα στην οποία αλλάζουν κατεύθυνση και κινούνται πάλι έξω από αυτή σε διαφορετική διεύθυνση. Λέμε τότε ότι

[2] Διαβάστε το κεφάλαιο 4 του [12]



Σχήμα 4.7: Σπειδοειδής τροχιά σωματιδίου που κινήται υπό την επίδραση κεντρική δύναμης $\vec{F} = -k/r^3\hat{r}$.

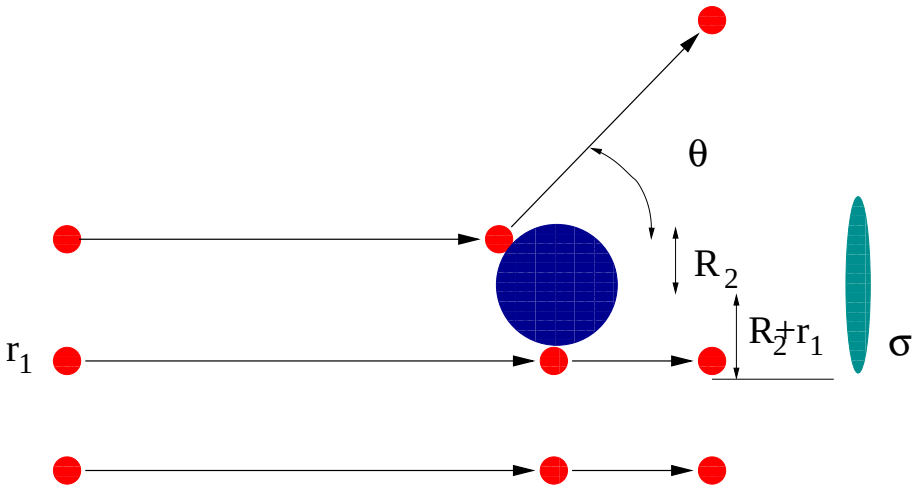
το σωμάτιο σκεδάστηκε και ότι η γωνία μεταξυ της αρχικής και τελικής διεύθυνσης της ταχύτητας είναι η γωνία σκέδασης θ. Το ενδιαφέρον στην περίπτωση αυτή έγκειται στο γεγονός ότι από την κατανομή της γωνίας σκέδασης μιας δέσμης σωματιδίων μπορούμε να πάρουμε χρήσιμη πληροφορία για το δυναμικό σκέδασης. Αυτή η τεχνική χρησιμοποιήται κατά κόρο στους σημερινούς επιταχυντές για την μελέτη των θεμελιωδών αλληλεπιδράσεων των στοιχειωδών σωματιδίων. Ο ακριβής προσδιορισμός της μορφής του δυναμικού σκέδασης με τον τρόπο αυτό αποτελεί μέρος της θεωρίας αντίστροφης σκέδασης..

Για να κατανοήσουμε τους ορισμούς είναι χρήσιμο να θεωρήσουμε τη σκέδαση μικρών σκληρών σφαιρών ακτίνας r_1 από άλλες σκληρές σφαίρες ακτίνας R_2. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης[3] είναι δηλαδή:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > R_2 + r_1 \\ \infty & r < R_2 + r_1 \end{cases} \tag{4.15}$$

Υποθέτουμε ότι τα σωματίδια της δέσμης δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και ότι κατά τη σκέδαση κάθε σωμάτιο αλληλεπιδρά μόνο με ένα κέντρο σκέδασης του στόχου. Έστω J η πυκνότητα ροής ή ένταση της

[3] Λέγεται δυναμικό σκληρού πυρήνα (hard core potential).



Σχήμα 4.8: Σκέδαση σκληρών σφαιρών. θ είναι η γωνία σκέδασης. Δεξιά φαίνεται η συνολική ενεργός διατομή σ.

δέσμης[4] και A η διατομή της δέσμης. Έστω ότι ο στόχος έχει n σωματίδια ανά μονάδα επιφάνειας. Η ενεργός διατομή της αλληλεπίδρασης είναι $\sigma = \pi(r_1 + R_2)^2$ όπου r_1 και R_2 οι ακτίνες των σκεδαζομένων σφαιρών και των στόχων αντίστοιχα (βλ. Σχήμα (4.8)): όλες οι σφαίρες έξω από την επιφάνεια αυτή στη δέσμη δεν σκεδάζονται από το συγκεκριμένο στόχο. Η συνολική ενεργός διατομή που παρουσιάζουν όλα τα κέντρα αλληλεπίδρασης του στόχου είναι

$$\Sigma = nA\sigma, \tag{4.16}$$

όπου nA είναι ο συνολικός αριθμός των κέντρων του στόχου που βρίσκονται μέσα στην δέσμη. Κατά μέσο όρο ο ρυθμός σκέδασης, δηλ. ο αριθμός των σκεδάσεων ανά μονάδα χρόνου θα είναι

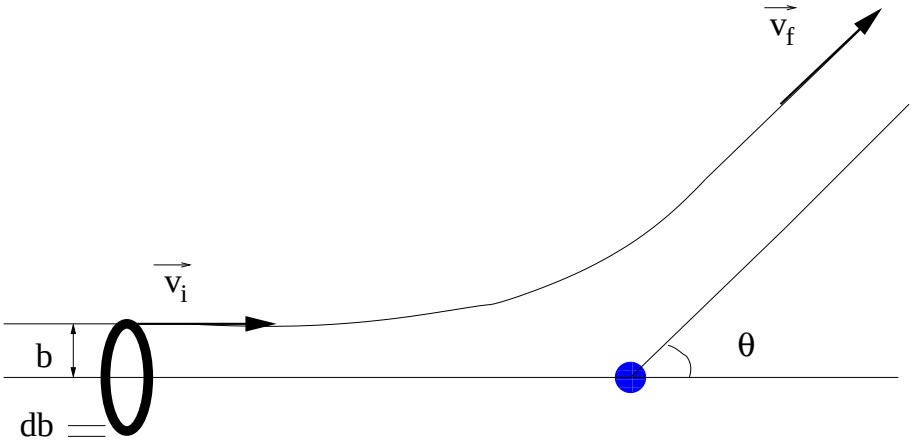
$$N = J\Sigma = JnA\sigma\,. \tag{4.17}$$

Η παραπάνω εξίσωση αποτελεί και τον ορισμό της συνολικής ενεργούς διατομής της αλληλεπίδρασης για οποιαδήποτε άλλη περίπτωση σκέδασης που πληρεί τις βασικές υποθέσεις που κάναμε, οι οποίες μας οδηγούν ότι αυτή είναι η ποσότητα που εξαρτάται από το είδος της αλληλεπίδρασης. Η διαφορική ενεργός διατομή ορίζεται από τη σχέση

$$dN = JnA\sigma(\theta)\,d\Omega\,, \tag{4.18}$$

[4]Ο αριθμός των σωματιδίων που περνούν μια επιφάνεια κάθετη στη δέσμη ανά μονάδα χρόνου και μονάδα επιφανείας.

όπου dN ο αριθμός των σωματιδίων ανά μονάδα χρόνου που σκεδάζονται μέσα στη στερεά γωνία $d\Omega$. Η συνολική ενεργός διατομή είναι



Σχήμα 4.9: Σωματίδια της δέσμης που περνούν μέσα από το δακτύλιο $2\pi bdb$ σκεδάζονται μέσα στη στερεά γωνία $d\Omega = 2\pi sin\theta\, d\theta$.

$$\sigma_{tot} = \int_{\Omega} \sigma(\theta)\, d\Omega = \int \sigma(\theta) \sin\theta\, d\theta d\phi = 2\pi \int \sigma(\theta) \sin\theta\, d\theta\,. \tag{4.19}$$

Στην τελευταία σχέση χρησιμοποιήσαμε την κυλινδρική συμμετρία της αλληλεπίδρασης ώς προς τον άξονα της κρούσης. Καταλήγουμε στη σχέση

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{nAJ} \frac{dN}{2\pi \sin\theta\, d\theta}\,. \tag{4.20}$$

Αυτή η σχέση μπορεί να χρησιμοποιηθεί πειραματικά για τη μέτρηση της διαφορικής ενεργούς διατομής μετρώντας το ρυθμό ανίχνευσης σωματιδίων μέσα σε δύο κώνους που ορίζονται από τις γωνίες θ και $\theta + d\theta$. Τη σχέση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε και στον αριθμητικό υπολογισμό της $\sigma(\theta)$.

Για να προσδιορίσουμε τη διαφορική ενεργό διατομή από μια θεωρία, μπορούμε να ακολουθήσουμε την εξής γενική διαδικασία. Έστω ότι σωμάτιο βάλλεται προς το στόχο όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.9. b ονομάζεται η παράμετρος κρούσης και η τελική γωνία θ εξαρτάται από αυτή. Άρα το μέρος της δέσμης που σκεδάζεται σε γωνίες μεταξύ θ και $\theta + d\theta$ βρίσκεται σε ένα κυκλικό δαχτυλίδι ακτίνας $b(\theta)$, πάχους db και εμβαδού $2\pi b\, db$. Αφού έχουμε ένα σωμάτιο στο στόχο $nA = 1$. Ο αριθμός των σωματιδίων ανα μονάδα χρόνου που περνούν μέσα από το δαχτυλίδι είναι $J2\pi b\, db$, άρα

$$2\pi b(\theta)\, db = -2\pi\sigma(\theta) \sin\theta\, d\theta \tag{4.21}$$

(το − οφείλεται στο γεγονός ότι όταν το b αυξάνει το θ μικραίνει). Από τη γνώση του δυναμικού μπορούμε να υπολογίσουμε το $b(\theta)$ οπότε προκύπτει η $\sigma(\theta)$. Αντίστροφα, αν μετρήσουμε τη $\sigma(\theta)$, μπορούμε να προσδιορίσουμε την $b(\theta)$.

4.4.1 Σκέδαση Rutherford.

Η σκέδαση φορτισμένου σωματιδίου φορτίου q ("ηλεκτρόνιου") μέσα σε δυναμικό Coulomb πολύ βαρύτερου σημειακού ηλεκτρικού φορτίου Q ("πυρήνας ") ονομάζεται σκέδαση Rutherford. Στην περίπτωση αυτή το δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r}\,, \tag{4.22}$$

το οποίο προσδίδει επιτάχυνση $\vec{a}$ στο σωματίδιο ίση με

$$\vec{a} = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 m}\frac{\hat{r}}{r^2} \equiv \alpha\frac{\vec{r}}{r^3}\,. \tag{4.23}$$

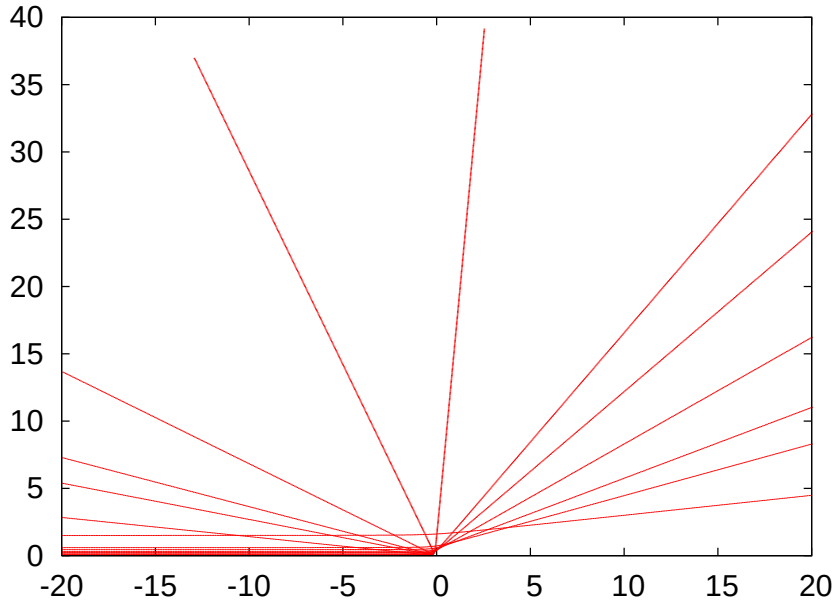
Η ενέργεια του σωματιδίου είναι $E = \frac{1}{2}mv^2$ και η στροφορμή του $l = mvb$ όπου εδώ $v \equiv |\vec{v}_i|$. Η σχέση μεταξύ της παραμέτρου κρούσης και της γωνίας σκέδασης βρίσκεται να είναι

$$b(\theta) = \frac{\alpha}{v^2}\cot\frac{\theta}{2}\,, \tag{4.24}$$

όπου σε συνδυασμό με την (4.21) προκύπτει ότι

$$\sigma(\theta) = \frac{\alpha^2}{4}\frac{1}{v^4}\sin^{-4}\frac{\theta}{2}\,. \tag{4.25}$$

Αρχικά εξετάζουμε τις τροχιές σκέδασης. Τα αποτελέσματα φαίνονται ποιοτικά στο Σχήμα 4.10 στην περίπτωση που τα φορτισμένα σωμάτια έχουν ομώνυμα φορτία. Ανάλογο σχήμα προκύπτει και για ετερώνυμα φορτία, προσοχή πρέπει να δοθεί στην ακρίβεια της μεθόδου για μικρές παραμέτρους κρούσης $b < 0.2$ (και τις υπόλοιπες παραμέτρους όπως στο Σχήμα 4.10) όπου η γωνία σκέδασης γίνεται ≈ 1. Πολύ μεγαλύτερος αριθμός βημάτων απαιτήται για την επίτευξη ικανοποιητικής ακρίβειας. Βρίσκουμε ότι η ποσότητα που είναι δείκτης που δείχνει την σύγκλιση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με αυτά της Σχέσης (4.24) είναι η ενέργεια, η οποία πρέπει να διατηρήται κατά την κρούση. Αυτό θα μας χρησιμεύσει όταν θα μελετήσουμε δυναμικά για τα οποία δεν έχουμε αναλυτική λύση.



Σχήμα 4.10: Τροχιές σκέδασης Rutherford. Θέσαμε `k1` $\equiv \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 m} = 1$ στο αρχείο `rk2_cb.f` και μελετήσαμε τις τροχιές για $b = 0.08, 0.015, 0.020, 0.035, 0.080, 0.120, 0.200, 0.240, 0.320, 0.450, 0.600, 1.500$. Το σωμάτιο τοποθετήθηκε αρχικά στη θέση $x(0) = -50$ και του δόθηκε αρχική ταχύτητα $v = 3$. Ο αριθμός των βημάτων στην ολοκλήρωση είναι 1000 για χρόνο από 0 έως 30.

Για να μελετήσουμε ποσοτικά τα αποτελέσματά μας αυξάνουμε την ακρίβεια έτσι ώστε να πετύχουμε ικανοποιητική σύγκλιση των αναλυτικών και αριθμητικών αποτελεσμάτων. Καταρτίζουμε έτσι τον Πίνακα

Θα περιγράψουμε τώρα ένα τρόπο για τον υπολογισμό της ενεργούς διατομής χρησιμοποιώντας τη Σχέση (4.20) . Εναλλακτικά θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί η (4.21) υπολογίζοντας την κατάλληλη παράγωγο αριθμητικά. Αυτό όμως το αφήνουμε για άσκηση στον ανήσυχο και επιμελή αναγνώστη. Ο υπολογισμός που θα κάνουμε μοιάζει να είναι "πειραματικός ". Τοποθετούμε "ανιχνευτή" που "ανιχνέυει" τα σωμάτια που σκεδάζονται από θ μέχρι $\theta + \delta\theta$. Για το λόγο αυτό χωρίζουμε το διάστημα $[0, \pi]$ σε N_b bins έτσι ώστε $\delta\theta = \pi/N_b$. Κάνουμε "πειράματα" σκέδασης μεταβάλλοντας την παράμετρο σκέδασης $b \in [b_m, b_M]$ με βήμα δb. Λόγω της συμμετρίας το προβλήματος, κρατάμε το ϕ σταθερό, οπότε δεδομένο θ αντιστοιχεί σε κώνο ανοίγματος θ και κορυφή το κέντρο σκέδασης. Παρατηρούμε σε ποια γωνία θ σκεδάζεται το σωμάτιο με το συγκεκριμένο b και καταχωρούμε τον αριθμό των σω-

b	θ_n	θ_a	$\Delta E/E$	STEPS
0.008	2.9982	2.9978	$1.06\,10^{-5}$	5000
0.020	2.7861	2.7854	$6.25\,10^{-5}$	5000
0.030	2.6152	2.6142	$1.29\,10^{-4}$	5000
0.043	2.4043	2.4031	$2.31\,10^{-4}$	5000
0.056	2.2092	2.2079	$3.27\,10^{-4}$	5000
0.070	2.0184	2.0172	$4.07\,10^{-4}$	5000
0.089	1.7918	1.7909	$4.70\,10^{-4}$	5000
0.110	1.5814	1.5808	$4.82\,10^{-4}$	5000
0.130	1.4147	1.4144	$4.59\,10^{-4}$	5000
0.160	1.2138	1.2140	$3.97\,10^{-4}$	5000
0.200	1.0137	1.0142	$3.08\,10^{-4}$	5000
0.260	0.8070	0.8077	$2.04\,10^{-4}$	5000
0.360	0.5979	0.5987	$1.07\,10^{-4}$	5000
0.560	0.3910	0.3917	$3.83\,10^{-5}$	5000
1.160	0.1905	0.1910	$5.58\,10^{-6}$	5000

Πίνακας 4.2: Γωνίες σκέδασης στη σκέδαση Rutherford. Θέσαμε k1 $\equiv \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 m} = 1$ στο αρχείο rk2_cb.f και μελετήσαμε τις τροχιές για τις τιμές του b που φαίνονται στη στήλη 1. θ_n είναι η γωνία σκέδασης που υπολογίζεται αριθμητικά και θ_a το αποτέλεσμα της Σχέσης (4.24) . $\Delta E/E$ είναι η ποσοστιαία μεταβολή της ενέργειας λόγω συστηματικών σφαλμάτων της μεθόδου και στην τελευταία στήλη ο αριθμός των βημάτων ολοκλήρωσης για χρόνο από 0 έως 30. Το σωμάτιο τοποθετήθηκε αρχικά στη θέση $x(0) = -50$ και του δόθηκε αρχική ταχύτητα $v = 3$.

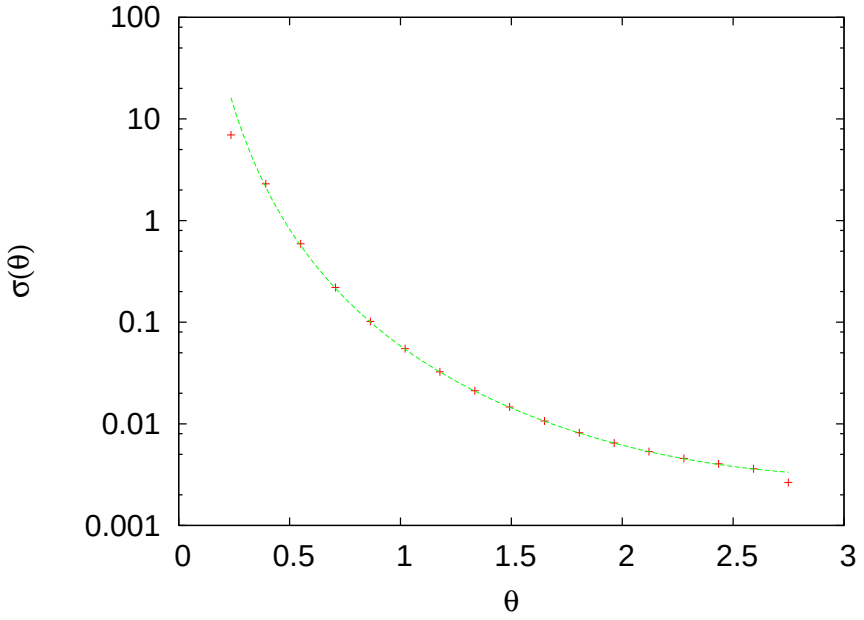
ματιδίων ανά μονάδα χρόνου $\delta N \propto b\delta b$, μια και αυτός είναι ανάλογος του εμβαδού του δακτυλιδιού ακτίνας b. Απομένει να υπολογίσουμε τη ροή J η οποία είναι ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων ανά μονάδα χρόνου που δεν έιναι άλλος από $J \propto \sum_i b\delta b$ (στο λόγο $\delta N/J$ η σταθερά αναλογίας και το δb απλοποιούνται) και τη στερεά γωνία $2\pi \sin(\theta)\,\delta\theta$. Τέλος, εύκολα χρησιμοποιήται η σχέση (4.19) για τον υπολογισμό της συνολικής ενεργούς διατομής σ_{tot}. Ο προγραμματισμός της διαδικασίας γίνεται μεταβάλλοντας απλά το κυρίως πρόγραμμα του rk2.f το οποίο καταγράφουμε στο αρχείο scatter.f.

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C    Program that computes scattering cross-section of a central
C     force on the plane. The user should first check that the
C     parameters used, lead to a free state in the end.
C       **  X20 is the impact parameter b  **
C     A 4 ODE system is solved using Runge-Kutta Method
```

b	θ_n	θ_a	$\Delta E/E$	STEPS
0.020	0.577	2.785	0.47	150000
0.030	2.466	2.614	0.22	150000
0.043	2.333	2.403	$8.62\,10^{-2}$	150000
0.056	2.180	2.208	$2.88\,10^{-2}$	150000
0.070	2.006	2.017	$1.07\,10^{-2}$	150000
0.089	1.779	1.791	$8.94\,10^{-3}$	60000
0.110	1.570	1.581	$7.07\,10^{-3}$	30000
0.130	1.406	1.414	$5.25\,10^{-3}$	20000
0.160	1.198	1.214	$8.63\,10^{-3}$	5000
0.200	1.007	1.014	$3.71\,10^{-3}$	5000
0.260	0.8057	0.8077	$1.40\,10^{-3}$	5000
0.360	0.5988	0.5987	$4.32\,10^{-4}$	5000
0.560	0.3923	0.3917	$9.40\,10^{-5}$	5000
1.160	0.1913	0.1910	$8.61\,10^{-6}$	5000

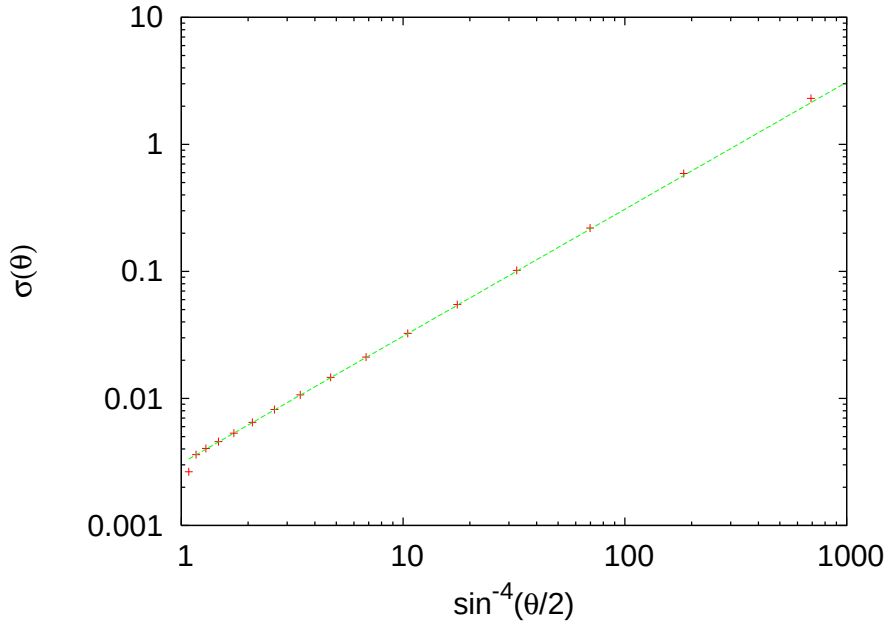
Πίνακας 4.3: Αποτελέσματα όμοια με αυτά του Πίνακα 4.2. Η μόνη διαφορά είναι ότι η σκέδαση είναι μεταξύ ετερώνυμων φορτίων με $\frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 m} = -1$. Φαίνεται η δυσκολία που αντιμετωπίζει η μέθοδος για μικρές παράμετρους κρούσης.

```
C     User must supply derivatives
C     dx1/dt=f1(t,x1,x2,x3,x4) dx2/dt=f2(t,x1,x2,x3,x4)
C     dx3/dt=f3(t,x1,x2,x3,x4) dx4/dt=f4(t,x1,x2,x3,x4)
C     as real*8 functions
C     Output is written in file scatter.dat
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program scatter_cross_section
      implicit none
      integer P
      parameter(P=1010000)
      double precision T0,TF,X10,X20,V10,V20
      double precision X20F,dX20 !max impact parameter and step
      integer STEPS,PSIZE
      double precision T(P),X1(P),X2(P),V1(P),V2(P)
      integer i
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      integer Nbins,index
      parameter (Nbins = 20 )
     double precision PI,rad2deg,angle,dangle,bins(Nbins),Npart
```



Σχήμα 4.11: Διαφορική ενεργός διατομή για τη σκέδαση Rutherford. Η συνεχής γραμμή είναι η συνάρτηση (4.25) για $\alpha = 1$, $v = 3$. Θέσαμε $\frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 m} = 1$. Το σωμάτιο τοποθετήθηκε αρχικά στη θέση $x(0) = -50$ και του δόθηκε αρχική ταχύτητα $v = 3$. Γίναν 5000 βήματα ολοκλήρωσης για χρόνο από 0 έως 30. Η παράμετρος κρούσης b μεταβλήθηκε από 0.02 έως 1 με βήμα 0.0002.

```
      parameter (PI     =3.14159265358979324D0)
      parameter (rad2deg=180.0D0/PI)
      parameter (dangle =PI/Nbins)
      double precision R,density,dOmega,sigma,sigmatot
C     Input:
      print *,'Runge-Kutta Method for 4-ODEs Integration'
      print *,'Enter coupling constants:'
      read(5,*) k1,k2
      print *,'k1= ',k1,' k2= ',k2
      print *,'Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,V10,V20:'
      read(5,*) STEPS,T0,TF,X10,X20,V10,V20
     print *,'Enter final impact parameter X20F and step dX20:'
      read(5,*) X20F,dX20
      print *,'No. Steps= ',STEPS
      print *,'Time: Initial T0 =',T0,  ' Final TF=',TF
      print *,'           X1(T0)=',X10, ' X2(T0)=',X20
      print *,'           V1(T0)=',V10, ' V2(T0)=',V20
```



Σχήμα 4.12: Διαφορική ενεργός διατομή για τη σκέδαση Rutherford όπως στο Σχήμα 4.11. Η συνεχής ευθεία γραμμή είναι η $1/(4 \times 3^4)x$ από όπου είναι εμφανής η συναρτησιακή μορφή της $\sigma(\theta)$.

```
      print *,'Impact par X20F  =',X20F,' dX20  =',dX20

      open(unit=11,file='scatter.dat')
      do i=1,Nbins
       bins(i) = 0.0d0
      enddo
C     The Calculation:
      PSIZE  = P
      Npart  = 0.0D0
     X20   = X20 + dX20/2.0D0 !starts in middle of first interval
      do while (X20 .lt. X20F )
       call RK(T,X1,X2,V1,V2,T0,TF,X10,X20,V10,V20,STEPS,PSIZE)

C      Take absolute value due to symmetry:
       angle = DABS(atan2(V2(STEPS),V1(STEPS)))
C     Output: The final angle. Check if almost constant
       write(11,*) '@ ', X20, angle,
     $      DABS(atan2(V2(STEPS-50),V1(STEPS-50)))
```

```
     $      ,k1/V10**2/tan(angle/2.0D0)

C     Update histogram:
       index       = int(angle/dangle)+1
C     Number of incoming particles per unit time
C     is proportional to radius of ring
C     of radius X20, the impact parameter:
     bins(index) = bins(index) +  X20 !db is cancelled from density
       Npart       = Npart       +  X20 !<-- i.e. from here
       X20         = X20         + dX20
      enddo

C     Print scattering cross section:
      R         = X20              !beam radius
      density   = Npart/(PI*R*R)   !beam flux density J
      sigmatot  = 0.0D0            !total cross section
      do i=1,Nbins
       angle    = (i-0.5D0)*dangle
       dOmega   = 2.0D0*PI*dsin(angle)*dangle !d(Solid Angle)
       sigma    = bins(i)/(density*dOmega)
     if(sigma.gt.0.0D0) write(11,*) 'ds= ',angle,angle*rad2deg,sigma
       sigmatot = sigmatot + sigma*dOmega
      enddo
      write(11,*) 'sigmatot= ',sigmatot
      close(11)

      end
```

Η μεταγλώττιση γίνεται όπως και με την περίπτωση το `rk2.f` ενώ τα αποτελέσματα βρίσκονται στο αρχείο `scatter.dat`. Έτσι για να παράγουμε τα αποτελέσματα των Σχημάτων 4.11 και 4.12 εκτελούμε τις εντολές:

```
> f77 scatter.f rk2_cb.f -o scatter
> scatter
 Runge-Kutta Method for 4-ODEs Integration
 Enter coupling constants:
1.0 0.0
 k1=    1.00000000000000       k2=    0.00000000000000
 Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,V10,V20:
5000 0 30 -50 0.02 3 0
```

```
 Enter final impact parameter X20F and step dX20:
1 0.0002
 No. Steps=          5000
Time: Initial T0 =  0.00000000000000     Final TF=  30.0000000000000
       X1(T0)= -50.0000000000000     X2(T0)= 2.0000000000000000E-002
       V1(T0)=  3.00000000000000     V2(T0)=  0.00000000000000
Impact par X20F =  1.00000000000000     dX20 = 2.0000000000000000E-004
```

και ακολούθως βλέπουμε τα αποτελέσματα με το gnuplot:

```
> gnuplot
gnuplot> set log
gnuplot> plot [:1000] "<grep ds= scatter.dat" u ((sin($2/2))**(-4)):($4) notit,\
 (1./(4.*3.**4))*x notit
gnuplot> unset log
gnuplot> set log y
gnuplot> plot [:] "<grep ds= scatter.dat" u 2:4 notit, \
 (1./(4.*3.**4))*(sin(x/2))**(-4) notit
```

Τα αποτελέσματα που παίρνουμε είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα αναμενόμενα από την αναλυτική έκφραση (4.25) , οπότε έχουμε αρκετή αυτοπεποίθηση να μελετήσουμε διαφορετικά δυναμικά στις επόμενες παραγράφους και στις ασκήσεις.

4.4.2 Σκέδαση σε Άλλα Δυναμικά Πεδία.

Ας εξετάσουμε πρώτα τη σκέδαση από μία δύναμη της μορφής

$$\vec{F} = f(r)\,\hat{r}\,, \qquad f(r) = \begin{cases} \frac{1}{r^2} - \frac{r}{a^3} & r \le a \\ 0 & r > a \end{cases}\,, \tag{4.26}$$

η οποία είναι ένα απλό μοντέλο της σκέδασης ποζιτρονίου e^+ (θετικό φορτιο $+e$) με άτομο υδρογόνου που αποτελείται από θετικά φορτισμένο πυρήνα (θετικό φορτιο $+e$) που περιβάλλεται από νέφος ηλεκτρονίου αντίθετου φορτίου. Φυσικά έχουμε θέσει τις κλίμακες έτσι ώστε $m_{e^+} = 1$ και $e^2/4\pi\epsilon_0 = 1$. Στην περίπτωση αυτή δεν έχουμε αναλυτική λύση οπότε θα χρησιμοποιήσουμε αριθμητικές μεθόδους για τον υπολογισμό των συναρτήσεων $b(\theta)$, $\sigma(\theta)$ καθώς και της συνολικής ενεργού διατομής σ_{tot}.

Η δυναμική ενέργεια δίνεται από τη σχέση:

$$f(r) = -\frac{dV(r)}{dr} \Rightarrow V(r) = \frac{1}{r} + \frac{r^2}{2a^2} - \frac{3}{2a}\,. \tag{4.27}$$

όπου επιλέξαμε $V(r) = 0$ για $r \geq a$. Ο προγραμματιμός της δύναμης γίνεται εύκολα στο αρχείο `rk_hy.f`:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C    The acceleration functions f3,f4(t,x1,x2,v1,v2) provided by the user
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Motion in hydrogen atom + positron:
C     f(r) = 1/r^2-r/k1^3
C     ax= f(r)*x1/r ay= f(r)*x2/r
      double precision function f3(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      double precision r2,r,fr
      r2=x1*x1+x2*x2
      r =dsqrt(r2)
      if(r .le.k1    .and. r2.gt.0.0D0)then
       fr = 1/r2-r/k1**3
      else
       fr = 0.0D0
      endif

      if(fr.gt.0.0D0 .and. r .gt.0.0D0)then
       f3=fr*x1/r              !dx3/dt=dv1/dt=a1
      else
       f3=0.0D0
      endif
      end

      double precision function f4(t,x1,x2,v1,v2)
      implicit none
      double precision t,x1,x2,v1,v2
      double precision k1,k2
      common /couplings/k1,k2
      double precision r2,r,fr
      r2=x1*x1+x2*x2
      r =dsqrt(r2)
      if(r .le.k1    .and. r2.gt.0.0D0)then
       fr = 1/r2-r/k1**3
      else
```

```
 fr = 0.0D0
endif

if(fr.gt.0.0D0 .and. r .gt.0.0D0)then
 f4=fr*x2/r              !dx3/dt=dv1/dt=a1
else
 f4=0.0D0
endif
end

double precision function energy(t,x1,x2,v1,v2)
implicit none
double precision t,x1,x2,v1,v2
double precision k1,k2
common /couplings/k1,k2
double precision r,Vr
r=dsqrt(x1*x1+x2*x2)
if( r .le.k1   .and. r .gt.0.0D0)then
 Vr = 1/r + 0.5D0*r*r/k1**3 - 1.5D0 / k1
else
 Vr = 0.0D0
endif
energy  = 0.5D0*(v1*v1+v2*v2) + Vr
end
```

Τα αποτελέσματα δίνονται στα Σχήματα 4.13–4.14. Βρίσκουμε ότι $\sigma_{tot} = \pi a^2$ (Άσκηση 4.9).

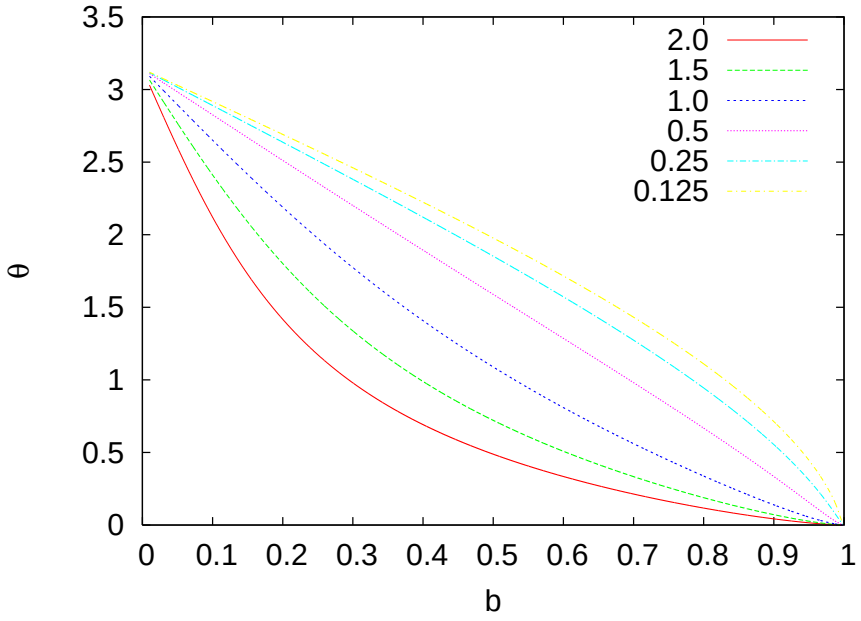
Ένα άλλο δυναμικό που παρουσιάζει ενδιαφέρον είναι το δυναμικό Yukawa ως φαινομενολογικό μοντέλο πυρηνικών αλληλεπιδράσεων:

$$V(r) = k\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r}\,. \tag{4.28}$$

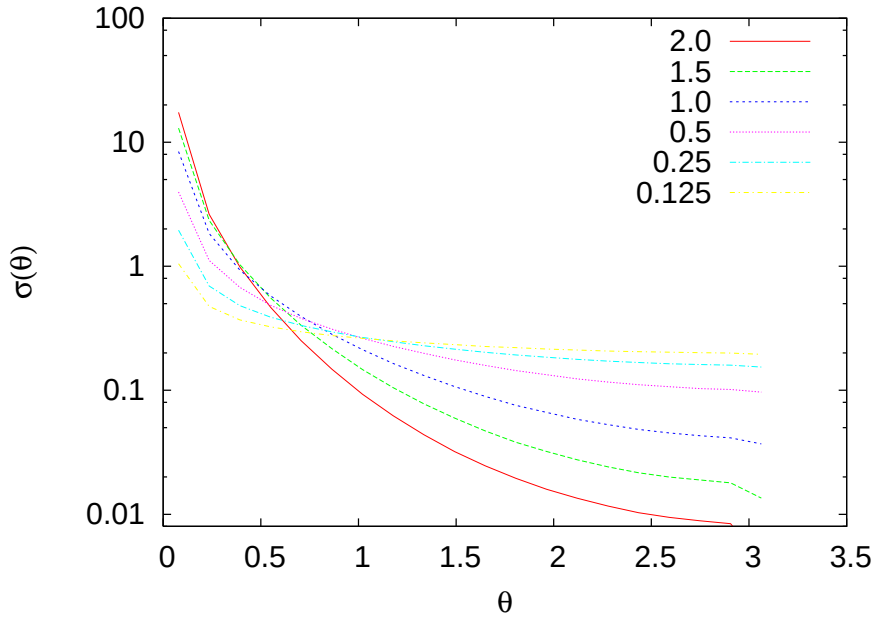
Το πεδίο αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί και ως μοντέλο ενεργούς αλληλεπιδράσεως των ηλεκτρονίων στα μέταλλα (Thomas–Fermi) ή το δυναμικό Debye στο κλασικό πλάσμα. Η δύναμη που ασκείται σε ένα σώμα υπό την επίδραση του δυναμικού αυτού είναι:

$$\vec{F}(r) = f(r)\,\hat{r}\,, \qquad f(r) = k\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r^2}\left(1+\frac{r}{a}\right) \tag{4.29}$$

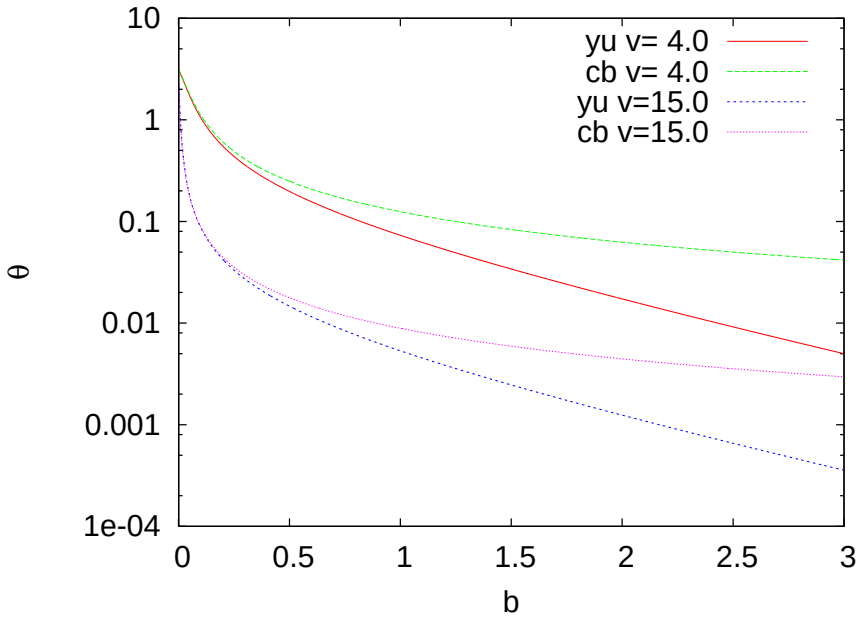
Ο προγραμματισμός της δύναμης γίνεται στο αρχείο `rk2_yu.f` κατά απόλυτη αναλογία με την προηγούμενη περίπτωση. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα Σχήματα 4.15–4.16.



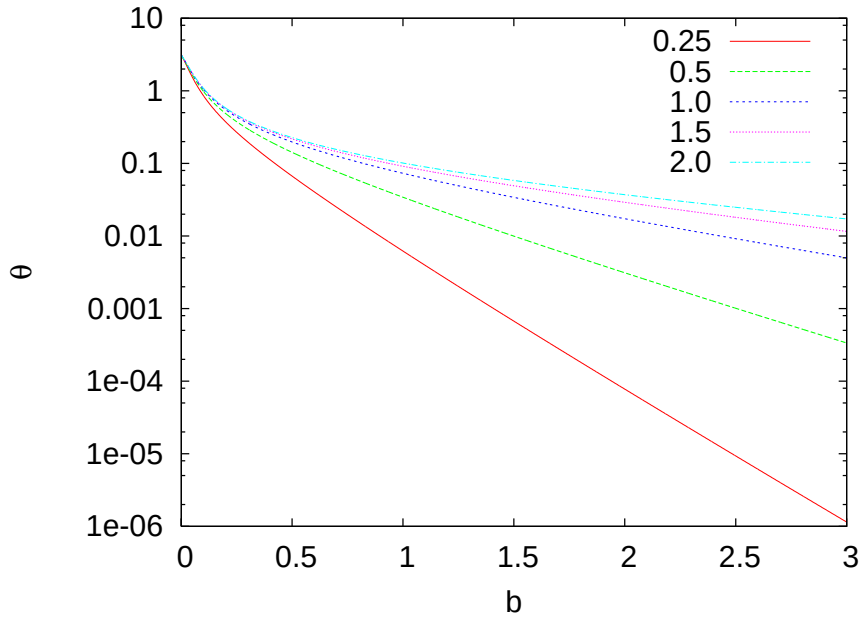
Σχήμα 4.13: Η συνάρτηση $b(\theta)$ για το δυναμικό της Σχέσης (4.27) για διαφορετικές τιμές της αρχικής ταχύτητας v. Έχουμε επιλέξει $a = 1$ και η ολοκλήρωση γίνεται σε 4000 βήματα από $t_i = 0$ έως $t_f = 40$ με $x(0) = -5$. Δίνεται συγκριτικά η σχέση (4.24) της σκέδασης Rutherford από τις καμπύλες μαρκαρισμένες ως cb.



Σχήμα 4.14: Η συνάρτηση $\sigma(\theta)$ για το δυναμικό της Σχέσης (4.27) για διαφορετικές τιμές της αρχικής ταχύτητας v. Έχουμε επιλέξει $a = 1$ και η ολοκλήρωση γίνεται σε 4000 βήματα από $t_i = 0$ έως $t_f = 40$ με $x(0) = -5$.



Σχήμα 4.15: Η συνάρτηση $b(\theta)$ για το δυναμικό Yukawa για διαφορετικές τιμές της αρχικής ταχύτητας v. Έχουμε επιλέξει $a = 1$, $k = 1$ και η ολοκλήρωση γίνεται σε 5000 βήματα από $t_i = 0$ έως $t_f = 30$ με $x(0) = -50$.



Σχήμα 4.16: Η συνάρτηση $b(\theta)$ για το δυναμικό Yukawa για διαφορετικές τιμές της "έκτασης " a της δύναμης. Έχουμε επιλέξει $v = 4.0$, $k = 1$ και η ολοκλήρωση γίνεται σε 5000 βήματα από $t_i = 0$ έως $t_f = 30$ με $x(0) = -50$.

4.5 Ασκήσεις

4.1 Αναπαράγετε τα αποτελέσματα των Σχημάτων 4.3 και 4.4. Συγκρίνετε τα αποτελέσματά σας με την γνωστή αναλυτική λύση.

4.2 Προγραμματίστε τη δύναμη που αισθάνεται φορτισμένο σωματίδιο σε ομογενές μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B\hat{k}$ και μελετήστε την τροχιά του για $\vec{v}(0) = v_{0x}\hat{i} + v_{0y}\hat{j}$. Για $x(0) = 1, y(0) = 0, v_{0y} = 0$ υπολογίστε την ακτίνα της τροχιάς και φτιάξτε γράφημα της σχέσης ακτίνας τροχιάς και v_{0x}. Συγκρίνετε με αυτό που αναμένετε από τον αναλυτικό υπολογισμό. (Μη σχετικιστικός υπολογισμός)

4.3 Μελετήστε τον ανομοιογενή αρμονικό ταλαντωτή $a_x = -\omega_1^2 x$, $a_y = -\omega_2^2 y$. Αναπαράγετε τις καμπύλες Lissajoux παίρνοντας $x(0) = 0, y(0) = 1, v_x(0) = 1, v_y(0) = 0$, $t_f = 2\pi$, $\omega_2^2 = 1$, $\omega_1^2 = 1, 2, 4, 9, 16, \ldots$. Τι γίνεται όταν $\omega_1^2 \neq n\omega_2^2$?

4.4 Αναπαράγετε τα αποτελέσματα του Πίνακα 4.1 και των Σχημάτων 4.5 και 4.6. Φτιάξτε διάγραμμα των ποσοτήτων $\ln - \ln$ και υπολογίστε την κλίση της ευθείας που θα προκύψει με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Είναι αυτή που περιμένετε? Υπολογίστε το σημείο τομής με τον κατακόρυφο άξονα και συγκρίνετε το αποτέλεσμά σας με το αναμενόμενο.

4.5 Υπολογίστε τη στροφορμή σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης στην πλανητική κίνηση και μελετήστε αν πράγματι διατηρήται. Δείξτε (αναλυτικά) ότι η διατήρηση της στροφορμής συνεπάγεται ότι το διάνυσμα θέσης του πλανήτη σαρώνει επιφάνεια με σταθερό ρυθμό.

4.6 Υπολογίστε την ταχύτητα διαφυγής v_e για $GM = 10.0$, $y(0) = 0.0$, $v_x(0) = 0$ συναρτήσει της αρχικής απόστασης $x_0 = x(0)$. Φτιαξτε διάγραμμα των ποσοτήτων $\ln x_0 - \ln v_e$ και υπολογίστε την κλίση και το σημείο τομής με τον κατακόρυφο άξονα. Συγκρίνετε τα αποτελέσματά σας με τα αναμενόμενα. (Υποδ.: Παρατηρήστε ότι η ενέργεια για $v_0 > v_e$ γίνεται αρνητική.)

4.7 Εξετάστε αν για την κλειστή τροχιά του πλανήτη με $GM = 10.0$, $x(0) = 1$, $y(0) = 0.0$, $v_x(0) = 0$, $v_y(0) = 4$ ισχύει η ορίζουσα ιδιότητα της έλλειψης $F_1P + F_2P = 2a$. Ως σημείο F_1 θα πάρετε το κέντρο της δύναμης και αφού προσδιορίσετε αριθμητικά το a θα πάρετε ώς F_2 το σημείο που είναι συμμετρικό ως προς το κέντρο της έλλειψης.

4.8 Θεωρήστε την κίνηση πλανητών σύμφωνα με την προηγούμενη άσκηση. Εφαρμόστε στιγμιαία ώθηση στην εφαπτόμενη διεύθυνση της τροχιάς αφού ο πλανήτης εκτελέσει περίπου 1/4 της τροχιάς του. Πόσο ευσταθής είναι η τροχιά στην ώθηση (δηλ. ποιά είναι η εξάρτηση της τροχιάς από το μέγεθος/διάρκεια της ώθησης)? Επαναλάβατε την ανάλυση όταν η ώθηση είναι στην κάθετη διεύθυνση.

4.9 Θεωρήστε το δυναμικό σκέδασης ποζιτρονίου–υδρογόνου της σχέσης (4.26) . Φτιάξτε τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $f(r)$ καθώς και της $V(r)$ για διαφορετικές τιμές του a. Υπολογίστε αριθμητικά τη συνολική ενεργό διατομή σ_{tot} και δείξτε ότι είναι ίση με πa^2.

4.10 Θεωρήστε το δυναμικό Morse που χρησιμοποιείται σε μοντέλα διατομικών μορίων:

$$V(r) = D\left(\exp(-2\alpha r) - 2\exp(-\alpha r)\right) \tag{4.30}$$

με $D, \alpha > 0$. Λύστε αριθμητικά το πρόβλημα αρχικά στη μία διάσταση και συγκρίνετε με τις γνωστές αναλυτικές λύσεις για ενέργεια $E < 0$:

$$x(t) = \frac{1}{\alpha}\ln\left\{\frac{D - \sqrt{D(D-|E|)}\sin(\alpha t\sqrt{2|E|/m} + C)}{|E|}\right\} \tag{4.31}$$

με τη σταθερά ολοκλήρωσης να δίνεται σα συνάρτηση της αρχικής θέσης και της ενέργειας από

$$C = \sin^{-1}\left[\frac{D - |E|e^{\alpha x_0}}{\sqrt{D(D-|E|)}}.\right] \tag{4.32}$$

Η κίνηση είναι περιοδική με περίοδο που εξαρτάται από την ενέργεια $= (\pi/\alpha)\sqrt{2m/|E|}$. Για > 0 έχουμε

$$x(t) = \frac{1}{\alpha}\ln\left\{\frac{\sqrt{D(D+E)}\cosh(\alpha t\sqrt{2E/m} + C) - D}{|E|}\right\} \tag{4.33}$$

ενώ για $E = 0$

$$x(t) = \frac{1}{\alpha}\ln\left\{\frac{1}{2} + \frac{D\alpha^2}{m}(t+C)^2\right\}. \tag{4.34}$$

Στις τελευταίες σχέσεις η σταθερά ολοκλήρωσης C δίνεται από άλλη σχέση και όχι από την (4.32) . Μελετήστε την κίνηση στο χώρο των φάσεων $(x, \dot{x})$ και μελετήστε τη μετάβαση από ανοιχτές σε κλειστές τροχίες του συστήματος.

4.11 Στην προηγούμενη άσκηση θεωρήστε τον όρο του ενεργού δυναμικού $V_{eff}(r) = l^2/2mr^2$ ($l \equiv |\vec{L}|$). Κάνετε τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $V_{tot}(r) = V(r) + V_{eff}(r)$ για $D = 20$, $\alpha = 1$, $m = 1$, $l = 1$, φυσικά για $r > 0$. Προσδιορίστε τη θέση ισορροπίας και την ενέργεια ιονισμού.

Μελετήστε αριθμητικά τις λύσεις $x(t)$, $y(t)$, $y(x)$, $r(t)$ στο επίπεδο για > 0, $= 0$, και < 0. Στην τελευταία περίπτωση μελετήστε και το πρόβλημα σκέδασης, υπολογίζοντας αριθμητικά τη συνάρτηση $b(\theta)$, $\sigma(\theta)$ και τη συνολική ενεργό διατομή σ_{tot}.

4.12 Θεωρήστε τη δύναμη $\vec{F}(r) = f(r)\,\hat{r}$ όπου $f(r) = 24(2/r^{13} - 1/r^7)$ η οποία είναι μοντέλο μοριακού δυναμικού. Υπολογίστε το δυναμικό $V(r)$ και κάνετε τη γραφική παράσταση της συνάρτησης $V_{tot}(r) = V(r) + V_{eff}(r)$. Προσδιορίστε τη θέση ισορροπίας και την ενέργεια ιονισμού.

Μελετήστε το πρόβλημα σκέδασης, υπολογίζοντας αριθμητικά τη συνάρτηση $b(\theta)$, $\sigma(\theta)$ και τη συνολική ενεργό διατομή σ_{tot}. Πόσο εξαρτάται ο υπολογισμός σας από την ελάχιστη γωνία σκέδασης?

4.13 Μελετήστε την κίνηση σωματιδίου υπό την επίδραση ελκτικής κεντρικής δύναμης $\vec{F} = -k/r^3\hat{r}$. Εξετάστε με ποιές αρχικές συνθήκες παίρνετε σπειροειδή τροχιά.

4.14 Υπολογίστε τη συνολική διαφορική διατομή σ_{tot} αναλυτικά και υπολογιστικά για την σκέδαση Rutherford. Τι παρατηρήτε στην αριθμητικά υπολογισμένη τιμή καθώς μεταβάλλετε τα όρια της ολοκλήρωσης?

4.15 Γράψτε πρόγραμμα που θα υπολογίζει την τροχιά φορτισμένου σωματιδίου όταν αυτό κινήται σε ηλεκτρικό πεδίο Coulomb που δημιουργήται από N ακίνητα σημειακά ηλεκτρικά φορτία.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Κίνηση στο Χώρο

Στο κεφάλαιο αυτό πέρα από τη μελέτη κίνησης σωματιδίου στις τρεις διαστάσεις, θα ασκηθούμε και στη χρήση λογισμικού το οποίο έχει γράψει κάποιος άλλος προγραμματιστής. Στη συγκεκριμένη περίπτωση θα χρησιμοποιήσουμε λογισμικό ελεύθερα διαθέσιμο από το depository `www.netlib.org`, και πιο συγκεκριμένα τη σουίτα `rksuite` των R.W. Brankin, I. Gladwell, and L.F. Shampine[13].

5.1 Runge–Kutta στις τρεις διαστάσεις.

Στις τρεις διαστάσεις, το πρόβλημα αρχικών τιμών που έχουμε να λύσουμε δίνεται από το σύστημα (3.6)

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x & \frac{dv_x}{dt} &= a_x(t,x,v_x,y,v_y,z,v_z) \\ \frac{dy}{dt} &= v_y & \frac{dv_z}{dt} &= a_y(t,x,v_x,y,v_y,z,v_z) \\ \frac{dz}{dt} &= v_z & \frac{dv_z}{dt} &= a_z(t,x,v_x,y,v_y,z,v_z)\,. \end{aligned} \tag{5.1}$$

Στην περίπτωση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε για αυξημένη ακρίβεια και σταθερότητα έναν αλγόριθμο της οικογένειας Runge–Kutta με προσαρμοζόμενο έλεγχο βήματος (adaptive stepsize control). Για λεπτομέρειες παραπέμπουμε τον αναγνώστη στο βιβλίο [5]. Σκοπός μας εδώ δεν είναι να αναλύσουμε το συγκεκριμένο αλγόριθμο αλλά να εξασκηθούμε στη χρήση προγραμμάτων που έχουν γράψει άλλοι για το συγκεκριμένο πρόβλημα που έχουμε να λύσουμε.

Φυσικά το πρώτο που έχουμε να κάνουμε είναι να προσδιορίσουμε το κατάλληλο λογισμικό για το προς λύση πρόβλημα. Για το λόγο αυτό,

ανάλογα με τη δυσκολία του προβλήματος αναζητούμε πληροφορίες στο δίκτυο, βιβλία σχετικά με το πρόβλημα και φυσικά αν το πρόβλημά μας είναι ερευνητικού επιπέδου αναζητούμε πληροφορίες στις ερευνητικές εργασίες και τους ειδικούς. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το πρόβλημά μας είναι σχετικά απλό και έχει πολλές και καλές λύσεις. Αναζητώντας λύση στο χώρο του ποιοτικού ελεύθερου λογισμικού αριθμητικών εφαρμογών, η πρώτη στάση που κάνουμε είναι στο `www.netlib.org` depository. Από τη λίστα του διαθέσιμου λογισμικού[1] επιλέγουμε τη βιβλιοθήκη `ode` και από αυτή τη σουίτα `rksuite`. Στο σύνδεσμο `http://www.netlib.org/ode/` διαβάζουμε

```
lib rksuite
alg Runge-Kutta
for initial value problem for first order ordinary differential equations
,A suite of codes for solving IVPs in ODEs. A choice of RK methods
,is available. Includes an error assessment facility and a sophisticated
,stiffness checker. Template programs and example results provided.
,Supersedes RKF45, DDERKF, D02PAF.
ref RKSUITE, Softreport 92-S1, Dept of Math, SMU, Dallas, Texas
by R.W. Brankin (NAG), I. Gladwell and L.F. Shampine (SMU)
lang Fortran
prec double
```

από όπου μαθαίνουμε ότι το πακέτο έχει αλγόριθμους τύπου Runge-Kutta γραμμένους σε γλώσσα Fortran και αφορά πραγματικές μεταβλητές διπλής ακρίβειας (`double precision`). Κατεβάζουμε τα αρχεία `rksuite.f`, `rksuite.doc`, `details.doc`, `templates`, `readme`.

Για να χρησιμοποιήσουμε υπορουτίνες στο πρόγραμμά μας η πρώτη προσέγγιση είναι να διαβάσουμε προσεκτικά τα εγχειρίδια χρήσης του πακέτου. Αυτό μπορεί να βρίσκεται (ανάλογα με την περίπτωση φυσικά) σε τυπωμένα έγγραφα, σε ηλεκτρονικά έγγραφα (html, pdf, ...), σε συνοδευτικά αρχεία με ονόματα τύπου `README`, `INSTALL`, ... ή αρχεία που βρίσκονται σε υποκαταλόγους με ονόματα όπως `doc/...`, σε online αρχεία βοήθειας (man pages) κ.ο.κ. Το καλό λογισμικό έχει όλη τη χρήσιμη πληροφορία στα αρχεία που περιέχουν τον πηγαίο κώδικα, κάτι που ισχύει και στην περίπτωσή μας.

Για να συνδέσουμε υποπρογράμματα στο δικό μας πρόγραμμα χρειαζόμαστε τις εξής βασικές πληροφορίες:

[1] Δυστυχώς το πακέτο `diffpack` ...αλλαξοπίστησε και πέρασε στο χώρο του εμπορικού λογισμικού.

- INPUT DATA: Δηλ. πώς παρέχουμε στο πρόγραμμά μας τις απαραίτητες πληροφορίες για να εκτελεστεί ο υπολογισμός. Είναι σαφές πως στην περίπτωσή μας χρειάζεται τουλάχιστον να δώσουμε τις αρχικές συνθήκες, το χρόνο ολοκλήρωσης και τον αριθμό βημάτων. Επίσης ο χρήστης πρέπει να παρέχει τις συναρτήσεις στο δεξί μέλος της (5.1) . Άλλες πληροφορίες που είναι δυνατόν να ζητούνται είναι λ.χ. επιθυμητή ακρίβεια, πληροφορίες για το hardware όπως διαθέσιμη αριθμητική ακρίβεια κλπ.

- OUTPUT DATA: Δηλ. πώς και πού το πρόγραμμα μας δίνει τα αποτελέσματα του υπολογισμού, αν αυτός έγινε ομαλά κλπ.

- WORKSPACE: Ειδικά σε ρουτίνες FORTRAN 77 που η μνήμη δεν ζητήται δυναμικά (αλλά όχι αναγκαστικά μόνο τότε) μπορεί να χρειαστεί να παρέχουμε στην υπορουτίνα χώρο στη μνήμη για τους ενδιάμεσους υπολογισμούς.

Η εγκατάσταση του λογισμικού είναι απλή. Όλος ο κώδικας είναι μέσα στο αρχείο `rksuite.f` και όπως μαθαίνουμε από το αρχείο `rksuite.doc` αρκεί να δώσουμε στο πρόγραμμα την τιμή τριών μεταβλητών που καθορίζουν την ακρίβεια υπολογιμού με υποδιαστολή στον υπολογιστή μας. Διαβάζουμε:

```
...
RKSUITE requires three environmental constants OUTCH, MCHEPS, DWARF.
When you use RKSUITE, you may need to know their values. You can
obtain them by calling the subroutine ENVIRN in the suite:

        CALL ENVIRN(OUTCH,MCHPES,DWARF)

 returns values

    OUTCH     - INTEGER
              Standard output channel on the machine being used.
    MCHEPS    - DOUBLE PRECISION
              The unit of roundoff, that is, the largest positive
                 number such that 1.0D0 + MCHEPS = 1.0D0.
    DWARF     - DOUBLE PRECISION
           The smallest positive number on the machine being used.
...
************************* Installation Details **********************
```

```
All machine-dependent aspects of the suite have been isolated in the
subroutine ENVIRN in the rksuite.for file.  Certain environmental
parameters must be specified in this subroutine.  The values in the
distribution version are those appropriate to the IEEE arithmetic
standard.  They must be altered, if necessary, to values appropriate
to the computing system you are using before calling the codes of the
suite. If the IEEE arithmetic standard values are not appropriate for
your system, appropriate values can often be obtained by calling
routines named in the Comments of ENVIRN.  ...
```

Δηλ. οι μεταβλητές OUTCH, MCHEPS, DWARF ορίζονται στην υπορουτίνα ENVIRN την οποία μπορεί να χρησιμοποιήσει για να τις χρησιμοποιήσει οπουδήποτε θέλει στο πρόγραμμα. Παρακάτω διαβάζουμε ότι το πρόγραμμα τις προ–ορίζει σε μάλλον ασφαλείς τιμές αλλά αν ο προγραμματιστής πρέπει να τις αλλάξει[2] τότε πρέπει να επέμβει στην υπορουτίνα ENVIRN και να τις αλλάξει. Άρα πρέπει να κοιτάξουμε μέσα στο αρχείο rksuite.f για να διαβάσουμε τα σχόλια της εν λόγω ρουτίνας:

```
...
      SUBROUTINE ENVIRN(OUTCH,MCHEPS,DWARF)
...
C  The following six statements are to be Commented out after verification that
C  the machine and installation dependent quantities are specified correctly.
...
     WRITE(*,*) ' Before using RKSUITE, you must verify that the  '
     WRITE(*,*) ' machine- and installation-dependent quantities  '
     WRITE(*,*) ' specified in the subroutine ENVIRN are correct, '
     WRITE(*,*) ' and then Comment these WRITE statements and the '
      WRITE(*,*) ' STOP statement out of ENVIRN.                   '
       STOP
...
C  The following values are appropriate to IEEE arithmetic with the typical
C   standard output channel.
C
      OUTCH = 6
      MCHEPS = 1.11D-16
      DWARF = 2.23D-308
```

Άρα αρκεί να σχολιάσουμε τις έξι εντολές WRITE και STOP αφού βεβαιωθούμε ότι οι επιλογές για τις μεταβλητές μας είναι ικανοποιητικές. Ένας

[2] Εδώ φαίνεται και η επαγγελματικότητα του συγγραφέα του κώδικα που προβλέπει ότι το πρόγραμμά του μπορεί να χρησιμοποιηθεί πολύ αργότερα κάτω από άγνωστες εξελίξεις στο hardware.

τρόπος να το ελέγξουμε με τη βοήθεια ελεύθερα διαθέσιμου λογισμικού είναι να αναζητήσουμε και να κατεβάσουμε τα αρχεία d1mach.f, i1mach.f από τη netlib.org, να τις τοποθετήσουμε στον υποκατάλογο blas/[3] και να γράψουμε το μικρό πρόγραμμα test_envirn_blas.f

```
      program testme
      implicit none
      integer OUTCH
      DOUBLE PRECISION  DWARF, MCHEPS
      INTEGER           I1MACH !blas routines
      DOUBLE PRECISION  D1MACH
      OUTCH = I1MACH(2)
      MCHEPS = D1MACH(3)
      DWARF = D1MACH(1)
      write(6,101)OUTCH,MCHEPS,DWARF
 101  format(I4,2E30.18)
      end
```

Μεταγλωττίζουμε και τρέχουμε

```
> f77 test_envirn_blas.f blas/*1mach.f -o test_envirn_blas
> ./test_envirn_blas
   6      0.111022302462515654E-15      0.225073858507201 38-307
```

και προκύπτει ότι οι επιλογές μας είναι ικανοποιητικές.

Το επόμενο βήμα είναι να μάθουμε να χρησιμοποιούμε τη ρουτίνα. Για το λόγο αυτό διαβάζουμε προσεκτικά το αρχείο rksuite.doc από το οποίο περιληπτικά μαθαίνουμε τα εξής: Το πρόγραμμα χρησιμοποιεί τη ρουτίνα UT για να ολοκληρώσει με τη μέθοδο Runge-Kutta με προσαρμοζόμενο βήμα. Το βήμα προσαρμόζεται χρησιμοποιώντας Runge-Kutta 2ης-3ης τάξης (METHOD=1), 4ης-5ης τάξης (METHOD=2) ή 7ης-8ης τάξης (METHOD=3) από τις οποίες θα διαλέξουμε METHOD=2. Πριν καλέσουμε την UT, πρέπει να καλέσουμε μια υπορουτίνα αρχικοποίησης, την SETUP. Τέλος ο χρήστης παρέχει την υπορουτίνα F η οποία ορίζει τις παραγώγους των συναρτήσεων, δηλ. στην περίπτωσή μας το δεξί μέλος των 5.1. Ένας γρήγορος τρόπος για να μάθουμε να χρησιμοποιούμε ένα πρόγραμμα είναι "by example". Στην περίπτωσή μας στο πακέτο παρέχονται δοκιμαστικά προγράμματα για εκμάθηση και έλεγχο ορθότητας. Αυτά βρίσκονται στο αρχείο templates το οποίο ανοίγει από μόνο του με το πρόγραμμα φλοιού sh:

[3] Σε επόμενο κεφάλαιο θα μάθουμε περισσότερα για τη βασική βιβλιοθήκη γραμμικής άλγεβρας blas.

```
> sh templates
tmpl1.out
tmpl1a.f
...
```

Το πρόγραμμα tmpl1a.f έχει τη λύση για τον αρμονικό ταλαντωτή και φαίνεται με πολλά επεξηγηματικά σχόλια η απλή χρήση του προγράμματος, την οποία επιλέγουμε τελικά στη δικιά μας περίπτωση. Έτσι καταλήγουμε στο παρακάτω πρόγραμμα για την οδήγηση της ολοκλήρωσης, το οποίο αποθηκεύουμε στο αρχείο rk3.f

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to solve a 6 ODE system using Runge-Kutta Method
C     Output is written in file rk3.dat
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program rk3_solve
      include 'rk3.inc'
      double precision T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30
      double precision t,dt,tstep
      integer STEPS
      integer i
      double precision energy
C     Arrays/variables needed by rksuite:
    double precision TOL,THRES(NEQ), WORK(LENWRK), Y(NEQ), YMAX(NEQ),
     *     YP(NEQ), YSTART(NEQ),HSTART
      logical  ERRASS, MESSAGE
      integer  UFLAG
C     .. External Subroutines ..
      EXTERNAL          F, SETUP, STAT, UT


C     Input:
      print *,'Runge-Kutta Method for 6-ODEs Integration'
      print *,'Enter coupling constants k1,k2,k3,k4:'
      read(5,*) k1,k2,k3,k4
      print *,'k1= ',k1,' k2= ',k2,' k3= ',k3,' k4= ',k4
      print *,'Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30:'
      read(5,*) STEPS,T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30
      print *,'No. Steps= ',STEPS
      print *,'Time: Initial T0 =',T0,' Final TF=',TF
     print *,'        X1(T0)=',X10,' X2(T0)=',X20,' X3(T0)=',X30
     print *,'        V1(T0)=',V10,' V2(T0)=',V20,' V3(T0)=',V30
```

```
C     Initial Conditions
      dt    = (TF-T0)/STEPS
      YSTART(1) = X10
      YSTART(2) = X20
      YSTART(3) = X30
      YSTART(4) = V10
      YSTART(5) = V20
      YSTART(6) = V30
C
C  Set error control parameters.
C
      TOL = 5.0D-6
      do i = 1, NEQ
         THRES(i) = 1.0D-10
      enddo
      MESSAGE = .TRUE.
      ERRASS  = .FALSE.
      HSTART  = 0.0D0
C     Initialization:
     call SETUP(NEQ,T0,YSTART,TF,TOL,THRES,METHOD,'Usual Task',
     *     ERRASS,HSTART,WORK,LENWRK,MESSAGE)
      open(unit=11,file='rk3.dat')
      write(11,100) T0,YSTART(1),YSTART(2),YSTART(3),YSTART(4),
     *     YSTART(5),YSTART(6),energy(T0,YSTART)
C     Calculation:
      do i=1,STEPS
       t = T0 + i*dt
       call UT(F,t,tstep,Y,YP,YMAX,WORK,UFLAG)
       if(UFLAG.GT.2) goto 60
       write(11,100) tstep,Y(1),Y(2),Y(3),Y(4),Y(5),Y(6),
     *      energy(tstep,Y)
      enddo
 60   continue
      close(11)
 100  format(8E25.15)
      end
```

Παρατηρούμε ότι τους κοινούς ορισμούς τους τοποθετήσαμε στο ξεχωριστό αρχείο `rk3.inc` για να χρησιμοποιηθούν και από τη συνάρτηση των παραγώγων. Τα περιεχόμενα του αρχείου αυτού αντικαθιστούν την

σειρά `include 'rk3.inc'`:

```
C Basic definitions of variables for the suite rksuite
      implicit none
C     NEQ is the number of equations, 6 in 3 dimansions
C     METHOD=2 is for RK45.
      INTEGER             NEQ,  LENWRK,       METHOD
      PARAMETER          (NEQ=6,LENWRK=32*NEQ,METHOD=2)
      REAL *8           k1,k2,k3,k4 !force couplings
      COMMON /COUPLINGS/k1,k2,k3,k4
```

Παρατηρούμε ότι εδώ θέτουμε τον αριθμό των διαφορικών εξισώσεων `NEQ=6` καθώς και τη μέθοδο ολοκλήρωσης `METHOD=2`. Η μεταβλητή `LENWRK` καθορίζει το μέγεθος της μνήμης που χρειάζεται το πρόγραμμα για τους ενδιάμεσους υπολογισμούς. Το πρόγραμμα αρχίζει ακριβώς όπως και τα προηγούμενα, αφήνοντας έτσι το interface με το χρήστη αναλλοίωτο. Οι αρχικές θέσεις και ταχύτητες αποθηκεύονται στο array `YSTART` στις θέσεις $1 \ldots 6$. Στις 3 πρώτες θέσεις έχουμε τις συντεταγμένες χώρου ενώ στις 3 τελευταίες τις συντεταγμένες της ταχύτητας. Αφου καθορίσουμε μερικές μεταβλητές που καθορίζουν τη συμπεριφορά του προγράμματος (δες αρχείο `rksuite.doc` για λεπτομέρειες) καλούμε την υπορουτίνα `SETUP`. Στη συνέχεια τυπώνουμε τις αρχικές συνθήκες στο αρχείο εξόδου `rk3.dat` και φτάνουμε στην καρδιά του προγράμματος, την ολοκλήρωση:

```
      do i=1,STEPS
       t = T0 + i*dt
       call UT(F,t,tstep,Y,YP,YMAX,WORK,UFLAG)
       if(UFLAG.GT.2) goto 60
       write(11,100) tstep,Y(1),Y(2),Y(3),Y(4),Y(5),Y(6),
     *      energy(tstep,Y)
      enddo
```

`F` είναι η συνάρτηση που υπολογίζει τις παραγώγους, γραμμένη από εμάς παρακάτω. `t` είναι ο χρόνος στον οποίο επιθυμούμε να έχουμε το αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης. Λόγω προσαρμοζόμενου βήματος, αυτός μπορεί να μην είναι ακριβώς ο ίδιος με αυτόν που τελικά μας επιστρέφει η υπορουτίνα, δηλ. τον `tstep`. `Y` είναι οι τιμές των συναρτήσεων, δηλ. x= `Y(1)`, y= `Y(2)`, z= `Y(2)` και v_x= `Y(4)`, v_y= `Y(5)`, v_z= `Y(6)`. `energy(t,Y)` είναι η συνάρτηση που υπολογίζει τη μηχανική ενέργεια του συστήματος την οποία θα γράψουμε στο ίδιο αρχείο με τη συνάρτηση `F`. Τέλος, η μεταβλητή `UFLAG` είναι "σημαία" που δείχνει αν ο υπολογισμός έχει τελειώσει, οπότε βγαίνουμε από τον do βρόχο, ή αν δημιουργήθηκε σφάλμα,

οπότε το πρόγραμμα τερματίζει με μύνημα σφάλματος από τη ρουτίνα UT. Παρακάτω παραθέτουμε τον κώδικα δοκιμής, την κίνηση βλήματος στο πεδίο βαρύτητας με δύναμη αντίστασης από ρευστό ανάλογη της ταχήτητας το βλήματος $\vec{F}_r = -k\vec{v}$. Ο κώδικας αποθηκεύεται στο αρχείο rk3_g.f. Παίρνουμε $\vec{g} =$ -k1 $\hat{k}$ και $k =$ k2.

```
      subroutine F(T,Y,YP)
      include 'rk3.inc'
      double precision t
      double precision Y(*),YP(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      v1 = Y(4)
      v2 = Y(5)
      v3 = Y(6)
C     Velocities:   dx_i/dt = v_i
      YP(1) = v1
      YP(2) = v2
      YP(3) = v3
C     Acceleration: dv_i/dt = a_i
      YP(4) = -k2*v1
      YP(5) = -k2*v2
      YP(6) = -k2*v3-k1
      end

      double precision function energy(T,Y)
      include 'rk3.inc'
      double precision t,e
      double precision Y(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      v1 = Y(4)
      v2 = Y(5)
      v3 = Y(6)
C     Kinetic Energy
      e = 0.5*(v1*v1+v2*v2+v3*v3)
C     Potential Energy
```

```
      e = e + k1*x3
      energy = e
      end
```

Βλέπουμε πως για ευκολία, "μεταφράσαμε" τις τιμές του array Y(NEQ) σε μεταβλητές θέσης και ταχύτητας και μετά χρησιμοποιήσαμε τους γνωστούς τύπους. Η μεταγλώττιση, υποθέτοντας ότι τη σουίτα rksuite.f την τοποθετήσαμε στον υποκατάλογο rksuite/, το τρέξιμό και η επισκόπιση των αποτελεσμάτων με το gnuplot γίνεται με τις εντολές:

```
> f77 rk3.f rk3_g.f rksuite/rksuite.f -o rk3
> ./rk3
 Runge-Kutta Method for 6-ODEs Integration
 Enter coupling constants k1,k2,k3,k4:
10 0 0 0
 k1=    10.0000000000000       k2=   0.000000000000000E+000  k3=
  0.000000000000000E+000  k4=   0.000000000000000E+000
 Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30:
10000 0 3 0 0 0 1 1 1
 No. Steps=        10000
 Time: Initial T0 = 0.000000000000000E+000 Final TF=  3.00000000000000
        X1(T0)= 0.000000000000000E+000 X2(T0)= 0.000000000000000E+000
  X3(T0)=  0.000000000000000E+000
        V1(T0)=  1.00000000000000     V2(T0)=  1.00000000000000
  V3(T0)=   1.00000000000000
> gnuplot
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:2 with lines title "x1(t)"
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:3 with lines title "x2(t)"
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:4 with lines title "x3(t)"
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:5 with lines title "v1(t)"
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:6 with lines title "v2(t)"
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:7 with lines title "v3(t)"
gnuplot> plot "rk3.dat"  using 1:8 with lines title "E(t)"
gnuplot> set title "trajectory"
gnuplot> splot "rk3.dat" using 2:3:4 with lines  notitle
```

Την παραπάνω εργασία την έχουμε κωδικοποιήσει σε σενάριο φλοιού (shell script) με όνομα rk3.csh. Από το αρχείο αυτό χρησιμοποιήται το ανάλογο αρχείο για animation με το όνομα rk3_animate.csh. Έτσι η παραπάνω δουλειά συνοψίζεται στην παρακάτω εντολή:

```
./rk3.csh -f 1 -- 10 0. 0 0 0 0 0 1 1 1 10000 0 3
```

5.2 Κίνηση Σωματίου σε ΗΜ πεδίο.

Μετά την ανάλυση της προηγούμενης παραγράφου, έχουμε τα απαραίτητα εργαλεία να μελετήσουμε τη μη–σχετικιστική κίνηση φορτισμένου σωματίου μέσα σε ηλεκτρομαγνητικό (ΗΜ) πεδίο. Αυτό υπόκειται στην επίδραση της δύναμης Lorentz:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})\,. \tag{5.2}$$

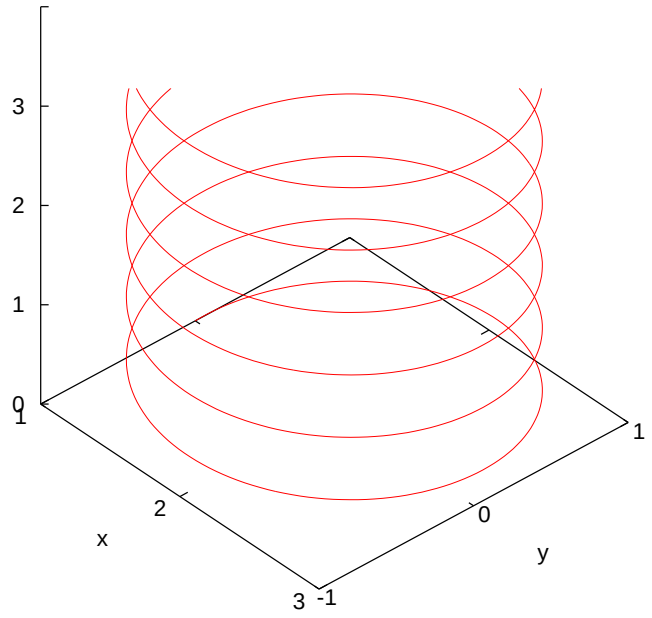
Ας θεωρήσουμε πρώτα την απλή περίπτωση σταθερού ΗΜ πεδίου της μορφής $\vec{E} = E_x\hat{x} + E_y\hat{y} + E_z\hat{z}$, $\vec{B} = B\hat{z}$. Οι συνιστώσες της επιτάχυνσης του σωματίου θα είναι:

$$\begin{aligned} a_x &= (qE_x/m) + (qB/m)v_y \\ a_y &= (qE_y/m) - (qB/m)v_x \\ a_z &= (qE_z/m)\,. \end{aligned} \tag{5.3}$$

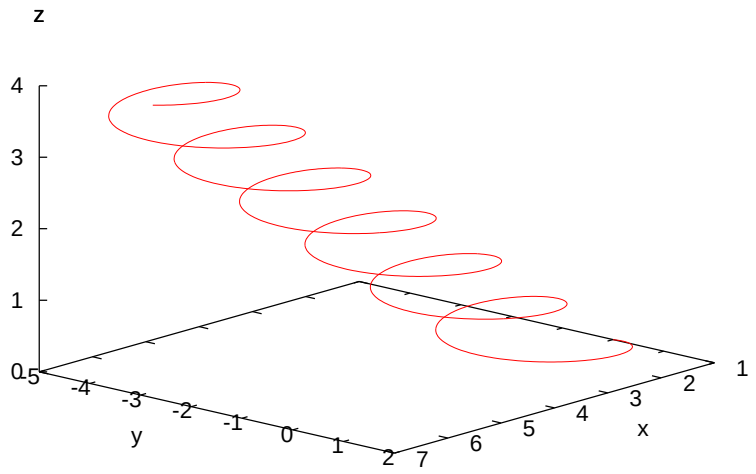
Προγραμματίζομε το παραπάνω δυναμικό πεδίο στο αρχείο `rk3_B.f` θέτοντας `k1` $= qB/m$, `k2` $= qE_x/m$, `k3` $= qE_y/m$, `k3` $= qE_z/m$:

```
C  Particle in constant Magnetic and electric field
C  q B/m = k1 z   q E/m = k2 x + k3 y + k4 z
      subroutine F(T,Y,YP)
      include 'rk3.inc'
      double precision t
      double precision Y(*),YP(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      v1 = Y(4)
      v2 = Y(5)
      v3 = Y(6)
C     Velocities:   dx_i/dt = v_i
      YP(1) = v1
      YP(2) = v2
      YP(3) = v3
C     Acceleration: dv_i/dt = a_i
      YP(4) = k2 + k1 * v2
      YP(5) = k3 - k1 * v1
      YP(6) = k4
      end
```

```
      double precision function energy(T,Y)
      include 'rk3.inc'
      double precision t,e
      double precision Y(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      v1 = Y(4)
      v2 = Y(5)
      v3 = Y(6)
C     Kinetic Energy
      e = 0.5*(v1*v1+v2*v2+v3*v3)
C     Potential Energy
      e = e -zk2*x1 - k3*x2 - k4*x3
      energy = e
      end
```



Σχήμα 5.1: Τροχιά φορτισμένου σωματιδίου σε σταθερό μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B\hat{z}$ με $qB/m = 1.0$, $\vec{v}(0) = 1.0\hat{y} + 0.1\hat{z}$, $\vec{r}(0) = 1.0\hat{x}$. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης γίνεται με τη μέθοδο RK45 με 1000 βήματα από $t_0 = 0$ μέχρι $t_f = 40$.



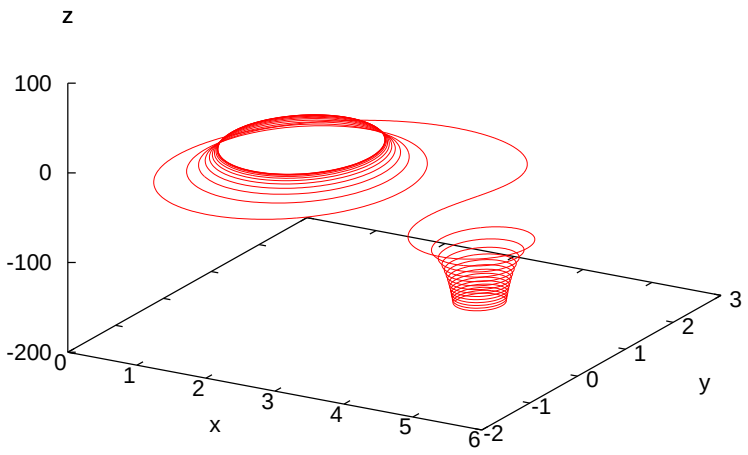
Σχήμα 5.2: Τροχιά φορτισμένου σωματιδίου σε σταθερό μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B\hat{z}$ με $qB/m = 1.0$, και σταθερό ηλεκτρικό πεδίο $\vec{E} = E_x\hat{x} + E_y\hat{y}$ με $qE_x/m = qE_y/m = 0.1$, $\vec{v}(0) = 1.0\hat{y} + 0.1\hat{z}$, $\vec{r}(0) = 1.0\hat{x}$. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης γίνεται με τη μέθοδο RK45 με 1000 βήματα από $t_0 = 0$ μέχρι $t_f = 40$. Η τροχιά δεν είναι υπό κλίμακα, προσέξτε τις διαφορετικές κλίμακες στους τρεις άξονες.

Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να μελετήσουμε πεδία τα οποία είναι χωροεξαρτημένα. Η επιλογές μας πρέπει να ικανοποιούν τις εξισώσεις του Maxwell! Για να δούμε τον περιορισμό στο χώρο φορτισμένου σωματιδίου με την επίδραση μαγνητικού πεδίου παίρνουμε τις απλές περιπτώσεις $\vec{B} = B_y\hat{y} + B_z\hat{z}$ με $qB_y/m = -k_2 y$, $qB_z/m = k_1 + k_2 z$ και $qB_y/m = k_3 z$, $qB_z/m = k_1 + k_2 y$. Παρατηρούμε ότι ισχύει $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$.

Τα αποτελέσματά μας φαίνονται στα Σχήματα 5.1–5.4.

5.3 Σχετικιστική Κίνηση.

Στην παράγραφο αυτή θα συζητήσουμε τον υπολογισμό τροχιάς σωματιδίου μη μηδενικής μάζας ηρεμίας όταν η ταχύτητά του γίνεται συγκρίσιμη με αυτή του φωτός. Παρακάτω θα θέσουμε την ταχύτητα του φωτός στο κενό $c = 1$. Οι εξισώσεις κίνησης σωματιδίου μάζας ηρεμίας $m_0 > 0$, μάζας $m = m_0/\sqrt{1 - v^2}$, ορμής $\vec{p} = m\vec{v}$ και ενέργειας



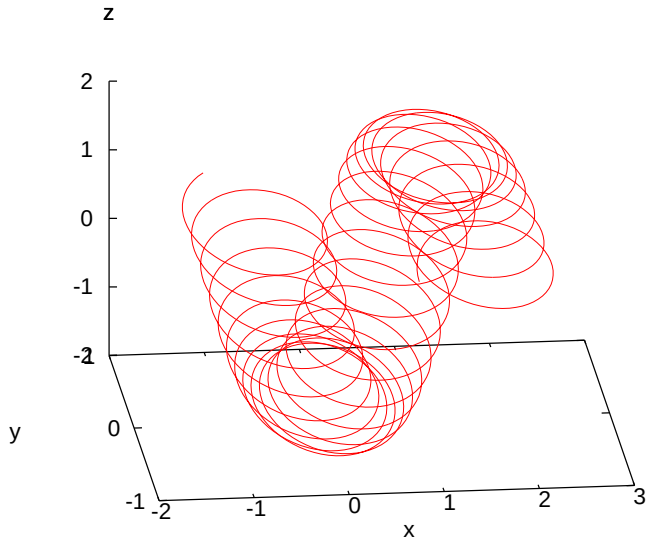
Σχήμα 5.3: Τροχιά φορτισμένου σωματιδίου σε μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B_y\hat{y} + B_z\hat{z}$ με $qB_y/m = -0.02y$, $qB_z/m = 1 + 0.02z$, $\vec{v}(0) = 1.0\hat{y} + 0.1\hat{z}$, $\vec{r}(0) = 1.0\hat{x}$. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης γίνεται με τη μέθοδο RK45 με 10000 βήματα από $t_0 = 0$ μέχρι $t_f = 500$. Η τροχιά δεν είναι υπό κλίμακα, προσέξτε τις διαφορετικές κλίμακες στους τρεις άξονες.

$E = m = \sqrt{p^2 + m_0^2}$ μέσα σε δυναμικό πεδίο $\vec{F}$ δίνονται από τις σχέσεις:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}\,. \tag{5.4}$$

Για να τις γράψουμε σε σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης χρησιμοποιούμε τις σχέσεις:

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\vec{p}}{E} = \frac{\vec{p}}{\sqrt{p^2 + m_0^2}}\,, \tag{5.5}$$



Σχήμα 5.4: Τροχιά φορτισμένου σωματιδίου σε μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B_y\hat{y} + B_z\hat{z}$ με $qB_y/m = 0.08z$, $qB_z/m = 1.4 + 0.08y$, $\vec{v}(0) = 1.0\hat{y} + 0.1\hat{z}$, $\vec{r}(0) = 1.0\hat{x}$. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης γίνεται με τη μέθοδο RK45 με 40000 βήματα από $t_0 = 0$ μέχρι $t_f = 3000$. Η τροχιά δεν είναι υπό κλίμακα, προσέξτε τις διαφορετικές κλίμακες στους τρεις άξονες.

οι οποίες μαζί με την $\vec{v} = d\vec{r}/dt$ μας δίνουν:

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= \frac{(p_x/m_0)}{\sqrt{1+(p/m_0)^2}} \\
\frac{dy}{dt} &= \frac{(p_y/m_0)}{\sqrt{1+(p/m_0)^2}} \\
\frac{dz}{dt} &= \frac{(p_z/m_0)}{\sqrt{1+(p/m_0)^2}} \\
\frac{d(p_x/m_0)}{dt} &= \frac{F_x}{m_0} \\
\frac{d(p_y/m_0)}{dt} &= \frac{F_y}{m_0} \\
\frac{d(p_z/m_0)}{dt} &= \frac{F_z}{m_0}\,,
\end{aligned} \tag{5.6}$$

που αποτελούν ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης για τις συναρτήσεις $(x(t), y(t), z(t), (p_x/m_0)(t), (p_y/m_0)(t), (p_z/m_0)(t))$. Για τη

λύση με τη μέθοδο Runge-Kutta προσαρμοσμένου βήματος 4ης – 5ης τάξης σύμφωνα με τις προηγούμενες παραγράφους, χρειαζόμαστε τις αρχικές συνθήκες $(x(0), y(0), z(0), (p_x/m_0)(0), (p_y/m_0)(0), (p_z/m_0)(0))$. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{v_x}{\sqrt{1-v^2}} \qquad & v_x &= \frac{(p_x/m_0)}{\sqrt{1+(p/m_0)^2}} \\ p_y &= \frac{v_y}{\sqrt{1-v^2}} \qquad & v_y &= \frac{(p_y/m_0)}{\sqrt{1+(p/m_0)^2}} \\ p_z &= \frac{v_z}{\sqrt{1-v^2}} \qquad & v_z &= \frac{(p_z/m_0)}{\sqrt{1+(p/m_0)^2}} \end{aligned} \tag{5.7}$$

μπορούμε να δώσουμε εναλλακτικά ως αρχικές συνθήκες $(x(0), y(0), z(0), v_x(0), v_y(0), v_z(0$
καθώς και από τις λύσεις $(x(t), y(t), z(t), (p_x/m_0)(t), (p_y/m_0)(t), (p_z/m_0)(t))$
να πάρουμε τις $(x(t), y(t), z(t), v_x(t), v_y(t), v_z(t))$. Προσοχή όμως να ελέγχουμε ότι ισχύει πάντα ($m_0 > 0$)

$$v^2 = (v_x)^2 + (v_y)^2 + (v_z)^2 < 1\,. \tag{5.8}$$

Για τον προγραμματισμό του παραπάνω προβλήματος χρειάζεται να μεταβάλλουμε ελαφρά το πρόγραμμα `rk3.f`. Οι αλλαγές αφορούν το κυρίως πρόγραμμα μόνο στη σχέση ταχυτήτων ορμών που μπορεί να επιθυμεί να μελετήσει ο χρήστης. Όσο για το αρχείο που προγραμματίζουμε το δυναμικό πεδίο, χρείαζεται να μεταβάλλουμε μόνο τις σχέσεις για την ταχύτητα, μια και η προς ολοκλήρωση συνάρτηση είναι τώρα η ορμή. Ας αρχίσουμε πρώτα με το κυρίως πρόγραμμα, `sr.f`:

```
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     Program to solve a 6 ODE system using Runge-Kutta Method
C     Output is written in file sr.dat
C     Interface to be used with relativistic particles.
C     CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program sr_solve
      include 'sr.inc'
      double precision T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30
      double precision P10,P20,P30
      double precision P1,P2,P3,V1,V2,V3
      double precision t,dt,tstep
      integer STEPS
      integer i
```

```
      double precision energy
C     Arrays/variables needed by rksuite:
     double precision TOL,THRES(NEQ), WORK(LENWRK), Y(NEQ), YMAX(NEQ),
     *     YP(NEQ), YSTART(NEQ),HSTART
      logical  ERRASS, MESSAGE
      integer  UFLAG
C     .. External Subroutines ..
      EXTERNAL          F, SETUP, STAT, UT


C     Input:
      print *,'Runge-Kutta Method for 6-ODEs Integration'
      print *,'Special Relativistic Particle:'
      print *,'Enter coupling constants k1,k2,k3,k4:'
      read(5,*) k1,k2,k3,k4
      print *,'k1= ',k1,' k2= ',k2,' k3= ',k3,' k4= ',k4
      print *,'Enter STEPS,T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30:'
      read(5,*) STEPS,T0,TF,X10,X20,X30,V10,V20,V30
      call momentum(V10,V20,V30,P10,P20,P30)
      print *,'No. Steps= ',STEPS
      print *,'Time: Initial T0 =',T0,' Final TF=',TF
     print *,'         X1(T0)=',X10,' X2(T0)=',X20,' X3(T0)=',X30
     print *,'         V1(T0)=',V10,' V2(T0)=',V20,' V3(T0)=',V30
     print *,'         P1(T0)=',P10,' P2(T0)=',P20,' P3(T0)=',P30

C     Initial Conditions
      dt    = (TF-T0)/STEPS
      YSTART(1) = X10
      YSTART(2) = X20
      YSTART(3) = X30
      YSTART(4) = P10
      YSTART(5) = P20
      YSTART(6) = P30
C
C  Set error control parameters.
C
      TOL = 5.0D-6
      do i = 1, NEQ
         THRES(i) = 1.0D-10
      enddo
      MESSAGE = .TRUE.
```

```
      ERRASS  = .FALSE.
      HSTART  = 0.0D0
C     Initialization:
      call SETUP(NEQ,T0,YSTART,TF,TOL,THRES,METHOD,'Usual Task',
     *     ERRASS,HSTART,WORK,LENWRK,MESSAGE)
      open(unit=11,file='sr.dat')
      call velocity(YSTART(4),YSTART(5),YSTART(6),V1,V2,V3)
      write(11,100) T0,YSTART(1),YSTART(2),YSTART(3),
     *     V1,V2,V3,
     *     energy(T0,YSTART),
     *     YSTART(4),YSTART(5),YSTART(6)
C     Calculation:
      do i=1,STEPS
       t = T0 + i*dt
       call UT(F,t,tstep,Y,YP,YMAX,WORK,UFLAG)
       if(UFLAG.GT.2) goto 60
       call velocity(Y(4),Y(5),Y(6),V1,V2,V3)
       write(11,100) tstep,Y(1),Y(2),Y(3),
     *      V1,V2,V3,
     *      energy(tstep,Y),
     *      Y(4),Y(5),Y(6)
      enddo
 60   continue
      close(11)
 100  format(11E25.15)
      end

C     momentum -> velocity  transformation
      subroutine velocity(p1,p2,p3,v1,v2,v3)
      implicit none
      double precision v1,v2,v3,p1,p2,p3,v,p,vsq,psq

      psq = p1*p1+p2*p2+p3*p3

      v1  = p1/dsqrt(1.0D0+psq)
      v2  = p2/dsqrt(1.0D0+psq)
      v3  = p3/dsqrt(1.0D0+psq)
      end

C     velocity -> momentum transformation
      subroutine momentum(v1,v2,v3,p1,p2,p3)
```

```
      implicit none
      double precision v1,v2,v3,p1,p2,p3,v,p,vsq,psq

      vsq = v1*v1+v2*v2+v3*v3
      if(vsq .ge. 1.0D0 ) stop 'sub momentum: vsq >= 1'
      p1  = v1/dsqrt(1.0D0-vsq)
      p2  = v2/dsqrt(1.0D0-vsq)
      p3  = v3/dsqrt(1.0D0-vsq)
      end
```

Παρατηρούμε το ρόλο που παίζουν οι υπορουτίνες `momentum` και `velocity` οι οποίες αναλαμβάνουν τους μετασχηματισμούς (5.7) . Εκεί γίνεται και ο έλεγχος της συνθήκες (5.8) . Θα τις χρησιμοποιήσουμε και στο αρχείο που θα γράψουμε το πρόγραμμα που θα δίνει τις παραγώγους των συναρτήσεων για κάθε πεδίο δυνάμεων που θα θελήσουμε να μελετήσουμε.

Η πρώτη μας απόπειρα είναι να μελετήσουμε την κίνηση σχετικιστικού φορτισμένου σωματιδίου μέσα σε σταθερό ΗΜ πεδίο. Μέσα στο πεδίο αυτό η επιτάχυνση του σωματιδίου δίνεται από τις σχέσεις (5.3) . Οι σχέσεις αυτές προγραμματίζονται μέσα στο αρχείο `sr_B.f`. Πέρα από τις αλλαγές που αναφέραμε μέχρι τώρα, πρέπει να προσέξουμε και τον ορισμό της κινητικής ενέργειας:

$$T = \left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2}} - 1 \right) m_0 = \left(\sqrt{1 + (p/m_0)^2} - 1 \right) m_0 \qquad (5.9)$$

Το περιεχόμενο του `sr_B.f` είναι:

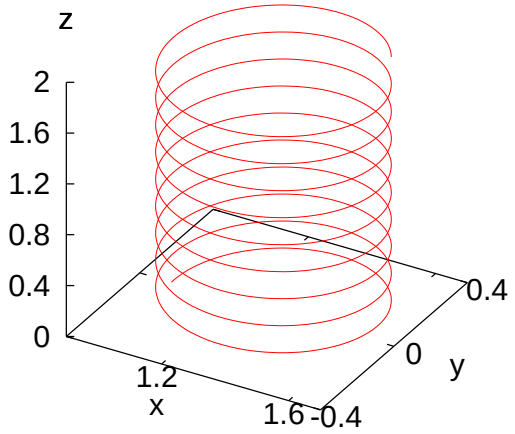
```
C  Particle in constant Magnetic and electric field
C  q B/m = k1 z   q E/m = k2 x + k3 y + k4 z
      subroutine F(T,Y,YP)
      include 'sr.inc'
      double precision t
      double precision Y(*),YP(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3,p1,p2,p3
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      p1 = Y(4)
      p2 = Y(5)
      p3 = Y(6)
```

```
      call velocity(p1,p2,p3,v1,v2,v3)
C     now we can use all x1,x2,x3,p1,p2,p3,v1,v2,v3
C     Velocities:   dx_i/dt = p_i/sqrt(1+p^2) for m_0=1
      YP(1) = v1
      YP(2) = v2
      YP(3) = v3
C     Acceleration:
      YP(4) = k2 + k1 * v2
      YP(5) = k3 - k1 * v1
      YP(6) = k4
      end

C     Energy per unit rest mass
      double precision function energy(T,Y)
      include 'rk3.inc'
      double precision t,e
      double precision Y(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3,p1,p2,p3,psq
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      p1 = Y(4)
      p2 = Y(5)
      p3 = Y(6)
      psq= p1*p1+p2*p2+p3*p3
C     Kinetic Energy/m_0
      e = dsqrt(1.0D0+psq)-1.0D0
C     Potential Energy/m_0
      e = e - k2*x1 - k3*x2 - k4*x3
      energy = e
      end
```

Τα αποτελέσματά μας τα δείχνουμε στα Σχήματα 5.5–5.6.

Αφού βεβαιωθήκαμε για την επιτυχία της προσέγγισης του προβλήματος για το φορτισμένο σωμάτιο σε σταθερό ΗΜ πεδίο μπορούμε να προσπαθήσουμε να μελετήσουμε ένα πιο ενδιαφέρον πρόβλημα. Θα φτιάξουμε ένα απλό μοντέλο για την ακτινοβολία Van Allen της γης. Θα υποθέσουμε ότι τα ηλεκτρόνια κινούνται στο μαγνητικό πεδίο της γής το οποίο προσεγγίζεται ως μαγνητικό πεδίο διπόλου της μορφής:

$$\vec{B} = B_0 \left(\frac{R_E}{r}\right)^3 \left[3(\hat{d}\cdot\hat{r})\,\hat{r} - \hat{d}\right] , \tag{5.10}$$



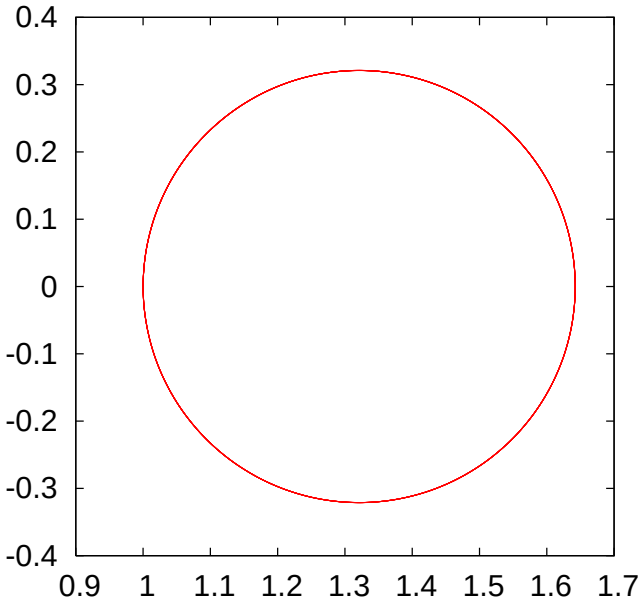
Σχήμα 5.5: Τροχιά σχετικιστικού φορτισμένου σωματιδίου όταν κινήται μέσα σε μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B_z\hat{z}$ με $qB_z/m_0 = 10.0$, $\vec{v}(0) = 0.95\hat{y} + 0.10\hat{z}$, $\vec{r}(0) = 1.0\hat{x}$. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης γίνεται με τη μέθοδο RK45 με 1000 βήματα από $t_0 = 0$ μέχρι $t_f = 20$. Η τροχιά δεν είναι υπό κλίμακα, προσέξτε τις διαφορετικές κλίμακες στους άξονες.

όπου $\vec{d} = d\hat{d}$ η μαγνητική ροπή διπόλου του μαγνητικού πεδίου της γης και φυσικά $\vec{r} = r\hat{r}$. Ενδεικτικά οι τιμές για τις παραμέτρους που υπεισέρχονται στην παραπάνω εξίσωση είναι $B_0 = 3.5 \times 10^{-5}T$, $r \sim 2R_E$, και R_E η ακτίνα της γης. Στις αποστάσεις αυτές τυπικές ενέργειες για τα κινούμενα ηλεκτρόνια είναι ~ 1 MeV που αντιστοιχούν σε ταχύτητες $v/c = \sqrt{E^2 - m_0^2}/E \approx \sqrt{1 - 0.512^2}/1 = 0.86$. Διαλέγοντας το σύστημα αξόνων έτσι ώστε $\hat{d} = \hat{z}$ παίρνουμε:

$$\begin{aligned} B_x &= B_0 \frac{3xz}{r^5} \\ B_y &= B_0 \frac{3yz}{r^5} \\ B_z &= B_0 \left(\frac{3yz}{r^5} - \frac{1}{r^3} \right) \end{aligned} \tag{5.11}$$

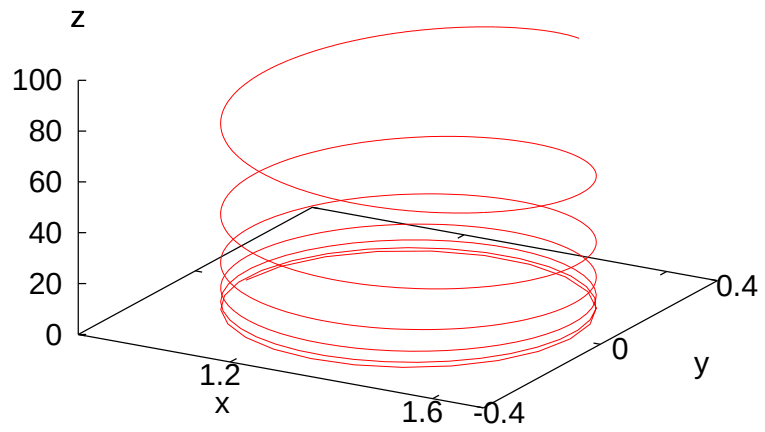
Το πεδίο δύναμης προγραμματίζεται τώρα εύκολα στο αρχείο `sr_Bd.f`:

```
C  Particle in Magnetic dipole field:
```



Σχήμα 5.6: Προβολή της τροχιάς σχετικιστικού φορτισμένου σωματιδίου στο επίπεδο xy όταν κινήται μέσα σε μαγνητικό πεδίο $\vec{B} = B_z\hat{z}$ με $qB_z/m_0 = 10.0$, $\vec{v}(0) = 0.95\hat{y} + 0.10\hat{z}$, $\vec{r}(0) = 1.0\hat{x}$. Η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης γίνεται με τη μέθοδο RK45 με 1000 βήματα από $t_0 = 0$ μέχρι $t_f = 20$.

```
C  q B_1/m = k1 (3 x1 x3)/r^5
C  q B_2/m = k1 (3 x2 x3)/r^5
C  q B_3/m = k1[(3 x3 x3)/r^5-1/r^3]
      subroutine F(T,Y,YP)
      include 'sr.inc'
      double precision t
      double precision Y(*),YP(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3,p1,p2,p3,pinv,psq
      double precision B1,B2,B3
      double precision r
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      p1 = Y(4)
      p2 = Y(5)
      p3 = Y(6)
      call velocity(p1,p2,p3,v1,v2,v3)
```

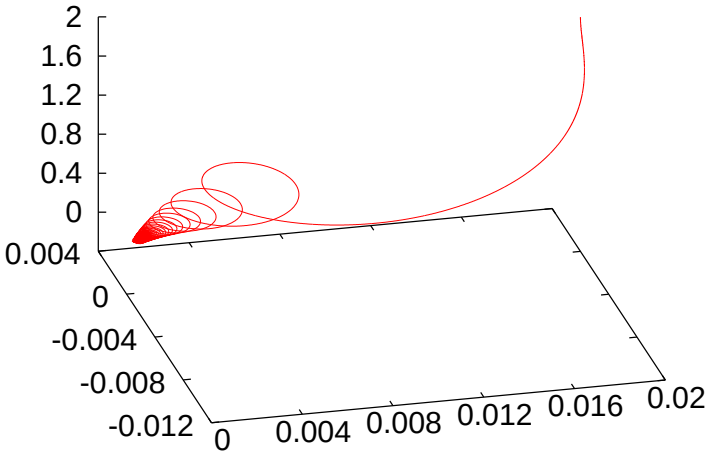


Σχήμα 5.7: Η επίδραση της προσθήκης ενός ηλεκτρικού πεδίου $q\vec{E}/m_0 = 1.0\hat{z}$ στην τροχιά του Σχήματος 5.5

```
C     now we can use all x1,x2,x3,p1,p2,p3,v1,v2,v3
C     Velocities:   dx_i/dt = p_i/sqrt(1+p^2) for m_0=1
      psq    = p1*p1+p2*p2+p3*p3
      pinv   = 1.0D0/dsqrt(1.0D0+psq)
      YP(1)  = p1*pinv
      YP(2)  = p2*pinv
      YP(3)  = p3*pinv
C     Acceleration:
      r      = dsqrt(x1*x1+x2*x2+x3*x3)
      if( r.gt.0.0D0)then
       B1    = k1*( 3.0D0*x1*x3)/r**5
       B2    = k1*( 3.0D0*x2*x3)/r**5
       B3    = k1*((3.0D0*x3*x3)/r**5-1/r**3)
       YP(4) = v2*B3-v3*B2
       YP(5) = v3*B1-v1*B3
       YP(6) = v1*B2-v2*B1
      else
       YP(4) = 0.0D0
       YP(5) = 0.0D0
```

```
       YP(6) = 0.0D0
      endif

      end

C     Energy per unit rest mass
      double precision function energy(T,Y)
      include 'rk3.inc'
      double precision t,e
      double precision Y(*)
      double precision x1,x2,x3,v1,v2,v3,p1,p2,p3,psq
      x1 = Y(1)
      x2 = Y(2)
      x3 = Y(3)
      p1 = Y(4)
      p2 = Y(5)
      p3 = Y(6)
      psq= p1*p1+p2*p2+p3*p3
C     Kinetic Energy/m_0
      e = dsqrt(1.0D0+psq)-1.0D0
      energy = e
      end
```

Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 5.8 στο οποίο έχουμε υπερβάλλει τις παραμέτρους ώστε να έχουμε ένα κατατοπιστικό οπτικό αποτέλεσμα. Στην πραγματικότητα τα ηλεκτρόνια διαγράφουν πολύ λεπτές σπείρες και ο αναγνώστης ενθαρρύνεται να μελετήσει αριθμητικά το πρόβλημα για φαινομενολογικά ρεαλιστικές τιμές των παραμέτρων $\vec{v}_0$, B_0, $\vec{r}_0$ και να κατανοήσει γιατί το φαινόμενο συμβαίνει μόνο κοντά στους πόλους.



Σχήμα 5.8: Κίνηση φορτισμένου σωματίου σε μαγνητικό πεδίο διπόλου που δίνεται από τη σχέση (5.11) . Για να έχουμε καλύτερα οπτικά αποτελέσματα πήραμε $B_0 = 1000$, $\vec{r} = 0.02\hat{x} + 2.00\hat{z}$, $\vec{v} = -0.99999\hat{z}$. Η ολοκλήρωση έγινε με 10000 βήματα από χρόνο $t_0 = 0$ έως $t_f = 5$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

Ηλεκτροστατική

Στο κεφάλαιο αυτό θα μελετήσουμε αριθμητικά το ηλεκτροστατικό πεδίο στατικής κατανομής φορτίων. Στην πρώτη παράγραφο μελετάμε τις δυναμικές γραμμές και ισοδυναμικές επιφάνειες κατανομής σημειακών ηλεκτρικών φορτίων στο επίπεδο. Στη δεύτερη παράγραφο εξετάζονται προβλήματα συνεχών κατανομών φορτίου, πάλι στο επόπεδο. Γίνεται αριθμητική λύση προβλημάτων συνοριακών τιμών χρησιμοποιώντας μεθόδους τύπου (over)relaxation.

6.1 Ηλεκτροστατικό Πεδίο Σημειακών Ηλεκτρικών Φορτίων

Έστω N σημειακά ηλεκτρικά φορτία Q_i βρίσκονται σε σταθερές θέσεις στο επίπεδο που δίνονται από τα διανύσματα θέσης τους $\vec{r}_i$, $i = 1, \ldots, N$. Ο νόμος του Coulomb μας δίνει την τιμή του ηλεκτρικού πεδίου

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \frac{Q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^2} \, \hat{\rho}_i \tag{6.1}$$

όπου $\hat{\rho}_i = (\vec{r} - \vec{r}_i)/|\vec{r} - \vec{r}_i|$ το μοναδιαίο διάνυσμα στη διεύθυνση του $\vec{r} - \vec{r}_i$. Οι συνιστώσες του πεδίου είναι

$$\begin{aligned} E_x(x,y) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \frac{Q_i(x - x_i)}{\left((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2\right)^{3/2}} \\ E_y(x,y) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \frac{Q_i(y - y_i)}{\left((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2\right)^{3/2}} \, , \end{aligned} \tag{6.2}$$

Το ηλεκτροστατικό δυναμικό στη θέση $\vec{r}$ είναι

$$V(\vec{r}) = V(x,y) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \frac{Q_i}{((x-x_i)^2 + (y-y_i)^2)^{1/2}} \tag{6.3}$$

και ισχύει

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) \tag{6.4}$$

Οι δυναμικές γραμμές είναι οι ολοκληρωτικές καμπύλες του διανυσματικού πεδίου $\vec{E}$, δηλ. σε απλά Ελληνικά[1] οι καμπύλες εκείνες που εφάπτονται σε κάθε σημείο του επιπέδου με το διάνυσμα–τιμή του ηλεκτρικού πεδίου. Μια σύμβαση που ακολουθείται στο σχεδιασμό των δυναμικών γραμμών, είναι ότι η πυκνότητα τους ανά μονάδα επιφανείας είναι ανάλογη του μέτρου του $\vec{E}$. Δηλ. ο αριθμός των δυναμικών γραμμών που τέμνει μια επιφάνεια είναι ανάλογη της ροής Φ_E του ηλεκτρικού πεδίου που τη διαπερνά.

Οι ισοδυναμικές επιφάνειες είναι ο γεωμετρικός τόπος των σημείων εκείνων όπου η συνάρτηση του δυναμικού έχει σταθερή τιμή. Η σχέση (6.4) μας λέει πως πυκνές ισοδυναμικές επιφάνειες (που σημαίνουν γρήγορη χωρική μεταβολή του δυναμικού) συνεπάγονται ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο στην περιοχή και αντίστροφα. Επίσης ότι η διεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου είναι κάθετη στις ισοδυναμικές επιφάνειες σε κάθε σημείο (η διεύθυνση ταχύτερης μεταβολής του V) και με φορά αυτή της μείωσης του δυναμικού. Φυσικά στην περίπτωση που περιοριζόμαστε στο επίπεδο που βρίσκεται η κατανομή των φορτίων, οι ισοδυναμικές επιφάνειες αντιστοιχούν στις καμπύλες που είναι η τομή τους με το εν λόγω επίπεδο.

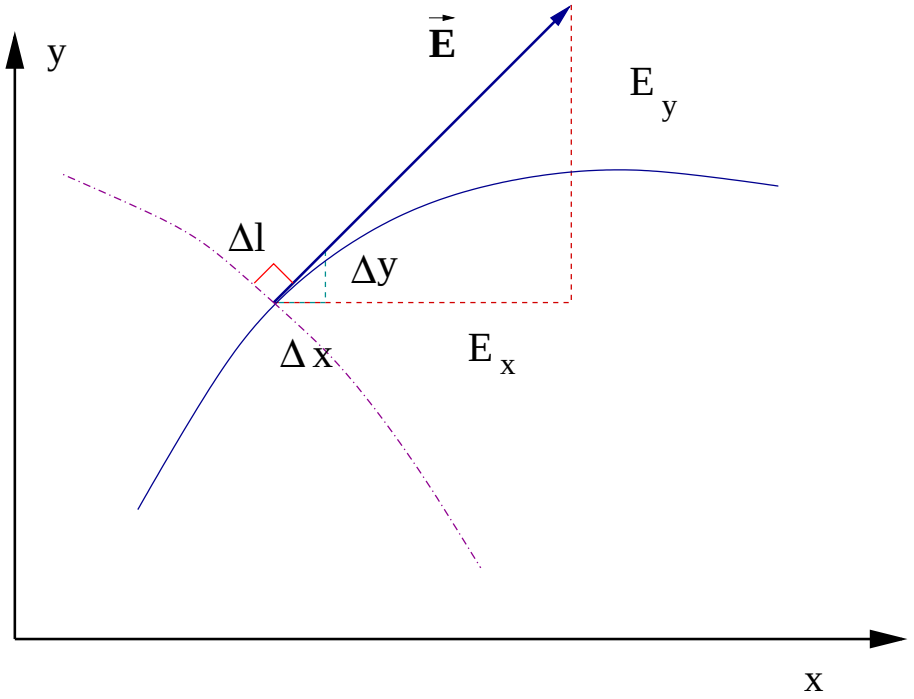
Στον υπολογιστή φυσικά δεν μπορούμε να λύσουμε το πρόβλημα στο συνεχές. Η συνεχής καμπύλη που θέλουμε να υπολογίσουμε θα προσεγγιστεί με ένα μεγάλο αλλά πεπερασμένο αριθμό από μικρά ευθύγραμμα τμήματα. Η ιδέα περιγράφεται στο Σχήμα 6.1: Το μικρό ευθύγραμμο τμήμα Δl είναι στη διεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου οπότε από τα όμοια τρίγωνα παίρνουμε

$$\Delta x = \Delta l \, \frac{E_x}{E} \qquad \Delta y = \Delta l \, \frac{E_y}{E} \,, \tag{6.5}$$

όπου $E \equiv |\vec{E}| = \sqrt{E_x^2 + E_y^2}$.

Για τον υπολογισμό των ισοδυναμικών καμπύλων χρησιμοποιούμε την ιδιότητα που έχουν οι δυναμικές γραμμές να είναι παντού κάθετες

[1] ...it's greek to me!



Σχήμα 6.1: Σε κάθε σημείο του χώρου η δυναμικές γραμμές εφάπτονται με το διάνυσμα της έντασης του ηλ. πεδίου ενώ οι ισοδυναμικές επιφάνειες (εδώ καμπύλες) το έχουν κάθετο. Προσεγγίζοντας τη συνεχή καμπύλη με το ευθ. τμήμα Δl έχουμε $\Delta y/\Delta x = E_y/E_x$.

στις ισοδυναμικές επιφάνειες (εδώ καμπύλες). Άρα αν $(\Delta x, \Delta y)$ δίνει την εφαπτόμενη στην ισοδυναμική γραμμή, τότε το $(-\Delta y, \Delta x)$ είναι σε κάθετη κατεύθυνση αφού $(\Delta x, \Delta y)\cdot(-\Delta y, \Delta x) = -\Delta x\Delta y + \Delta y\Delta x = 0$. Οπότε για τις ισοδυναμικές καμπύλες προκύπτει η εξίσωση

$$\Delta x = -\Delta l\,\frac{E_y}{E} \qquad \Delta y = \Delta l\,\frac{E_x}{E}\,. \tag{6.6}$$

Μπορούμε τώρα να σχεδιάσουμε μια αλγοριθμική διαδικασία που θα μας επιτρέψει τον προσεγγιστικό υπολογισμό των δυναμικών και ισοδυναμικών καμπύλων: Επιλέγουμε αρχικό σημείο από το οποίο περνάει η (μοναδική) δυναμική γραμμή ή ισοδυναμική επιφάνεια που επιθυμούμε. Από την κατανομή των φορτίων υπολογίζουμε το ηλεκτρικό πεδίο χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (6.2) . Επιλέγοντας αρκετά μικρό βήμα Δl μετακινούμαστε στη διεύθυνση $(\Delta x, \Delta y)$

$$x \to x + \Delta x \quad y \to y + \Delta y\,, \tag{6.7}$$

χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (6.5) ή (6.5) ανάλογα με την περίπτωση. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία μέχρι να τελειώσει ο σχεδιασμός για ένα μεγάλο αριθμό βημάτων. Το κριτήριο για αυτό θα το καθορίσει ο προγραμματιστής ή ο χρήστης ανάλογα με τις ανάγκες του υπολογισμού, λ.χ. η δυναμική γραμμή φεύγει έξω από τα όρια σχεδιασμού ή πλησιάζει κοντύτερα σε ένα φορτίο από μια ελάχιστη απόσταση.

6.2 Το Πρόγραμμα – Ορεκτικά και ... επιδόρπιο

Ο βιαστικός, αλλά και ελαφρά καταρτισμένος αναγνώστης μπορεί να συνεχίσει κατευθείαν στην παράγραφο 6.4 και να επιστρέψει εδω αργότερα για διευκρινήσεις. Εκεί θα βρείτε την τελική και πλήρη μορφή του προγράμματος το οποίο μπορείτε να αντιγράψετε καθώς και συνοπτικές οδηγίες χρήσης του.

Για τον προγραμματισμό του αλγόριθμου που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο, θα χωρίσουμε τις διαδικασίες σε τέσσερεις ξεχωριστές και ανεξάρτητες μεταξύ τους ομάδες οι οποίες έχουν καλά ορισμένους στόχους και μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε διαφορετικά τμήματα ενός προγράμματος.

- Το κυρίως πρόγραμμα: Διεπαφή (interface) με το χρήστη. Εισαγωγή δεδομένων και επεξεργασία αποτελεσμάτων.

- `subroutine eline(xin,yin,X,Y,Q,N)`: Υπολογίζει τη δυναμική γραμμή που περνάει από το σημείο `xin,yin`. Στην είσοδο ο χρήστης δίνει το σημείο `xin,yin` και τα δεδομένα `N, X(N), Y(N), Q(N)` όπως και πριν. Στην έξοδο η υπορουτίνα τυπωνει στην καθιερωμένη έξοδο (`standard output` - συνήθως η οθόνη ή όπου αλλού ο χρήστης επανακατευθύνει) τις συντεταγμένες της δυναμικής γραμμής που περνάει από το σημείο `xin,yin` και σταματάει είτε πολύ κοντά σε κάποιο άλλο φορτίο ή εκτός της περιοχής σχεδίασης (εδώ μια μέγιστη απόσταση από την αρχή των αξόνων). Καλεί την υπορουτίνα `efield` για τον υπολογισμό του ηλεκτρικού πεδίου και την `mdist` για τον υπολογισμό της ελάχιστης απόστασης από τα ηλεκτρικά φορτία.

- `subroutine epotline(xin,yin,X,Y,Q,N)`: Υπολογίζει την ισοδυναμική καμπύλη που περνάει από το σημείο `xin,yin`. Στην είσοδο ο χρήστης δίνει το σημείο `xin,yin` και τα δεδομένα `N, X(N), Y(N),`

Q(N) όπως και πριν. Στην έξοδο η υπορουτίνα τυπωνει στην καθιερωμένη έξοδο τις συντεταγμένες της ισοδυναμικής καμπύλης που περνάει από το σημείο xin,yin και σταματάει είτε όταν κλείσει αρκετά κοντά στο αρχικό σημείο[2] ή όταν βγει εκτός της περιοχής σχεδίασης. Καλεί την υπορουτίνα efield για τον υπολογισμό του ηλεκτρικού πεδίου και την mdist για τον υπολογισμό της ελάχιστης απόστασης από τα ηλεκτρικά φορτία.

- subroutine efield(x0,y0,X,Y,Q,N,Ex,Ey): Καλείται από τις παραπάνω ρουτίνες με τις οποίες πρέπει να συνδεθεί (linked). Υπολογίζει το ηλεκτρικό πεδίο Ex, Ey στη θέση x0, y0. Στην είσοδο ο χρήστης παρέχει τον αριθμό N και τις θέσεις των φορτίων που αποθηκεύονται στα arrays X(N), Y(N) και το μέγεθος των φορτίων στο array Q(N). Επίσης δίνει τη θέση x0, y0 στην οποία θα υπολογιστεί το ηλεκτρικό πεδίο Στην έξοδο ο χρήστης παίρνει τις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου Ex, Ey.

- subroutine mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax): Καλείται από τις παραπάνω ρουτίνες με τις οποίες πρέπει να συνδεθεί. Υπολογίζει την ελάχιστη και μέγιστη απόσταση του σημείου x0, y0 από τα φορτία που βρίσκονται στις θέσεις X(N), Y(N). Στην είσοδο ο χρήστης παρέχει τον αριθμό των φορτίων N, τις θέσεις τους X(N), Y(N) και το εν λόγω σημείο. Στην έξοδο η ρουτίνα δίνει την ελάχιστη και μέγιστη απόσταση rmin,rmax.

Η ιδέα είναι να γράψουμε τον κώδικα για τις υπορουτίνες και να τις χρησιμοποιήσουμε μετά με διαφορετικό τρόπο στο κυρίως πρόγραμμα για να φτιάξουμε τισδυναμικές/ισοδυναμικές γραμμές. Αρχίζουμε με το κυρίως πρόγραμμα. Σε αυτό ο χρήστης πρέπει να ορίσει τις μεταβλητές N, X(N), Y(N), Q(N) που αποτελούν τη δομή των δεδομένων μας. Θα πρέπει να ζητήσει από το χρήστη τις σχετικές πληροφορίες ("διεπαφή με χρήστη") και χρησιμοποιώντας τις να καλέσει τις σχετικές ρουτίνες που υλοποιούν τον υπολογισμό. Τα arrays X, Y, Q ορίζονται να έχουν μέγεθος μεγαλύτερο από οποιοδήποτε αριθμό N σκεφτόμαστε να χρησιμοποιήσουμε. Οπότε θα τα ορίσουμε να έχουν μέγεθος P=20 οπότε θα μελετήσουμε το ηλεκτρικό πεδίο μέχρι 20 σημειακών φορτίων. Έτσι μια μινιμαλιστική προσέγγιση θα είναι να γράψουμε σε ένα αρχείο ELines.f ένα πρόγραμμα της μορφής ("πρώτη έκδοση" - version 1:

```
C     ************************************************
```

[2] Θυμάστε φαντάζομαι πως οι ισοδυναμικές επιφάνειες, άρα και οι καμπύλες, είναι κλειστές.

```
      program Electric_Fields
C     ************************************************
      implicit none
      integer   P               !max number of charges
      parameter(P=20)
      real      X(P),Y(P),Q(P)
      integer   N

C     -------------  SET CHARGE DISTRIBUTION ----
      N    =  2
      X(1) =  1.0
      Y(1) =  0.0
      Q(1) =  1.0
      X(2) = -1.0
      Y(2) =  0.0
      Q(2) = -1.0
C     -------------  DRAWING LINES  -------------
      call eline(0.0, 0.5,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0, 1.0,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0, 1.5,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0, 2.0,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0,-0.5,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0,-1.0,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0,-1.5,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0,-2.0,X,Y,Q,N)

      end
```

Στο πρώτο κομμάτι του προγράμματος, η εντολή

```
      program Electric_Fields
```

ορίζει ότι αυτό το κομμάτι του κώδικα είναι η "κύρια" ρουτίνα από την οποία αρχίζει η εκτέλεση του προγράμματος. Αυτό σταματάει στην εντολή

```
      end
```

Το πρώτο κομμάτι του προγράμματος είναι οι δηλώσεις των μεταβλητών οι οποίες αρχίζουν με την εντολή

```
      implicit none
```

η οποία μας υποχρεώνει να δηλώσουμε ρητά κάθε μεταβλητή και όχι να αφήσουμε το μεταγλωττιστή να το κάνει αυτόματα με βάση τους εσωτερικούς κανόνες της Fortran 77. Αυτό δεν είναι υποχρεωτικό, αλλά το συστήνουμε να είναι η πάγια πρακτική στα προγράμματά σας ώστε να αποφύγετε δύσκολα να βρεθούν σφάλματα (bugs) που οφείλονται σε ορθογραφικά λάθη κατα την πληκτρολόγηση του προγράμματος. Οι δηλώσεις προηγούνται των εκτελέσιμων εντολών. Τα μεγέθη των arrays καθορίζονται από την παράμετρο P τύπου INTEGER στην οποία δίνουμε την τιμή 20 μέσω της εντολής

```
      parameter(P=20)
```

Αυτό δηλώνει πως η τιμή της παραμέτρου δεν μπορεί να αλλάξει κατά τη διάρκεια του προγράμματος. Το ότι τα arrays `X, Y, Q` έχουν μέγεθος `P` καθορίζεται από την εντολή

```
      real      X(P),Y(P),Q(P)
```

η οποία ταυτόχρονα δηλώνει ότι είναι τύπου REAL. Στην επόμενη γραμμή ορίζουμε και τη μεταβλητή `N` τύπου INTEGER, το αριθμό των φορτίων στο πρόβλημα.

Στο δεύτερο κομμάτι του προγράμματος, θέτουμε τον αριθμό των φορτίων `N=2` και τις αντίστοιχες θέσεις και μεγέθη φορτίων. Έτσι οι εντολές

```
C     -------------  SET CHARGE DISTRIBUTION ----
      N    =  2
      X(1) =  1.0
      Y(1) =  0.0
      Q(1) =  1.0
      X(2) = -1.0
      Y(2) =  0.0
      Q(2) = -1.0
```

ορίζουν στο πρόβλημα 2 ίσα και αντίθετα φορτία `Q(1)= -Q(2)= 1.0` στις θέσεις $(1, 0)$ και $(-1, 0)$ αντίστοιχα. Οι επόμενες γραμμές καλούν την υπορουτίνα `eline` να κάνει τον υπολογισμό για 8 δυναμικές γραμμές που περνούν αντίστοιχα από τα σημεία $(0, \pm 1/2)$, $(0, \pm 1)$, $(0, \pm 3/2)$, $(0, \pm 2)$:

```
C     -------------  DRAWING LINES  -------------
      call eline(0.0, 0.5,X,Y,Q,N)
      call eline(0.0, 1.0,X,Y,Q,N)
```

```
call eline(0.0, 1.5,X,Y,Q,N)
call eline(0.0, 2.0,X,Y,Q,N)
call eline(0.0,-0.5,X,Y,Q,N)
call eline(0.0,-1.0,X,Y,Q,N)
call eline(0.0,-1.5,X,Y,Q,N)
call eline(0.0,-2.0,X,Y,Q,N)
```

Οι εντολές τυπώνουν τις συντεταγμένες των σημείων των δυναμικών γραμμών στο standard output τις οποίες ο χρήστης θα επεξεργαστεί περεταίρω.

Για τον υπολογισμό των ισοδυναμικών καμπύλων ο κώδικας είναι ακριβώς ο ίδιος αντικαθιστώντας `call eline` → `call epotline`.

Με τον τρόπο αυτό η κατανομή των φορτίων και οι δυναμικές γραμμές που ζητούνται είναι "σκληρά προγραμματισμένες " (hard coded) και κάθε φορά που θέλουμε καινούργιες γραμμές ή να προσθέσουμε/αφαιρέσουμε/μετακινήσ φορτία θα πρέπει να επαναμεταγλωττίσουμε τον κώδικα και μετά να τον ξανατρέξουμε.

Έστω ότι το πρόγραμμα για την `eline` και τις ρουτίνες από τις οποίες εξαρτάται έχουν ήδη προγραμματιστεί[3] μέσα στο ίδιο αρχείο `ELines.f`. Τότε ο χρήστης θα πρέπει να μεταγλωττίσει τον κώδικα με την εντολή[4]

```
> f77 ELines.f -o el
```

Με την εντολή αυτή ο μεταγλωττιστής (compiler) `f77` της Fortran 77 μετατρέπει τις εντολές της γλώσσας σε οδηγίες γλώσσας μηχανής οι οποίες αποθηκεύονται στο αρχείο `el` μέσω του διακόπτη `-o el`. Το πρόγραμμα τώρα μπορεί να τρέξει με την εντολή

```
> ./el > el.out
```

όπου με το χαρακτήρα > επαναορισμού του `standard output` μεταφέρουμε τα αποτελέσματα που τυπώνει το πρόγραμμα στο αρχείο `el.out`. Για να δουμε τα αποτελέσματα, χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα `gnuplot`[5]:

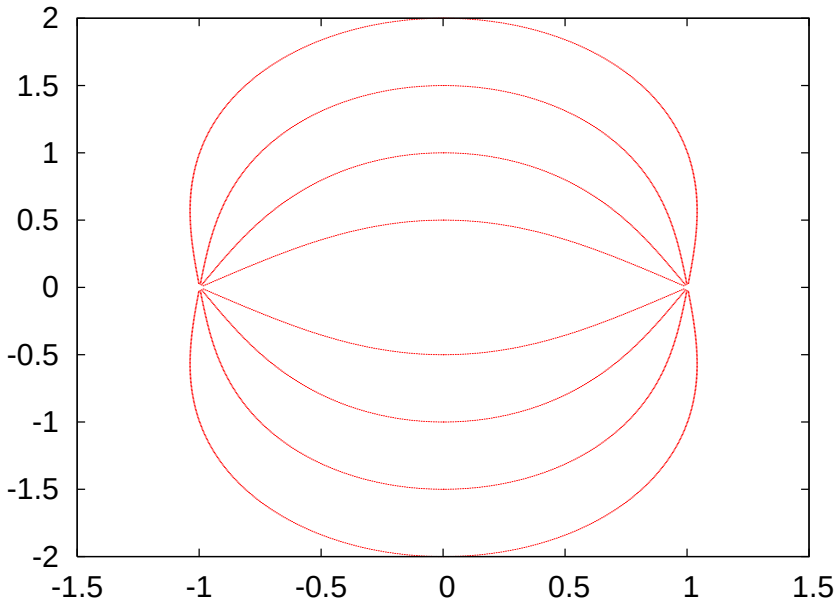
```
> gnuplot
gnuplot> plot "el.out" with dots
```

[3] Επιστρέψτε δηλ. να εκτελέσετε τις εντολές αυτές αφού συζητήσουμε τον προγραμματισμό των `eline, efield, mdist` ή χρησιμοποιήστε τις από το συνοδευτικό λογισμικό.

[4] Οι εντολές αυτές εξαρτώνται από το διαθέσιμο μεταγλωττιστή του χρήστη και το λειτουργικό του σύστημα. Αναφερόμαστε σε ένα τυπικό σύστημα τύπου `Unix` όπως τα GNU/Linux.

[5] `www.gnuplot.info`

Στην πρώτη γραμμή δίνουμε την εντολή gnuplot από τη γραμμή εντολών ενώ στη δεύτερη αφού το πρόγραμμα ξεκινήσει και μας δώσει prompt (το gnuplot>) δίνουμε την εντολή plot του προγράμματος με τα ορίσματα που αναφέρονται παραπάνω. Το αποτέλεσμα φαίνεται στο Σχήμα 6.2.



Σχήμα 6.2: Μερικές δυναμικές γραμμές ηλ. πεδίου δύο αντίθετων φορτίων που σχεδιάζουμε με το πρόγραμμα ELines.f στην ... πρώτη του έκδοση.

Ας γράψουμε τώρα το πρόγραμμα δίνοντας στο χρήστη την ευκαιρία να μελετήσει ευκολότερα διαφορετικές κατανομές φορτίων και επιλογή δυναμικών γραμμών. Η ιδέα είναι ο χρήστης να παρέχει διαδραστικά τον αριθμό και τη θέση/μέγεθος των ηλεκτρικών φορτίων καθώς και τον αριθμό και αρχικά σημεία των δυναμικών γραμμών. Ο πρώτος στόχος πετυχαίνεται αλλάζοντας τον κώδικα στο σημείο που θέτει την κατανομή φορτίων ως εξής:

```
C     -------------  SET CHARGE DISTRIBUTION ----
      print *, '# Enter number of charges:'
      read(5,*) N
      print *, '# N= ',N
      do i=1,N
       print *,'# Charge: ',i
```

```
 print *,'# Position and charge: (X,Y,Q):'
 read(5,*)  X(i),Y(i),Q(i)
 print *,'# (X,Y)= ', X(i),Y(i), ' Q= ',Q(i)
enddo
```

Η πρώτη εντολή ζητάει από το χρήστη τον αριθμό των φορτίων της κατανομής, το οποίο διαβάζει από το standard input (το οποίο είναι by default η γραμμή εντολών του φλοιού). Το 5 στην εντολή `read` υποδηλώνει το unit 5 το οποίο στα περισσότερα λειτουργικά συστήματα ορίζεται να είναι το standard input. Το $*$ είναι εντολή format της Fortran 77 και απλά λέει το format να το αφήσουμε στο ... έλεος του compiler. Στη συνέχεια αρχίζουμε ένα βρόχο `do` ο οποίος θα τρέξει `N` φορές αυξάνοντας κάθε φορά την τιμή της μεταβλητής `i` από 1 έως `N` με βήμα 1. Για κάθε τιμή του `i` διαβάζουμε τις τιμές της θέσης/μέγεθος φορτίου και τις αποθηκεύουμε στις αντίστοιχες θέσεις των arrays `X(i), Y(i), Q(i)`. Τα αποτελέσματα τυπώνονται για να τα βλέπει ο χρήστης και να ελέγχει ότι πέρασαν σωστά στη μνήμη του υπολογιστή.

Ο σχεδιασμός των δυναμικών γραμμών γίνεται αλλάζοντας τον κώδικα στο σημείο σχεδίασης των γραμμών ως εξής:

```
C     -------------  DRAWING LINES  -------------
      print *,'# How many lines to draw? '
      read(5,*) draw
      do i=1,draw
       print *,'# Initial point (x0,y0): '
       read(5,*) x0,y0
       call  eline(x0,y0,X,Y,Q,N)
      enddo
```

Ζητήται από το χρήστη να εισάγει τον αριθμό των δυναμικόγραμμών που θέλει να σχεδιαστούν και αυτός αποθηκεύεται στη μεταβλητή `draw`. Στη συνέχεια ο βρόχος `do` εκτελείται `draw` φορές και κάθε φορά αφού ζητηθεί από το χρήστη το αρχικό σημείο σχεδίασης της γραμμής, καλείται η υπορουτίνα `eline` η οποία κάνει το σχεδιασμό.

Για να τρέξει το πρόγραμμα (πάλι υποθέτοντας ότι η υπορουτίνα `eline` και οι ρουτίνες από τις οποίες εξαρτάται έχουν ήδη προγραμματιστεί) μεταγλωττίζουμε με την εντολή `f77` τον κώδικα του αρχείου `ELines.f` το τρέχουμε όπως πριν. Η διαφορά είναι ότι τώρα αλληλεπιδρούμε με το πρόγραμμα και εισάγουμε δεδομένα από τη γραμμή εντολών (εδώ ένα φορτίο $q = 1.0$ στην αρχή των αξόνων):

```
>  f77 ELines.f -o el
```

```
> ./el
 # Enter number of charges:
1
 # N=            1
 # Charge:            1
 # Position and charge: (X,Y,Q):
0.0 0.0 1.0
 # (X,Y)=    0.000000       0.000000      Q=    1.000000
 # How many lines to draw?
1
 # Initial point (x0,y0):
0.1 0.1
  9.2928931E-02  9.2928931E-02
  8.5857861E-02  8.5857861E-02
  7.8786790E-02  7.8786790E-02
....
```

Τι κερδίσαμε? Αν το δοκιμάσετε θα πείτε πως η μορφή αυτή του προγράμματος δεν είναι εύχρηστη αφού τα αποτελέσματα που τυπώνονται στην οθόνη δεν είναι εύκολο να τα επεξεργαστούμε (δοκιμάστε...). Ας υποθέσουμε όμως ότι θέλετε να κάνετε εντατική μελέτη του προβλήματος. Γράψτε με τον editor της αρεσκείας σας[6] σε ένα αρχείο `Input` τα δεδομένα που θέλετε να εισάγετε ως εξής:

```
2                    N: Number of Charges
 1.0 0.0  1.0        (X,Y,Q): Position and charge
-1.0 0.0 -1.0        (X,Y,Q): Position and charge
8                    Number of lines to draw
0.0  0.5             x0,y0: Initial point of line
0.0  1.0             x0,y0: Initial point of line
0.0  1.5             x0,y0: Initial point of line
0.0  2.0             x0,y0: Initial point of line
0.0 -0.5             x0,y0: Initial point of line
0.0 -1.0             x0,y0: Initial point of line
0.0 -1.5             x0,y0: Initial point of line
0.0 -2.0             x0,y0: Initial point of line
```

Αν δώσετε τώρα την εντολή [7]

```
./el < Input > el.out
```

[6] Λ.χ. τον emacs (`www.gnu.org/software/emacs/`)

[7] Το "`< Input`" επαναορίζει το `standard input` να είναι το αρχείο με όνομα `Input`.

το αποτέλεσμα θα είναι πανομοιότυπο με αυτό στην πρώτη έκδοση του προγράμματος, και το μελετούμε ακριβώς όπως πρίν με το gnuplot[8]. Η διαφορά τώρα είναι πως για να μελετήσουμε περισσότερες δυναμικές γραμμές ή/και διαφορετικές κατανομές φορτίων, αρκεί να αλλάξουμε τα περιεχόμενα του αρχείου Input και να επαναλάβουμε την παραπάνω εντολή χωρίς να χρειαστεί να επαναμεταγλωττίσουμε το πρόγραμμα και χωρίς να χρειάζεται ο χρήστης να γνωρίζει πώς το πρόγραμμα έχει γραφτεί. Προσέξτε πως η Fortran 77 αφού διαβάσει τα δεδομένα που χρειάζεται, αγνοεί το περιεχόμενο της υπόλοιπης γραμμής του αρχείου Input. Αυτό το χρησιμοποιούμε για να γράψουμε κατατατοπιστικά σχόλια για το χρήστη.

Ο παραπάνω κώδικας ("δεύτερη έκδοση" - version 2) παρατίθεται για ευκολία του αναγνώστη παρακάτω:

```
C     ************************************************
      program Electric_Fields
C     ************************************************
      implicit none
      integer   P               !max number of charges
      parameter(P=20)
      real      X(P),Y(P),Q(P)
      integer   N

      integer   i,j,draw
      real      x0,y0
C     -------------  SET CHARGE DISTRIBUTION ----
      print *, '# Enter number of charges:'
      read(5,*) N
      print *, '# N= ',N
      do i=1,N
       print *,'# Charge: ',i
       print *,'# Position and charge: (X,Y,Q):'
       read(5,*)  X(i),Y(i),Q(i)
       print *,'# (X,Y)= ', X(i),Y(i), ' Q= ',Q(i)
      enddo
C     -------------  DRAWING LINES  -------------
      print *,'# How many lines to draw? '
      read(5,*) draw
      do i=1,draw
       print *,'# Initial point (x0,y0): '
```

[8]Οι γραμμές στο αρχείο el.out που αρχίζουν από # είναι σχόλια για το gnuplot.

```
 read(5,*) x0,y0
 call  eline(x0,y0,X,Y,Q,N)
enddo
end
```

Ήδη ο προσεκτικός αναγνώστης θα έχει ασκηθεί αρκετά ώστε να καταλάβει πως για να φτιάξει μια ωραία εικόνα από αντιπροσωπευτικές δυναμικές γραμμές χρειάζεται αρκετό χρόνο για να το κάνει... Πως θα μπορούσαμε, τουλάχιστον αρχικά να πάρουμε μια εικόνα και να αφήσουμε τις λεπτομέρειες για το πρόγραμμα της δεύτερης έκδοσης? Για τις δυναμικές γραμμές η απάντηση είναι εύκολη: Αρκετά κοντά σε ένα σημειακό ηλεκτρικό φορτίο, το ηλεκτρικό πεδίο είναι κατά πολύ καλή προσέγγιση ισοτροπικά ακτινικό. Ο αριθμός των δυναμικών γραμμών που ξεκινούν/καταλήγουν από/σε ένα σημειακό θετικό/αρνητικό ηλεκτρικό φορτίο είναι ανάλογος του μεγέθους του φορτίου. Έτσι αρκεί να πάρουμε για αρχικά σημεία εναν αριθμό ανάλογο του φορτίου από ισότροπα κατανεμημένα σημεία πάνω σε ένα αρκετά μικρό κυκλάκι γύρο από κάθε φορτίο της κατανομής. Παρακάτω παραθέτουμε τον κώδικα ("τρίτη έκδοση" - version 3) για φορτία ίσα σε μέγεθος και αφήνουμε ως άσκηση στον αναγνώστη την περίπτωση φορτίων που είναι διαφορετικού μεγέθους:

```
C     ******************************************************
      program Electric_Fields
C     ******************************************************
      implicit none
      integer   P               !max number of charges
      parameter(P=20)
      real      X(P),Y(P),Q(P)
      integer   N

      real      PI
      parameter(PI= 3.14159265359)
      integer   i,j,nd
      real      x0,y0,theta

C     -------------  SET CHARGE DISTRIBUTION ----
      print *, '# Enter number of charges:'
      read(5,*) N
      print *, '# N= ',N
      do i=1,N
       print *,'# Charge: ',i
```

```
       print *,'# Position and charge: (X,Y,Q):'
       read(5,*)  X(i),Y(i),Q(i)
       print *,'# (X,Y)= ', X(i),Y(i), ' Q= ',Q(i)
      enddo
C     ------------  DRAWING LINES  -------------
C     We draw 2*nd field lines around each charge
      nd    = 6
      do  i = 1,N
       do j = 1,(2*nd)
        theta = (PI/nd)*j
        x0    = X(i) + 0.1 * cos(theta)
        y0    = Y(i) + 0.1 * sin(theta)
        call  eline(x0,y0,X,Y,Q,N)
       enddo
      enddo

      end
```

Θα παρατηρήσατε ήδη πως η μόνη αλλαγή που κάναμε είναι στο κομμάτι σχεδιασμού των γραμμών. Θέτουμε τον αριθμό των αρχικών γραμμών γύρω από κάθε φορτίο να είναι 12 με την εντολή `nd = 6` και μετά γύρω από κάθε φορτίο (`do i = 1,N`) καλούμε την `eline` με αρχικά σημεία `(x0,y0)` πάνω σε ένα κύκλο κέντρου `(X(i),Y(i))` και ακτίνας `0.1`. Αυτό γίνεται `2*nd` φορές σε σημεία που καθορίζονται από τη γωνία `theta=(PI/nd)*j`.

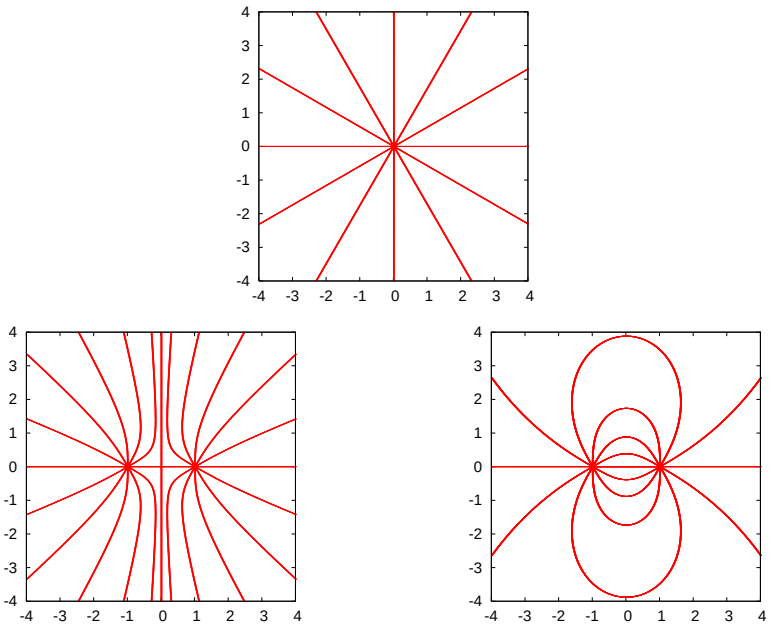
Για να το τρέξουμε, γράφουμε ένα αρχείο `Input` με περιεχόμενα την κατανομή των φορτίων. Για παράδειγμα, για μια κατανομή τεσσάρων φορτίων $q_i = \pm 1$ πάνω στις κορυφές ενός τετραγώνου γράφουμε:

```
4              N: Number of charges
 1  1  -1      (X,Y,Q): Position and charge
-1  1   1      (X,Y,Q): Position and charge
 1 -1   1      (X,Y,Q): Position and charge
-1 -1  -1      (X,Y,Q): Position and charge
```

και μετά δίνουμε τις εντολές:

```
> f77 ELines.f -o el
> ./el < Input > el.out
> gnuplot
gnuplot> plot "el.out" with dots
```

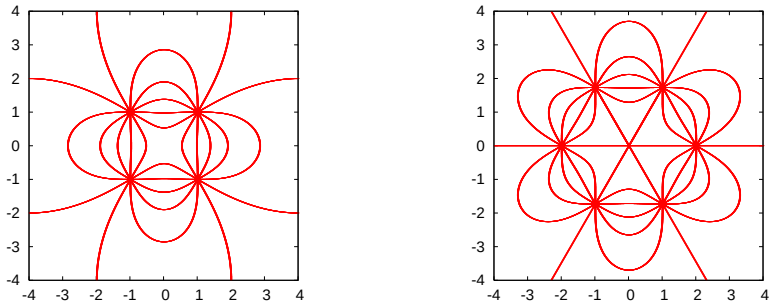
Στα Σχήματα 6.3-6.4 δείχνουμε τα αποτελέσματα για μερικές κατανομές φορτίου. Αφήνουμε σαν άσκηση στον αναγνώστη να βρει από ποιές κατανομές προκύπτουν και να αναπαράγει τα σχήματα αυτά για εξάσκηση.



Σχήμα 6.3: Δυναμικές γραμμές ηλεκτρικού πεδίου κατανομής σημειακών φορτίων που σχεδιάζουμε με το πρόγραμμα ELines.f.

Με παρόμοιο τρόπο γράφουμε πρόγραμμα και για τις ισοδυναμικές καμπύλες. Η μόνη διαφορά είναι αν θέλουμε τα αρχικά σημεία να επιλέγονται αυτόματα, θα πρέπει να επινοήσουμε ένα νέο αλγόριθμο που να ζωγραφίζει τις δυναμικές γραμμές για δεδομένες πτώσεις δυναμικού. Λόγω της πολυπλοκότητας του αλγόριθμου, αυτό αφήνεται σαν άσκηση για τον αναγνώστη (δες σχετική άσκηση με οδηγίες). Εμεις στον παρακάτω κώδικα επιλέγουμε για αρχικά σημεία ισαπέχοντα σημεία πάνω σε ένα τετραγωνικό πλέγμα. Ο κώδικας αποθηκεύεται στο αρχείο EPotential.f:

```
C     ****************************************************
      program Electric_Potential
C     ****************************************************
      implicit none
      integer   P                !max number of charges
```



Σχήμα 6.4: Δυναμικές γραμμές ηλεκτρικού πεδίου κατανομής σημειακών φορτίων που σχεδιάζουμε με το πρόγραμμα ELines.f.

```
      parameter(P=20)
      real      X(P),Y(P),Q(P)
      integer   N

      real      PI
      parameter(PI= 3.14159265359)
      integer   i,j,nd
      real      x0,y0,rmin,rmax,L

      print *, '# Enter number of charges:'
      read(5,*)   N
      print *, '# N= ',N
      do i=1,N
       print *,'# Charge: ',i
       print *,'# Position and charge: (X,Y,Q):'
       read(5,*)  X(i),Y(i),Q(i)
       print *,'# (X,Y)= ', X(i),Y(i), ' Q= ',Q(i)
      enddo

C     -------------  DRAWING LINES  -------------
C     We draw lines passing through an equally
C     spaced lattice of N=(2*nd+1)x(2*nd+1) points
C     in the square -L<= x <= L, -L<= y <= L.
      nd    = 4
      L     = 1.0
      do  i = -nd,nd
       do j = -nd,nd
```

```
        x0  = i*(L/nd)
        y0  = j*(L/Nd)
        call  mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
C     we avoid getting too close to a charge:
        if(rmin .gt. L/(nd*10) )
     *       call  epotline(x0,y0,X,Y,Q,N)
       enddo
      enddo
      end
```

Ο κώδικας είναι πανομοιότυπος με τον προηγούμενο στο πρώτο και δεύτερο μέρος του. Στο τρίτο μέρος, όπου ζητήται ο σχεδιασμός των καμπύλων, καλείται τώρα η υπορουτίνα `epotline` να κάνει το σχεδιασμό. Όλα τα υπόλοιπα αναφέρονται στον προσδιορισμό των αρχικών σημείων που γίνεται ως εξής: Επιλέγουμε τον αριθμό των σημείων του πλέγματος με την εντολή `nd=4`, η οποία δίνει `(2*nd+1)*(2*nd+1)= 25` σημεία. Με την εντολή `L=1.0` καθορίζουμε τα όρια του πλέγματος να είναι το τετράγωνο $(1,1)$, $(-1,1)$, $(-1,-1)$, $(1,-1)$. Στη συνέχεια, για κάθε σημείο του πλέγματος `(x0,y0)` υπολογίζουμε την ισοδυναμικη καμπύλη που περνάει από αυτό με την προυπόδεση το σημείο αυτό να μην είναι πολύ κοντά σε ένα από τα φορτία. Αυτό γίνεται καλώντας την υπορουτίνα `mdist` από την οποία παίρνουμε την ελάχιστη απόσταση `rmin` του σημείου και βάζοντας κάτω όριο σε αυτή τον αριθμό `L/(nd*10)`. Για να το τρέξουμε δίνουμε τις εντολές:

```
> f77 EPotential.f -o ep
> ./ep < Input > ep.out
> gnuplot
gnuplot> plot "ep.out" with dots
```

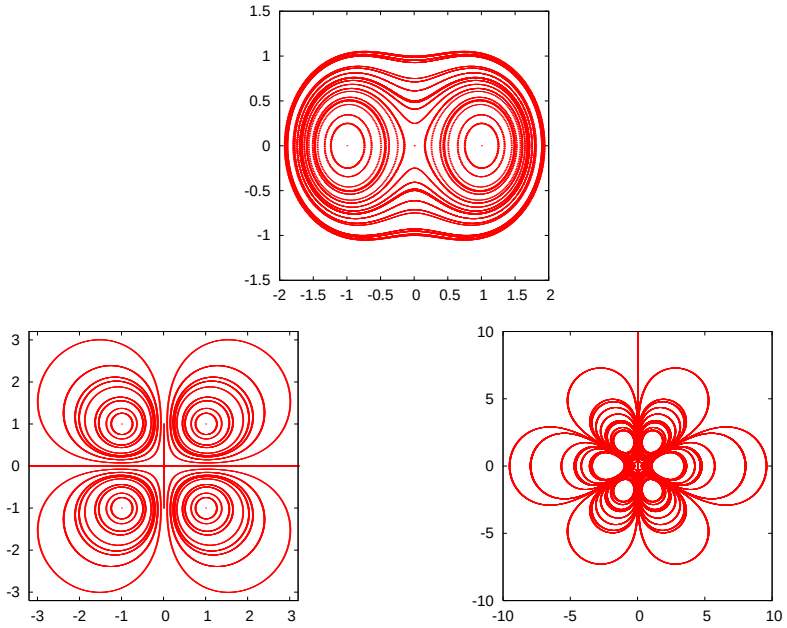
Μερικά από τα αποτελέσματα δείχνονται στο Σχήμα 6.5.

6.3 Το Πρόγραμμα - Το Κυρίως Πιάτο

Στην παράγραφο αυτή περιγράφουμε τη λειτουργία και τον προγραμματισμό των κυρίων κομματιών του προγράμματος: Τις υπορουτίνες υπολογισμού των καμπύλων `eline`, `epotline`, του ηλεκτρικού πεδίου `efield` και της ελάχιστης απόστασης από τα φορτία `mdist`.

Αρχίζουμε από την ρουτίνα `eline`. Ο χρήστης την καλεί με την εντολή

```
call  eline(x0,y0,X,Y,Q,N)
```



Σχήμα 6.5: Ισοδυναμικές καμπύλες ηλεκτρικού πεδίου κατανομής σημειακών φορτίων που σχεδιάζουμε με το πρόγραμμα `EPotential.f`.

δίνοντας στην είσοδο το αρχικό σημείο της γραμμής `(x0,y0)`, τον αριθμό των φορτίων `N` καθώς και τις θέσεις των φορτίων `(X(N),Y(N)` και μεγέθη των φορτίων `Q(N)`. Για να σχεδιαστεί η δυναμική γραμμή χρειάζονται το βήμα Δl της σχέσης (6.5) καθώς και τα όρια σχεδίασης των γραμμών. Τα όρια αυτά είναι δύο: Πρώτα όταν πλησιάζουμε πολύ κοντά σε ένα φορτίο. Τότε το ηλεκτρικό πεδίο τείνει στο άπειρο και αυτό θα δημιουργήσει προβλήματα. Το βήμα Δl είναι μια καλή κλίμακα μικρού μήκους, μια και αυτή είναι έτσι και αλλιώς το όριο της προσέγγισης της συνεχούς καμπύλης. Θα θέσουμε το όριο προσέγγισης σε $2\Delta l$. Επίσης δε θέλουμε να απομακρυνθούμε πολύ από την κατανομή, οπότε θέτουμε μια αυθαίρετη μέγιστη απόσταση από την αρχή των αξόνων `max_dist=20.0`. Άλλες προβληματικές καταστάσεις που πρέπει να προβλέψουμε, είναι να μηδενιστεί το ηλεκτρικό πεδίο οπότε το αποτέλεσμα του υπολογισμού στη Σχέση (6.5) γίνεται απροσδιόριστο[9]. Τέλος, παίρνοντας $\Delta l > 0$ μετακινούμαστε πάνω στη δυναμική γραμμή μόνο προς

[9]Το αποτέλεσμα των πράξεων θα εξαρτηθεί από τη σειρά με την οποία γίνεται. Νομίζω πως ανάλογα με τον μεταγλωττιστή, αν και πώς γίνεται βελτιστοποίηση, τον επεξεργαστή, το λειτ. σύστημα και τις βιβλιοθήκες το αποτέλεσμα θα είναι διαφορετικό. Αν γνωρίζετε καλύτερα, πείτε μου...

την κατεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου καταλήγοντας πάντα πάνω σε ένα αρνητικό φορτίο ή στη μέγιστη απόσταση (γιατι?). Για να σχεδιάσουμε τη δυναμική γραμμή ολόκληρη, θα επαναλάβουμε τον υπολογισμό από το ίδιο αρχικό σημείο με $\Delta l < 0$.

Η κωδικοποίηση της διαδικασίας φαίνεται παρακάτω:

```
      subroutine eline(xin,yin,X,Y,Q,N)
      implicit  none
      integer   N
      real      X(N),Y(N),Q(N),xin,yin,x0,y0
     real     step          !absolute value of step on field line
      parameter(step=0.01)
      real      max_dist        !max distance of field line
      parameter(max_dist=20.0)
      integer   i,direction
      real      rmin,rmax,r,dx,dy,dl
      real      Ex,Ey,E
      do direction = -1,1,2     !direction= +/- 1
       dl = direction * step
       x0 = xin
       y0 = yin
       dx = 0.0
       dy = 0.0
       call mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
       do while(rmin .gt. (2.0*step) .and. rmax .lt. max_dist)
        print *,x0,y0
C       We evaluate the E-field at the midpoint: This reduces
C       systematic errors
        call efield(x0+0.5*dx,y0+0.5*dy,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
        E  = sqrt(Ex*Ex+Ey*Ey)
        if( E .le. 1.0e-10 ) goto 11 !stop calculation
        dx = dl*Ex/E
        dy = dl*Ey/E
        x0 = x0 + dx
        y0 = y0 + dy
        call mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
       enddo                    !do while()
 11    continue                 !come here if E=0
      enddo                     !do direction = -1,1,2
      end
```

Στο πρώτο κομμάτι του κώδικα δηλώνονται οι μεταβλητές. Το μόνο καινούργιο που έχουμε να πούμε είναι η δήλωση

```
real      X(N),Y(N),Q(N)
```

αντί για `X(P),Y(P),Q(P)`. Αυτό δεν πειράζει σε τίποτα, αρκεί φυσικά ο προγραμματιστής να έχει ήδη ελέγξει ότι $\texttt{N} \leq \texttt{P}$. Τα arrays `X,Y, Q` περνάνε στην υπορουτίνα "by reference", δηλ. δίνεται η θέση στη μνήμη στην οποία είναι αποθηκευμένα και όχι "by value". Στο αρχικό πρόγραμμα που δηλώθηκαν, ζητήθηκε και ο φυσικός χώρος στη μνήμη του υπολογιστή όπου θα αποθηκευτούν τα δεδομένα. Τώρα αυτό θεωρήται δεδομένο. Το μέγεθος του βήματος Δl καθώς και η μέγιστη απόσταση σχεδιασμού καθορίζονται με τις δύο δηλώσεις `parameter`

```
parameter(step=0.01)
parameter(max_dist=20.0)
```

και οι τιμές αυτές θα πρέπει να καθοριστούν προσεκτικά από τον προγραμματιστή ανάλογα με τη ζητούμενη ακρίβεια επίλυσης του προβλήματος.

Στο κυρίως πρόγραμμα παρατηρούμε τον εξωτερικό βρόχο

```
do direction = -1,1,2     !direction= +/- 1
 dl = direction * step
 ...
enddo                     !do direction = -1,1
```

αλλάζει την κατεύθυνση κίνησης πάνω στη δυναμική γραμμή. Η εντολή `do direction = -1,1,2` εκτελεί το βρόχο για `direction` από -1 έως 1 με βήμα 2. Δηλ. θα εκτελεστεί δύο φορές για `direction`$= \pm 1$. Άρα το βήμα `dl` έχει κάθε φορά διαφορετικό πρόσημο.

Στη συνέχεια οι εντολές `x0 = xin, y0 = yin` ορίζουν το αρχικό σημείο της δυναμικής γραμμής. `(x0, y0)` είναι το εκάστοτε σημείο της δυναμικής γραμμής το οποίο τυπώνουμε στο `standard output` με την εντολή `print *`. `(dx, dy)` είναι το βήμα μετακίνησης πάνω στη δυναμική γραμμή, έτσι ώστε `(x0, y0)` $\rightarrow$ `(x0+dx, y0+dy)` μετά από κάθε υπολιγιμό, και αρχικοποιούνται στην τιμή `(0.0, 0.0)`. Ο κύριος σχεδιασμός γίνεται στον εσωτερικό βρόχο

```
 call mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
 do while(rmin .gt. (2.0*step) .and. rmax .lt. max_dist)
  ...
  call mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
 enddo                    !do while()
```

ο οποίος εκτελείται όταν η συνθήκη `rmin .gt. (2.0*step) .and. rmax .lt. max_dist` έχει την τιμή `.TRUE.`, είναι δηλ. αληθής. Αυτό ισχύει όσο η ελάχιστη απόσταση από όλα τα φορτία στο εκάστοτε σημείο που βρισκόμαστε δεν έχει γίνει μικρότερη ή ίση από `2.0*step` και η μέγιστη απόσταση από οποιοδήποτε φορτίο παραμένει μικρότερη από max_dist[10]. Οι μέγιστες και ελάχιστες αποστάσεις προσδιορίζονται με κάλεσμα στην υπορουτίνα `mdist` την οποία θα μελετήσουνε παρακάτω.

Το ηλεκτρικό πεδίο που θα χρησιμποιηθεί στη Σχέση (6.5) υπολογίζεται καλώντας `efield(x0+0.5*dx,y0+0.5*dy,X,Y,Q,N,Ex,Ey)`. Τα δύο πρώτα ορίσματα της υπορουτίνας είναι το σημείο στο οποίο ζητούμε το ηλεκτρικό πεδίο, και αυτό επιλέγεται να είναι το `(x0+dx/2,y0+dy/2)` αντί για το `(x0,y0)`. Αυτό γίνεται για να μειώσουμε το συστηματικό σφάλμα από τη διακριτοποίηση του προβλήματος παίρνοντας συνεισφορά από το μέσο του διαστήματος `(x0,x0+dx)` και `(y0,y0+dy)` και όχι από τό ένα άκρο μόνο. Αυτό θα καταστεί σαφέστερο στο κεφάλαιο 3 όπου θα μελετήσουμε την ολοκλήρωση παρόμοιων προβλημάτων διαφορικών εξισώσεων με αρχικές τιμές, στο πλαίσιο της ολοκλήρωσης των εξισώσεων κίνησης.

Μετά τον υπολογισμό του ηλεκτρικού πεδίου, η εφαρμογή της σχέσης (6.5) γίνεται απλά με τις εντολές

```
E  = sqrt(Ex*Ex+Ey*Ey)
dx = dl*Ex/E
dy = dl*Ey/E
x0 = x0 + dx
y0 = y0 + dy
```

Ο έλεγχος των παθολογικών καταστάσεων `E=0.0` και `dx=dy=0.0` εδώ γίνεται με την εντολή

```
if( E .le. 1.0e-10 ) goto 11 !stop calculation
```

όπου όταν το μέτρο του πεδίου γίνει πολύ μικρό σταματάει ο υπολογισμός βγαίνοντας απο το βρόχο με την εντολή `goto 11` η οποία μας παραπέμπει στην εντολή με ετικέτα (label) `11` που εδώ είναι η

```
11    continue                    !come here if E=0
```

η οποία απλώς συνεχίζει τη ροή του προγράμματος. Ομολογουμένως δεν είμαστε πολύ προσεκτικοί χάρην απλότητας και ο αναγνώστης καλείται να θεραπεύσει ορισμένες παθολογικές καταστάσεις σε σχετική άσκηση.

Με παρόμοιο τρόπο προγραμματίζουμε και την `epotline`. Ο σχετικός κώδικας παρατίθεται παρακάτω:

[10] Εδώ μπορείτε να βάλετε και `rmin .lt. max_dist`.

```
      subroutine epotline(xin,yin,X,Y,Q,N)
      implicit none
      integer   N
      real      X(N),Y(N),Q(N),xin,yin,x0,y0
     real     step         !absolute value of step on equipot line
      parameter(step=0.02)
     real      max_dist            !max distance of equipot line
      parameter(max_dist=20.0)
      integer   i
      real      r,dx,dy,dl
      real      Ex,Ey,E

      dl = step
      x0 = xin
      y0 = yin
      dx = 0.0
      dy = 0.0
      r  = step                  !in order to start loop
      do while( r .gt. (0.9*dl) .and. r .lt. max_dist)
       print *,x0,y0
C      We evaluate the E-field at the midpoint: This reduces
C      systematic errors
       call efield(x0+0.5*dx,y0+0.5*dy,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
       E  = sqrt(Ex*Ex+Ey*Ey)
       if( E .le. 1.0e-10 ) goto 11 !stop calculation
       dx =  dl*Ey/E
       dy = -dl*Ex/E
       x0 = x0 + dx
       y0 = y0 + dy
       r  = sqrt((x0-xin)**2+(y0-yin)**2)
      enddo                      !do while()
 11   continue                   !come here if E=0
      end
```

Οι διαφορές με το προηγούμενο πρόγραμμα είναι λίγες: Οι ισοδυναμικές καμπύλες είναι κλειστές, άρα τις διασχίζουμε μόνο κατά μία φορά και το κριτήριο τερματισμού του υπολογισμού είναι να φτάσουμε αρκετά κοντά στο αρχικό σημείο:

```
      do while( r .gt. (0.9*dl) .and. r .lt. max_dist)
      ...
      enddo                      !do while()
```

Ο παραπάνω βρόχος εκτελείται μέχρι η απόσταση από το αρχικό σημείο να γίνει μικρότερη από `0.9*dl` ή να φύγουμε εκτός της περιοχής σχεδιασμού. Τα `dx, dy` υπολογίζονται σύμφωνα με την (6.6) :

```
dx =  dl*Ey/E
dy = -dl*Ex/E
```

Η υπορουτίνα `efield` προγραμματίζεται απλά εφαρμόζοντας τους τύπους (6.2) [11]:

```
subroutine efield(x0,y0,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
implicit none
integer  N
real     x0,y0,dx,dy,X(N),Y(N),Q(N),Ex,Ey
integer  i
real     r3,xi,yi

Ex = 0.0
Ey = 0.0
do i=1,N
 xi = x0-X(i)
 yi = y0-Y(i)
 r3 = (xi*xi+yi*yi)**(-1.5)
 Ex = Ex + Q(i)*xi*r3
 Ey = Ey + Q(i)*yi*r3
enddo
end
```

Τέλος, η υπορουτίνα `mdist` που χρησιμοποιούμε αρκετά στα παραπάνω υπολογίζει την ελάχιστη και μέγιστη απόσταση `rmin` και `rmax` από ένα δεδομένο σημείο `(x0,y0)`:

```
subroutine mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
implicit none
integer  N
real     X(N),Y(N),x0,y0,rmin,rmax
integer  i
real     r

rmax = 0.0
rmin = 1000.0
```

[11] Βελτιώστε το πρόγραμμα ώστε να λαμβάνει υπόψη του την περίπτωση $r_i = 0$.

```
      do i = 1,N
        r  = sqrt((x0-X(i))**2 + (y0-Y(i))**2)
        if(r.GT.rmax) rmax = r
        if(r.LT.rmin) rmin = r
      enddo
      end
```

Εδώ οι αρχικές τιμές των rmin και rmax πρέπει να οριστούν προσεκτικά ανάλογα με τα όρια σχεδίασης των δυν. γραμμών.

6.4 Το Πρόγραμμα - Σύνοψη

Στην παράγραφο αυτή παρατίθενται για διευκόλυνση του αναγνώστη ολόκληρα τα προγράμματα των δύο τελευταίων παραγράφων καθώς και συνοπτικές οδηγίες για τη μεταγλώττιση και ανάλυση των αποτελεσμάτων. Μπορείτε αν θέλετε πρώτα να αντιγράψετε τα προγράμματα στα αντίστοιχα αρχεία και να εκτελέσετε τις εντολές συλλογής και ανάλυσης των δεδομένων που δίνονται εδώ χωρίς εξήγηση και μετά να επιστρέψετε στις προηγούμενες παραγράφους για βαθύτερη κατανόηση των πεπραγμένων.

Πρώτα δίνουμε τα περιεχόμενα του αρχείου ELines.f:

```
C     ****************************************************
      program Electric_Fields
C     ****************************************************
      implicit none
      integer   P               !max number of charges
      parameter(P=20)
      real      X(P),Y(P),Q(P)
      integer   N

      real      PI
      parameter(PI= 3.14159265359)
      integer   i,j,nd
      real      x0,y0,theta

C     -------------  SET CHARGE DISTRIBUTION ----
      print *, '# Enter number of charges:'
      read(5,*) N
      print *, '# N= ',N
      do i=1,N
```

```
       print *,'# Charge: ',i
       print *,'# Position and charge: (X,Y,Q):'
       read(5,*)  X(i),Y(i),Q(i)
       print *,'# (X,Y)= ', X(i),Y(i), ' Q= ',Q(i)
      enddo
C     ------------  DRAWING LINES  ------------
C     We draw 2*nd field lines around each charge
      nd    = 6
      do  i = 1,N
       do j = 1,(2*nd)
        theta = (PI/nd)*j
        x0    = X(i) + 0.1 * cos(theta)
        y0    = Y(i) + 0.1 * sin(theta)
        call  eline(x0,y0,X,Y,Q,N)
       enddo
      enddo

      end


      subroutine eline(xin,yin,X,Y,Q,N)
      implicit  none
      real      X(N),Y(N),Q(N),xin,yin,x0,y0
      integer   N
     real     step          !absolute value of step on field line
      parameter(step=0.01)
      real      max_dist        !max distance of field line
      parameter(max_dist=20.0)
      integer   i,direction
      real      rmin,rmax,r,dx,dy,dl
      real      Ex,Ey,E
      do direction = -1,1,2     !direction= +/- 1
       dl = direction * step
       x0 = xin
       y0 = yin
       dx = 0.0
       dy = 0.0
       call mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
       do while(rmin .gt. (2.0*step) .and. rmax .lt. max_dist)
        print *,x0,y0
C       We evaluate the E-field at the midpoint: This reduces
```

```
C       systematic errors
        call efield(x0+0.5*dx,y0+0.5*dy,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
        E  = sqrt(Ex*Ex+Ey*Ey)
        if( E .le. 1.0e-10 ) goto 11 !stop calculation
        dx = dl*Ex/E
        dy = dl*Ey/E
        x0 = x0 + dx
        y0 = y0 + dy
        call mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
       enddo                    !do while()
 11    continue                 !come here if E=0
      enddo                     !do direction = -1,1,2
      end



      subroutine efield(x0,y0,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
      implicit none
      integer N
      real    x0,y0,dx,dy,X(N),Y(N),Q(N),Ex,Ey
      integer i
      real    r3,xi,yi

      Ex  = 0.0
      Ey  = 0.0
      do i= 1,N
       xi = x0-X(i)
       yi = y0-Y(i)
C     Exercise: Improve code so that xi*xi+yi*yi=0 is taken care of
       r3 = (xi*xi+yi*yi)**(-1.5)
       Ex = Ex + Q(i)*xi*r3
       Ey = Ey + Q(i)*yi*r3
      enddo

      end

      subroutine mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
      implicit none
      integer N
      real    X(N),Y(N),x0,y0,rmin,rmax
      integer i
```

```
      real    r

      rmax = 0.0
      rmin = 1000.0
      do i = 1,N
        r  = sqrt((x0-X(i))**2 + (y0-Y(i))**2)
        if(r.GT.rmax) rmax = r
        if(r.LT.rmin) rmin = r
      enddo

      end
```

Στη συνέχεια δίνουμε τα περιεχόμενα του αρχείου `EPotential.f`:

```
C     ************************************************
      program Electric_Potential
C     ************************************************
      implicit none
      integer   P               !max number of charges
      parameter(P=20)
      real      X(P),Y(P),Q(P)
      integer   N

      real      PI
      parameter(PI= 3.14159265359)
      integer   i,j,nd
      real      x0,y0,rmin,rmax,L

      print *, '# Enter number of charges:'
      read(5,*)   N
      print *, '# N= ',N
      do i=1,N
       print *,'# Charge: ',i
       print *,'# Position and charge: (X,Y,Q):'
       read(5,*)  X(i),Y(i),Q(i)
       print *,'# (X,Y)= ', X(i),Y(i), ' Q= ',Q(i)
      enddo

C     -------------  DRAWING LINES  -------------
C     We draw lines passing through an equally
C     spaced lattice of N=(2*nd+1)x(2*nd+1) points
```

```
C     in the square -L<= x <= L, -L<= y <= L.
      nd    = 4
      L     = 1.0
      do  i = -nd,nd
       do j = -nd,nd
        x0  = i*(L/nd)
        y0  = j*(L/Nd)
        print *,'# @ ',i,j,L/nd,x0,y0
        call  mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
C     we avoid getting too close to a charge:
        if(rmin .gt. L/(nd*10) )
     *       call  epotline(x0,y0,X,Y,Q,N)
       enddo
      enddo
      end


      subroutine epotline(xin,yin,X,Y,Q,N)
      implicit none
      integer   N
      real      X(N),Y(N),Q(N),xin,yin,x0,y0
     real     step         !absolute value of step on equipot line
      parameter(step=0.02)
      real     max_dist            !max distance of equipot line
      parameter(max_dist=20.0)
      integer   i
      real      r,dx,dy,dl
      real      Ex,Ey,E

      dl = step
      x0 = xin
      y0 = yin
      dx = 0.0
      dy = 0.0
      r  = step                  !in order to start loop
      do while( r .gt. (0.9*dl) .and. r .lt. max_dist)
       print *,x0,y0
C      We evaluate the E-field at the midpoint: This reduces
C      systematic errors
       call efield(x0+0.5*dx,y0+0.5*dy,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
       E  = sqrt(Ex*Ex+Ey*Ey)
```

```
       if( E .le. 1.0e-10 ) goto 11 !stop calculation
       dx =  dl*Ey/E
       dy = -dl*Ex/E
       x0 = x0 + dx
       y0 = y0 + dy
       r  = sqrt((x0-xin)**2+(y0-yin)**2)
      enddo                       !do while()
 11   continue                    !come here if E=0
      end



      subroutine efield(x0,y0,X,Y,Q,N,Ex,Ey)
      implicit none
      integer  N
      real     x0,y0,dx,dy,X(N),Y(N),Q(N),Ex,Ey
      integer  i
      real     r3,xi,yi

      Ex = 0.0
      Ey = 0.0
      do i=1,N
       xi = x0-X(i)
       yi = y0-Y(i)
C     Exercise: Improve code so that xi*xi+yi*yi=0 is taken care of
       r3 = (xi*xi+yi*yi)**(-1.5)
       Ex = Ex + Q(i)*xi*r3
       Ey = Ey + Q(i)*yi*r3
      enddo
      end

      subroutine mdist(x0,y0,X,Y,N,rmin,rmax)
      implicit none
      integer  N
      real     X(N),Y(N),x0,y0,rmin,rmax
      integer  i
      real     r

      rmax = 0.0
      rmin = 1000.0
      do i = 1,N
```

```
        r  = sqrt((x0-X(i))**2 + (y0-Y(i))**2)
        if(r.GT.rmax) rmax = r
        if(r.LT.rmin) rmin = r
      enddo

      end
```

Τέλος υπενθυμίζουμε στον αναγνώστη πώς να τα τρέξει και να δεί τα αποτελέσματα. Μεταγλωττίζουμε το πρόγραμμα με την εντολή

```
> f77 ELines.f     -o el
> f77 EPotential.f -o ep
```

Στη συνέχεια γράφουμε σε ένα αρχείο `Input` τα δεδομένα της κατανομής των φορτίων. Για παράδειγμα:

```
4              N: Number of charges
 1  1  -1      (X,Y,Q): Position and charge
-1  1   1      (X,Y,Q): Position and charge
 1 -1   1      (X,Y,Q): Position and charge
-1 -1  -1      (X,Y,Q): Position and charge
```

Τα αποτελέσματα τα παίρνουμε με τις εντολές:

```
> ./el < Input > el.dat
> ./ep < Input > ep.dat
> gnuplot
gnuplot> plot "el.dat" with dots
gnuplot> plot "ep.dat" with dots
```

Καλή ... διασκέδαση!

6.5 Ηλεκτροστατικό Πεδίο στο Κενό

Η παράγραφος αυτή βασίζεται στο κεφ. 10 της [1].

Θεωρούμε ηλεκτρικό πεδίο το οποίο είναι ανεξάρτητο του χρόνου σε περιοχή του χώρου άδεια από ηλεκτρικά φορτία. Οι εξισώσεις του Maxwell στην περίπτωση αυτή είναι η εξίσωση Gauss

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(x,y,z) = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0\,, \tag{6.8}$$

μαζί με την εξίσωση που ορίζει το ηλεκτροστατικό δυναμικό[12]

$$\vec{E}(x,y,z) = -\vec{\nabla}V(x,y,z)\,. \tag{6.9}$$

Οι εξισώσεις (6.8) και (6.9) μας δίνουν μία εξίσωση Laplace για τη $V(x,y,z)$:

$$\nabla^2 V(x,y,z) = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0\,. \tag{6.10}$$

Η λύση της παραπάνω εξίσωσης είναι ένα πρόβλημα συνοριακών συνθηκών: Ζητούμε το δυναμικό $V(x,y,z)$ σε μία περιοχή του χώρου $\mathcal{S}$ η οποία περιβάλλεται από το όριό της, μία κλειστή επιφάνεια $\partial\mathcal{S}$. Όταν το δυναμικό είναι γνωστό πάνω στην $\partial\mathcal{S}$ η λύση της (6.10) είναι μοναδική και το δυναμικό και κατ' επέκταση το ηλεκτρικό πεδίο προσδιορίζεται παντού στην $\mathcal{S}$.

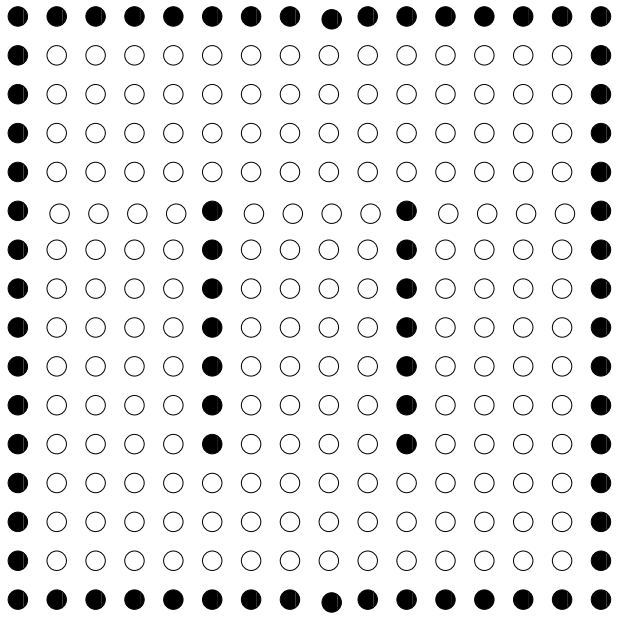
Για απλότητα παρακάτω θεωρούμε το πρόβλημα ανηγμένο στο επίπεδο, οπότε $V = V(x,y)$. Στην περίπτωση αυτή ο τελευταίος όρος στην (6.10) απουσιάζει, η $\mathcal{S}$ είναι συμπαγές τμήμα του επιπέδου και η $\partial\mathcal{S}$ είναι μια κλειστή καμπύλη.

Για να μελετήσουμε το πρόβλημα αριθμητικά, προσεγγίζουμε το χώρο με ένα τετραγωνικό πλέγμα με το δυναμικό να ορίζεται μόνο σε N πλεγματικές θέσεις. Η προσέγγιση της συνεχούς λύσης επιτυγχάνεται όταν η διακριτικοποίηση αυτή εκλεπτύνεται παίρνοντας τον αριθμό των πλεγματικών σημείων στο όριο $N \to \infty$. Η καμπύλη $\partial\mathcal{S}$ προσεγγίζεται από τις πλεγματικές θέσεις που αποτελούν το όριο του πλέγματος και πιθανώς από άλλα σημεία στο εσωτερικό στα οποία η τιμή του δυναμικού είναι δεδομένη. Το φυσικό σύστημα που αντιστοιχεί στο μοντέλο μας είναι μια διάταξη από αγωγούς των οποίων το δυναμικό διατηρήται σταθερό και ζητήται το ηλετρικό πεδίο που δημιουργήται στον περιβάλλοντα χώρο τους. Μία τέτοια διάταξη φαίνεται στο σχήμα 6.6.

Για να βούμε την εξίσωση πεπερασμένων διαφορών που θα προσεγγίζει την Εξίσωση (6.10) , θεωρούμε την ανάπτυξη κατά Taylor:

$$\begin{aligned}
V(x+\delta x,y) &= V(x,y) + \frac{\partial V}{\partial x}\delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(\delta x)^2 + \dots \\
V(x-\delta x,y) &= V(x,y) - \frac{\partial V}{\partial x}\delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(\delta x)^2 + \dots \\
V(x,y+\delta y) &= V(x,y) + \frac{\partial V}{\partial y}\delta y + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial y^2}(\delta y)^2 + \dots \\
V(x,y-\delta y) &= V(x,y) - \frac{\partial V}{\partial y}\delta y + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial y^2}(\delta y)^2 + \dots\,.
\end{aligned}$$

[12]Ισοδύναμη με την εξίσωση $\vec{\nabla}\times\vec{E} = 0$.



Σχήμα 6.6: Πλέγμα που αντιστοιχεί στη διάταξη δύο παράλληλων επίπεδων αγωγών μέσα σε γειωμένο μεταλλικό κουτί. Οι μαύρες πλεγματικές θέσεις αντιστοιχούν σε σημεία σταθερού δυναμικού (όχι κατ' ανάγκη το ίδιο), ενώ οι άσπρες σε σημεία του κενού χώρου.

Παίρνοντας το άθροισμα και των δύο μελών της παραπάνω εξίσωσης, $\delta x = \delta y$ και αγνοώντας τους όρους ... παίρνουμε

$$\begin{aligned} & V(x+\delta x, y) + V(x-\delta x, y) + V(x, y+\delta y) + V(x, y-\delta y) \\ & \quad = 4V(x,y) + (\delta x)^2 (\frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 V}{\partial y^2}) + \dots \\ & \quad \approx 4V(x,y)\,. \end{aligned} \tag{6.11}$$

Θεωρώντας τις συντεταγμένες των πλεγματικών σημείων να δίνονται από ακέραιους (i, j) η παραπάνω εξίσωση γίνεται:

$$V(i,j) = \frac{1}{4}(V(i-1,j) + V(i+1,j) + V(i,j-1) + V(i,j+1))\,, \tag{6.12}$$

η οποία ερμηνεύεται με απλό τρόπο: Το δυναμικό στη θέση (i, j) είναι απλά ο μέσος όρος του δυναμικού των πλησιεστέρων γειτόνων του[13]. Ο αλγόριθμος που θα ακολουθήσουμε εντάσσεται στη γενική κατηγορία μεθόδων "χαλάρωσης " (relaxation methods) και τα βασικά του βήματα είναι:

[13] Αυτό συνδέει το πρόβλημα άμεσα με προβλήματα *διάχυσης*!

1. Καθορίζεται το μέγεθος τετραγωνικού πλέγματος με L πλεγματικές θέσεις σε κάθε πλευρά.

2. Καθορίζονται οι πλεγματικές θέσεις που έχουν καθορισμένο δυναμικό και δίνεται η τιμή του δυναμικού στις θέσεις αυτές.

3. Καθορίζεται αυθαίρετη τιμή για το δυναμικό στις υπόλοιπες θέσεις. Μια καλή επιλογή θα δώσει γρηγορότερη σύγκλιση προς τη σωστή συνάρτηση $V(x, y)$. Μια κακή επιλογή αργή σύγκλιση ή/και σύγκλιση προς λανθασμένη λύση.

4. Σε διαδοχικά επαναλαμβανόμενα "περάσματα" (sweeps) του πλέγματος επικεπτόμαστε κάθε πλεγματική θέση και υπολογίζουμε το δυναμικό V_{av} από τη σχέση (6.12) και ορίζουμε αυτή να είναι η νέα τιμή του δυναμικού στη θέση αυτή.

5. Η διαδικασία σταματάει όταν σε δύο διαδοχικά περάσματα η μεταβολή του δυναμικού είναι ικανοποιητικά μικρή. Υποθέτουμε δηλ. ότι έχουμε πρακτικά επιτύχει τη σύγκλιση στη σωστή λύση.

Η προσεκτική χρήση του παραπάνω αλγόριθμου απαιτεί να τον μελετήσουμε με διαφορετικά κριτήρια "ικανοποιητικά μικρής " διαφοράς και διαφορετικές αρχικές συνθήκες.

Παρακάτω παραθέτουμε πρόγραμμα που χρησιμοποιεί τον παραπάνω αλγόριθμο για τον υπολογισμό του ηλεκτροστατικού δυναμικού δύο παράλληλων επίπεδων μεταλλικών αγωγών που βρίσκονται μέσα σε ένα γειωμένο τετράγωνο μεταλλικό αγώγιμο κουτί. Το πλέγμα φαίνεται στο Σχήμα 6.6, όπου οι μαύρες κουκίδες αναπαριστούν τους αγωγούς. Το κουτί έχει δυναμικό $V = 0$ ενώ οι αγωγοί δυναμικό V_1 και V_2 αντίστοιχα. Ο χρήστης στην είσοδο δίνει τις τιμές V_1 και V_2 καθώς, το μέγεθος L του πλέγματος και την ακρίβεια συγκλισης που επιθυμεί. Η τελευταία καθορίζεται ποσοτικά από ένα μικρό αριθμό ϵ. Η μέγιστη μεταβολή στο δυναμικό ανάμεσα σε δύο διαφορετικά περάσματα του πλέγματος θα πρέπει να είναι μικρότερη από ϵ για επίτευξη σύγκλισης της μεθόδου.

Η δομή των δεδομένων είναι απλή. Χρειαζόμαστε ένα πραγματικό array `V(L,L)` με αποθηκευμένες τις τιμές του δυναμικού και ένα logical array `isConductor(L,L)` το οποίο καθορίζει αν μια πλεγματική θέση έχει καθορισμένο δυναμικό ("αγωγός " = `.TRUE.`) ή όχι ("κενός χώρος " = `.FALSE.`).

Το κυρίως πρόγραμμα αφού διαβάσει τα δεδομένα από το χρήστη καλεί τρεις υπορουτίνες:

1. `initialize_lattice(V,isConductor,L,V1,V2)`:
   Τα δεδομένα εισόδου της ρουτίνας είναι το δυναμικό V1 του αριστερού αγωγού και το δυναμικό V2 του δεξιού αγωγού, καθώς και το μέγεθος του πλέγματος L. Οι μεταβλητές εξόδου είναι τα arrays V(L,L) και isConductor(L,L) τα οποία στην έξοδο έχουν τις αρχικές τιμές: V1 στον αριστερό αγωγό, V2 στο δεξί, 0 στο κουτί καθώς και την αυθαίρετη τιμή 0 για τις υπόλοιπες πλεγματικές θέσεις. Η γεωμετρία της διάταξης είναι κωδικοποιημένη και ο χρήστης που θα θέλει να τη μεταβάλλει (λ.χ. μεταβολή απόστασης αγωγών, προσθήκη/αφαίρεση αγωγού κλπ) θα πρέπει να επέμβει στον κώδικα και να κάνει τις απαραίτητες μετατροπές.

2. `laplace(V,isConductor,L,epsilon)`:
   Η καρδιά του προγράμματος. Στην είσοδο παρέχουμε τα αρχικοποιημένα arrays V(L,L), isConductor(L,L) και τη διάστασή τους L, καθώς και την επιθυμητή ακρίβεια σύγκλισης epsilon. Στην έξοδο παίρνουμε την τελική λύση V(L,L) για περεταίρω επεξεργασία. Στη ρουτίνα αυτή υπολογίζουμε τη μέση τιμή του δυναμικού Vav των πλησιέστερων γειτόνων κάθε πλεγματικής θέσης και αμέσως αλλάζουμε την τιμή V(i,j)=Vav[14]. Η μέγιστη τιμή error της απόκλισης της νέας τιμής του δυναμικού Vav από την παλιά V(i,j) υπολογίζεται για κάθε σάρωση του πλέγματος. Αν αυτή γίνει μικρότερη από μια δεδομένη τιμή epsilon η διαδικασία ...χαλάρωσης σταματάει.

3. `print_results(V,L)`:
   Η υπορουτίνα αυτή απλά τυπώνει το δυναμικό V(L,L) στο αρχείο data. Τυπώνονται οι συντεταγμένες i, j και η τιμή V(i,j) σε κάθε γραμμή. Το μόνο άξιο λόγου να αναφέρουμε είναι ότι κάθε φορά που αλλάζει ο δείκτης i το πρόγραμμα τυπώνει μια κενή γραμμή. Αυτό γίνεται για να επεξεργαστούμε τα αποτελέσματα με το πρόγραμμα γραφικών gnuplot. Για να γίνει τρισδιάστατη γραφική παράσταση συνάρτηση δύο μεταβλητών με την εντολή splot πρέπει το format των δεδομένων να είναι αυτής της μορφής.

Όλο το πρόγραμμα ακολουθεί παρακάτω:

```
C cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

[14] Παραλλαγή της μεθόδου θα ήταν η τιμή Vav να αποθηκευτεί σε ένα προσωρινό array Vnew(i,j) και η αλλαγή των τιμών V(i,j)=Vnew(i,j) να γίνεται μετά από τη σάρωση του πλέγματος. Ποιά μέθοδος περιμένετε να έχει καλύτερες ιδιότητες σύγκλισης? Δοκιμάστε...

```
C     PROGRAM LAPLACE_EM
C     Computes the electrostatic potential around conductors.
C     The computation is performed on a square lattice of linear
C    dimension L. A relaxation method is used to converge to the
C     solution of Laplace equation for the potential.
C     DATA STRUCTURE:
C   real *8 V(L,L): Stores value of the potential on the lattice sites
C   logical isConductor(L,L): If .TRUE.  site has fixed potential
C                                If .FALSE. site is empty space
C     real epsilon: Determines the accuracy of the solution
C     The maximum difference of the potential on each
C   site betwenn two consecutive sweeps should be less than epsilon.
C     PROGRAM STRUCTURE
C     main program:
C     1. Data Input
C     2. call subroutines for initialization, computation and
C     printing of results
C     subroutine initialize_lattice:
C     1. Initilization of V(L,L) and isConductor(L,L)
C     subroutine laplace:
C     1. Solves laplace equation using a relaxation method
C     subroutine print_results:
C   1. Prints results for V(L,L) in a file. Uses format compatible
C     with splot of gnuplot.
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program laplace_em
      implicit none
C     P defines the size of the arrays and is equal to L
      integer P
      parameter(P=31)
      logical isConductor(P,P)
      real *8 V(P,P)
C     V1 and V2 are the values of the potential on the interior
C   conductors. epsilon is the accuracy desired for the convergence of
C     the relaxation method in subroutine laplace()
      real *8 V1,V2,epsilon
      integer L
C   We ask the user to provide the necessary data: V1,V2 and epsilon
      L = P
      print *,'Enter V1,V2:'
      read(5,*) V1,V2
```

```
      print *,'Enter epsilon:'
      read(5,*) epsilon
      print *,'Starting Laplace:'
      print *,'Grid Size= ',L
      print *,'Conductors set at V1= ',V1,' V2= ',V2
      print *,'Relaxing with accuracy epsilon= ',epsilon

C     The arrays V and isConductor are initialized
      call initialize_lattice(V,isConductor,L,V1,V2)
C    We enter initialized V,isConductor. On exit the routine gives the
C     solution V
      call laplace(V,isConductor,L,epsilon)
C     We print V in a file.
      call print_results(V,L)

      end

C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     subroutine initialize_lattice
C     Initializes arrays V(L,L) ans isConductor(L,L).
C     V(L,L)= 0.0  and isConductor(L,L)= .FALSE. by default
C     isConductor(i,j)= .TRUE. on boundary of lattice where V=0
C    isConductor(i,j)= .TRUE. on all sites with i= L/3+1, 5<= j <= L-5
C    isConductor(i,j)= .TRUE. on all sites with i=2*L/3+1, 5<= j <= L-5
C     V(i,j) = V1  on all sites with i=  L/3+1, 5<= j <= L-5
C     V(i,j) = V2  on all sites with i=2*L/3+1, 5<= j <= L-5
C     V(i,j) = 0   on boundary (i=1,L and j=1,L)
C    V(i,j) = 0  on interior sites for which isConductor(i,j)= .FALSE.
C     INPUT:
C     integer L: Linear size of lattice
C     real*8  V1,V2: Values of potential on interior conductors
C     OUTPUT:
C    real*8  V(L,L): Array provided by user. Stores values of potential
C    logical isConductor(L,L): If .TRUE.  site has fixed potential
C                                If .FALSE. site is empty space
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine initialize_lattice(V,isConductor,L,V1,V2)
      implicit none
      integer L
      logical isConductor(L,L)
      real *8 V(L,L)
```

```
      real *8 V1,V2

      integer i,j

C    Initialize to 0 and .FALSE (default values for boundary and
C     interior sites).
      do  j=1,L
       do i=1,L
        V          (i,j) = 0.0D0
        isConductor(i,j) = .FALSE.
       enddo
      enddo

C     We set the boundary to be a conductor: (V=0 by default
      do i=1,L
       isConductor(1,i) = .TRUE.
       isConductor(i,1) = .TRUE.
       isConductor(L,i) = .TRUE.
       isConductor(i,L) = .TRUE.
      enddo

C     We set two conductors at given potential V1 and V2
      do i=5,L-5
       V          (  L/3+1,i) =  V1
       isConductor(  L/3+1,i) = .TRUE.
       V          (2*L/3+1,i) =  V2
       isConductor(2*L/3+1,i) = .TRUE.
      enddo

      end

C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     subroutine laplace
C    Uses a relaxation method to compute the solution of the Laplace
C    equation for the electrostatic potential on a 2 dimensional square
C     lattice of linear size L.
C    At every sweep of the lattice we compute the average Vav of the
C    potential at each site (i,j) and we immediately update V(i,j)
C     The computation continues until Max |Vav-V(i,j)| < epsilon
C     INPUT:
C     integer L: Linear size of lattice
```

```
C     real*8 V(L,L): Value of the potential at each site
C     logical isConductor(L,L): If .TRUE.  potential is fixed
C                               If .FALSE. potential is updated
C    real*8 epsilon: if Max |Vav-V(i,j)| < epsilon return to calling
C     program.
C     OUTPUT:
C     real*8 V(L,L): The computed solution for the potential
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine laplace(V,isConductor,L,epsilon)
      implicit none
      integer L
      logical isConductor(L,L)
      real *8 V(L,L)
      real *8 epsilon

      integer i,j,icount
      real *8 Vav,error,dV

     icount = 0             !counts number of sweeps, to be printed
    do while (.TRUE.)       !an infinite loop. We exit when error<epsilon
       error = 0.0D0
     do  j=2,L-1 !j is the outer index in V(i,j) so we put in outer loop
         do i=2,L-1
C     We change the voltage only for non conductors:
          if( .NOT. isConductor(i,j))then
           Vav = ( V(i-1,j)+V(i+1,j)+V(i,j+1)+V(i,j-1)) * 0.25D0
           dV  = DABS(V(i,j)-Vav)
           if(error .LT. dV ) error = dV !maximum error
           V(i,j) = Vav          ! we immendiately update V(i,j)
          endif
         enddo
        enddo
        icount = icount + 1
        print *,icount,' err= ',error
        if( error .LT. epsilon) return !return to main program
       enddo

       end

C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     subroutine  print_results
```

```
C     Prints the array V(L,L) in file "data"
C   The format of the output is appropriate for the splot function of
C     gnuplot: Each time i changes an empty line is printed.
C     INPUT:
C     integer L: size of array V
C     real *8 V(L,L): array to be printed
C     OUTPUT:
C     no output
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      subroutine  print_results(V,L)
      implicit none
      integer L
      real *8 V(L,L)

      integer i,j

      open(unit=11,file="data")
      do i=1,L
       do j =1,L
        write(11,*)i,j,V(i,j)
       enddo
     write (11,*)'' !print empty line for gnuplot, separate isolines
      enddo

      end
```

6.6 Αποτελέσματα

Το παραπάνω πρόγραμμα το αποθηκεύουμε στο αρχείο `LaplaceEq.f`. Η μεταγλώττιση του προγράμματος γίνεται με τον μεταγλωττιστή `f77`[15]. Το εκτελέσιμο αρχείο το ονομάζουμε lf και το δημιουργούμε με την επιλογή `-o lf` του μεταγλωττιστή. Παρακάτω φαίνεται πώς τρέχει το πρόγραμμα για `L=31` από τη γραμμή εντολών όταν ο χρήστης καθορίσει `V1= 100.0 V2= -100.0 epsilon= 0.01`. Οι εντολές στο `>f77...` και `>./lf` δίνονται στη γραμμή εντολών του φλοιού. Μετα φαίνεται το input/output του προγράμματος:

```
> f77 LaplaceEq.f -o lf
```

[15] Στο σύστημα Linux αυτός είναι ο GNU fortran compiler που διατίθεται ελεύθερα σε πολλά λειτουργικά συστήματα.

```
> ./lf
 Enter V1,V2:
100 -100
 Enter epsilon:
0.01
 Starting Laplace:
 Grid Size=  31
 Conductors set at V1=   100. V2=  -100.
 Relaxing with accuracy epsilon=   0.01
 1 err=   33.3333333
 2 err=   14.8148148
 3 err=   9.87654321
.......................
 110 err=   0.0106860904
 111 err=   0.0101182476
 112 err=   0.00958048937
```

Το πρόγραμμα κάνει 112 περάσματα στο πλέγμα μέχρι το μέγιστο σφάλμα να γίνει `0.00958048937 < 0.01`. Τα αποτελέσματα αποθηκεύονται στο αρχείο `data`. Για να δούμε τα αποτελέσματα χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα `gnuplot`. Παρακάτω η εντολή `>gnuplot` δίνεται στο φλοιό, ενώ όταν το prompt είναι `gnuplot>` η εντολή δίνται στη γραμμή εντολών του `gnuplot`:

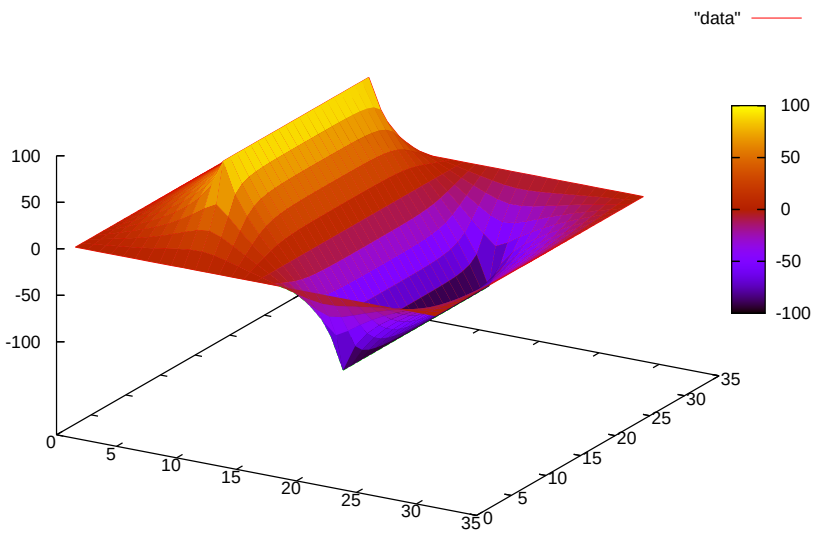
```
> gnuplot
gnuplot> set pm3d
gnuplot> set hidden3d
gnuplot> set size ratio 1
gnuplot> splot "data" with lines
```

Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 6.7

6.7 Εξίσωση Poisson

Τέλος ας αναφέρουμε περιληπτικά τη λύση του προβλήματος που μελετήσαμε στις προηγούμενες παραγράφους όταν υπάρχει στην περιοχή που μελετάμε κατανομή στατικού ηλεκτρικού φορτίου που δίνεται από την πυκνότητα φορτίου $\rho(\vec{r})$. Στην περίπτωση αυτή η εξίσωση Laplace για το δυναμικό γίνεται εξίσωση Poisson:

$$\nabla^2 V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = -4\pi\rho(x, y, z) \tag{6.13}$$



Σχήμα 6.7: Η λύση της εξίσωσης (6.10) από το πρόγραμμα `LaplaceEq.f` για `L=31, V1=100, V2=-100, epsilon=0.01`.

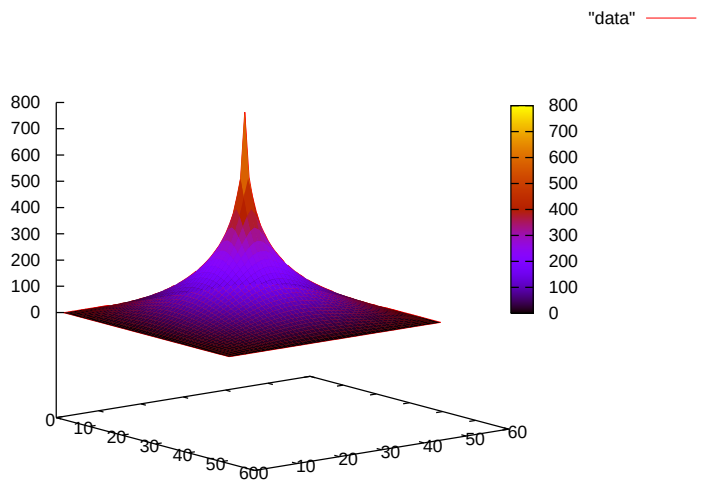
Η μορφή της εξίσωσης στο επίπεδο πλέγμα που μελετήσαμε γίνεται

$$V(i,j) = \frac{1}{4}(V(i-1,j)+V(i+1,j)+V(i,j-1)+V(i,j+1)+\rho(i,j)), \quad (6.14)$$

και είναι πάρα πολύ απλό να μετατρέψουμε τον κώδικα της προηγούμενης παραγράφου έτσι ώστε να μελετήσουμε κατανομές φορτίου που επιθυμούμε.

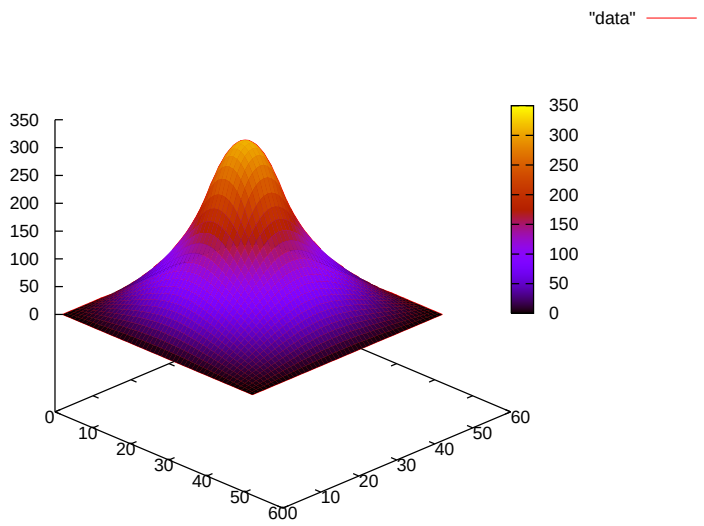
Παρακάτω παραθέτουμε το πρόγραμμα `PoissonEq.f` που λύνει την (6.14) για ομοιόμορφη κατανομή του φορτίου (Σχήμα 6.10). Ο αναγνώστης καλείται να αναπαράγει το σχήμα αυτό, καθώς και τα 6.8, 6.9.

```
program laplace_sq
implicit none

integer P
parameter(P=51)
logical isConductor(P,P)
real *8 V(P,P),rho(P,P),Q
```



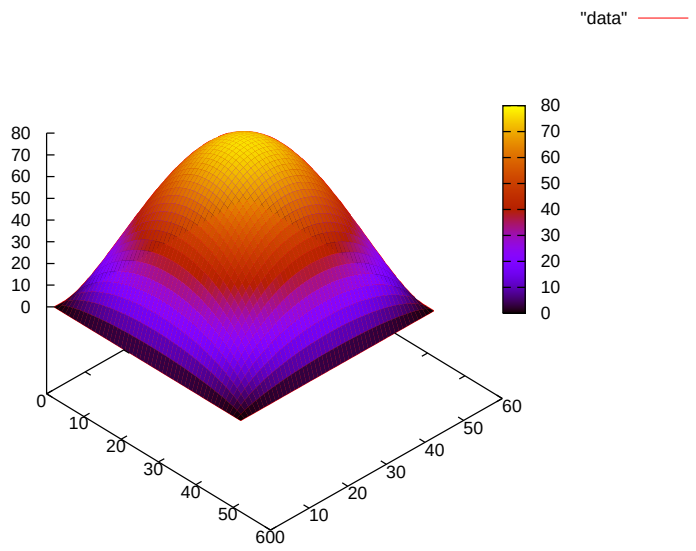
Σχήμα 6.8: Η λύση της εξίσωσης (6.13) από το πρόγραμμα `Poisson.f` για `L= 51`, `V= 0` στο σύνορο και το φορτίο `Q= 1000` συγκεντρωμένο σε ένα σημείο.

```
      real *8 V1,V2,V3,V4,epsilon
      integer L

      L = P
      print *,'Enter V1,V2,V3,V4:'
      read(5,*) V1,V2,V3,V4
      print *,'Enter total charge Q:'
      read(5,*) Q
      print *,'Enter epsilon:'
      read(5,*) epsilon
      print *,'Starting Laplace:'
      print *,'Grid Size= ',L
    print *,'Boundaries set at V1= ',V1,' V2= ',V2,' V3= ',V3,' V4= ',
     *     V4
      print *,'Relaxing with accuracy epsilon= ',epsilon

     call initialize_lattice(V,isConductor,rho,L,V1,V2,V3,V4,Q)
      call laplace(V,isConductor,rho,L,epsilon)
      call print_results(V,L)
```



Σχήμα 6.9: Η λύση της εξίσωσης (6.13) από το πρόγραμμα `Poisson.f` για `L= 51`, `V= 0` στο σύνορο και το φορτίο `Q= 1000` κατανεμημένο ομοιόμορφα σε ένα μικρό τετράγωνο πλάτους 10 πλεγματικών σημείων.

```
      end

    subroutine initialize_lattice(V,isConductor,rho,L,V1,V2,V3,V4,Q)
      implicit none
      integer L
      logical isConductor(L,L)
      real *8 V(L,L),rho(L,L)
      real *8 V1,V2,V3,V4,Q
      real *8 Area
      integer i,j
      integer L1,L2

C     Initialize to 0 and .FALSE.
      do  j=1,L
       do i=1,L
        V           (i,j) = 0.0D0
        rho         (i,j) = 0.0D0
```



Σχήμα 6.10: Η λύση της εξίσωσης (6.13) από το πρόγραμμα `Poisson.f` για `L= 51`, `V= 0` στο σύνορο και το φορτίο `Q= 1000` κατανεμημένο ομοιόμορφα σε όλες τις εσωτερικές πλεγματικές θέσεις.

```
        isConductor(i,j) = .FALSE.
       enddo
      enddo

C     We set the boundary to be a conductor:
      do i=1,L
       isConductor(1,i) = .TRUE.
       isConductor(i,1) = .TRUE.
       isConductor(L,i) = .TRUE.
       isConductor(i,L) = .TRUE.
       V           (1,i) =  V1
       V           (i,L) =  V2
       V           (L,i) =  V3
       V           (i,1) =  V4
      enddo

C     We set the points with non-zero charge
C     A uniform distribution at the interior
```

```
      L1 = 2
      L2 = L-1
      Area = (L2-L1+1)*(L2-L1+1)
      do j=L1,L2
       do i=L1,L2
        rho(i,j) = Q/Area
       enddo
      enddo

      end

      subroutine laplace(V,isConductor,rho,L,epsilon)
      implicit none
      integer L
      logical isConductor(L,L)
      real *8 V(L,L),rho(L,L)
      real *8 epsilon

      integer i,j,icount
      real *8 Vav,error,dV

      icount = 0
      do while (.TRUE.)
       error = 0.0D0
       do  j=2,L-1
        do i=2,L-1
C      We change the voltage only for non conductors:
          if( .NOT. isConductor(i,j))then
       Vav = ( V(i-1,j)+V(i+1,j)+V(i,j+1)+V(i,j-1)+rho(i,j)) * 0.25D0
           dV  = DABS(V(i,j)-Vav)
           if(error .LT. dV ) error = dV !maximum error
           V(i,j) = Vav
          endif
        enddo
       enddo
       icount = icount + 1
       print *,icount,' err= ',error

       if( error .LT. epsilon) return
      enddo
```

```
end

subroutine  print_results(V,L)
implicit none
integer L
real *8 V(L,L)

integer i,j

open(unit=11,file="data")
do i=1,L
 do j =1,L
  write(11,*)i,j,V(i,j)
 enddo
 write (11,*)'' !for gnuplot, separate isolines
enddo

end
```

6.8 Ασκήσεις

6.1 Φτιάξτε τις εικόνες των δυναμικών και ισοδυναμικών γραμμών που βρίσκονται στην παράγραφο 6.2.

6.2 Στις προηγούμενες κατανομές φορτίων κάνετε όλα τα φορτία θετικά. Φτιάξτε τις εικόνες των δυναμικών και ισοδυναμικών γραμμών. Μετά δώστε στα φορτία αυτά διαφορετική τιμή και επαναλάβετε.

6.3 Γιατί το πρόγραμμα `ELines.f` κολλάει σε κατανομή ίσων φορτίων πάνω σε κορυφές τετραγώνων; Πώς διορθώνεται η παθολογία αυτή;

6.4 Μεταβάλλετε το πρόγραμμα `ELines.f` ώστε ο αριθμός των δυναμικών γραμμών που ξεκινάνε από ένα φορτίο να είναι ανάλογος του μέτρου του.

6.5 Βελτιώστε το πρόγραμμα `EPotential.f` έτσι ώστε οι ισοδυναμικές καμπύλες να ζωγραφίζονται με πυκνότητα ανάλογη του ηλεκτρικού πεδίου. Υπόδειξη:

(α′) Γράψτε υπορουτίνα που να υπολογίζει το δυναμικό $V(x, y)$ στο σημείο (x, y).

(β′) Από κάθε φορτίο παίρνουμε μια ευθεία στην ακτινική διεύθυνση και υπολογίζουμε το δυναμικό πάνω σε αυτη σε σημεία που απέχουν μικρή απόσταση Δl.

(γ′) Υπολογίζουμε τη μέγιστη/ελάχιστη τιμή του δυναμικού V_{max}/V_{min} και από εκεί τις τιμές του δυναμικού πάνω στις ισοδυναμικές καμπύλες που θα σχεδιάσουμε. Αν λ.χ. αποφασίσετε να σχεδιάζετε 5 ισοδ. καμπύλες, πάρτε $\delta V = (V_{max} - V_{min})/4$ και $V_i = V_{min} + i\delta V \;\; i = 1, \ldots, 4$.

(δ′) Επαναλάβατε το δεύτερο βήμα. Όταν το δυναμικό παίρνει τιμή (σχεδόν) ίση με μια απο αυτές που διαλέξατε στο τρίτο βήμα, σχεδιάστε την δυναμική γραμμή.

6.6 Μελετήστε το ηλεκτρικό πεδίο που προκύπτει από το πρόγραμμα `LaplaceEq.f` για:

(α′) `L= 31, V1=100, V2=100`

(β′) `L= 31, V1=100, V2=0`

και φτιάξτε τα αντίστοιχα σχήματα.

6.7 Μελετήστε το ηλεκτρικό πεδίο που προκύπτει από το πρόγραμμα `LaplaceEq.f` για:

(α′) `V1=100, V2=100`

(β′) `V1=100, V2=100`

(γ′) `V1=100, V2=0`

για `L=31,61,121,241,501` και φτιάξτε τα αντίστοιχα σχήματα. Μεταβάλλετε την ακρίβεια προσδιορισμού της λύσεις `epsilon=0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001`. Πως εξαρτάται ο αριθμός περασμάτων N του πλέγματος από το `epsilon`? Φτιάξτε γραφική παράσταση N(`epsilon`) στην οποία θα τοποθετήσετε τις καμπύλες N(`epsilon`) για τα διαφορετικά `L` που χρησιμοποιήσατε.

6.8 Μελετήστε το ηλεκτρικό πεδίο τετράγωνου αγωγού του οποίου κάθε πλευρά έχει διαφορετικό δυναμικό `V1, V2, V3, V4`. Επαναλάβετε τη μελέτη που κάνατε στην προηγούμενη άσκηση για τις περιπτώσεις:

(α′) `V1=10, V2=5, V3=10, V4= 5`

(β′) `V1=10, V2=0, V3=0, V4= -10`

(γ′) `V1=10, V2=0, V3=0, V4= 0`

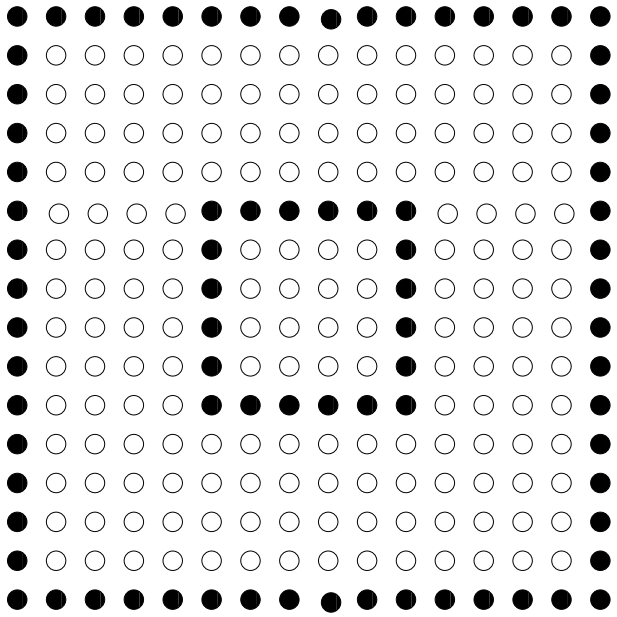
6.9 Μελετήστε το ηλεκτρικό πεδίο συστήματος τετράγωνων αγωγών που βρίσκεται ο ένας μέσα στον άλλο όπως στο Σχήμα 6.11. Ο κάθε αγωγός έχει πλευρά `L1, L2` και βρίσκεται σε δυναμικό `V1,V2` αντίστοιχα. Πάρτε `L2= L1/5` και επαναλάβετε την μελέτη της προηγούμενης άσκησης για `V1=10, V2=-10` και `L1= 25, 50, 100, 200`.

6.10 Υπολογίστε αριθμητικά τη χωρητικότητα $C = Q/V$ του συστήματος της προηγούμενης άσκησης όταν $V_1 = V$, $V_2 = -V$. Για να υπολογίσετε το φορτίο Q μπορείτε να υπολογίσετε την επιφανειακή πυκνότητα φορτίου σ από τη σχέση

$$\sigma = \frac{E_n}{4\pi}\,,$$

όπου E_n η κάθετη συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου στην επιφάνεια την οποία θα προσεγγίσετε από τη σχέση

$$E_n = -\frac{\delta V}{\delta r}\,,$$



Σχήμα 6.11: Η διάταξη αγωγών που ζητήται να μελετηθεί το ηλεκτρικό πεδίο στην Άσκηση 6.9.

όπου δV είναι η διαφορά δυναμικού μεταξύ ενός σημείου του αγωγού και του σημείου που είναι πλησιέστερος γείτονάς του. Με τον τρόπο αυτό υπολογίστε το συνολικό φορτίο και κάθε αγωγό. Αν αυτά είναι αντίθετα και κατ' απόλυτη τιμή ίσα με Q τότε προσδιορίζεται η χωρητικότητα C.

(α′) Κάνετε τον παραπάνω υπολογισμό για `L1=25, 75`.

(β′) Μεταθέστε τον κεντρικό αγωγό 1 πλεγματική θέση αριστερά. Είναι τα δύο φορτία ίσα τώρα? Δοκιμάστε να μελετήσετε την απόκλιση αυτή καθώς μετατοπίζουμε τον κεντρικό αγωγό προς τα αριστερά.

6.11 Στο σύστημα της προηγούμενης άσκησης μελετήστε τη συνάρτηση $Q(V)$. Βεβαιωθήτε ότι η χωρητικότητα είναι ανεξάρτητη της διαφοράς δυναμικού. Πάρτε `L1=25,50, V1= -V2 =1, 2, 5, 10, 15, 20, 25`. Εξετάστε την εξάρτηση των αποτελεσμάτων σας για διαφορετικές τιμές της ακρίβειας `epsilon`. Είναι δυνατόν για αρκετά μικρό `epsilon` να πάρετε $C = $ σταθ.?

6.12 Αναπαράγετε τα Σχήματα 6.8, 6.9 και 6.10. Στην πρώτη περίπτωση συγκρίνετε τη λύση που θα πάρετε με αυτή που δίνεται

από το δυναμικό σημειακού ηλεκτρικού φορτίου. Φτιάξετε ανάλογα σχήματα για μικρότερες τιμές του φορτίου και βάζοντας διαφορετικές τιμές του δυναμικού στο σύνορο του πλέγματος.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

Ο Αναρμονικός Ταλαντωτής

Στο κεφάλαιο αυτό θα εφαρμόσουμε μεθόδους πινάκων για τη λύση του κβαντομηχανικού προβλήματος του προσδιορισμού των ενεργειακών επιπέδων του αναρμονικού ταλαντωτή. Το πρόβλημα αυτό δεν μπορεί να λυθεί ακριβώς αναλυτικά οπότε πρέπει να προσφύγουμε σε διαταρακτικές ή αριθμητικές μαθόδους. Εμείς θα αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα αριθμητικά. Για το σκοπό αυτό θα προσδιορίσουμε κατάλληλη βάση για να εκφράσουμε τη Χαμιλτονιανή H υπό μορφή πίνακα και θα τον διαγωνιοποιήσουμε αριθμητικά. Φυσικά ο πίνακας αυτός είναι απείρου μεγέθους και θα χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση η βάση που θα επιλέξουμε να έχει πεπερασμένο αριθμό από μέλη. Για να ελέγξουμε την ακρίβεια των αποτελεσμάτων μας, θα πρέπει να βεβαιωθούμε πως οι υπολογιζόμενες τιμές συγκλίνουν με την επιθυμητή ακρίβεια στις πραγματικές τιμές καθώς θα υπολογίζουμε με συνεχώς αυξανόμενο μέγεθος της βάσης στο χώρο Hilbert.

Για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών θα χρησημοποιήσουμε τις υποροutίνες που βρίσκουμε στην βιβλιοθήκη `LAPACK`, θα είναι λοιπόν μια άσκηση για το πώς να συνδέουμε το πρόγραμμά μας με υπάρχουσες βιβλιοθήκες.

Το κεφάλαιο αυτό βασίζεται στα Mathematica Notebooks του Peter West (`http://bartok.ucsc.edu/peter/115`) και στις σημειώσεις "Computational Physics" των U. Wolff, B. Bunk και F. Knechtli. Ο φοιτητής που ενδιαφέρεται μπορεί να ανατρέξει σε αυτές και να δει πώς λύνονται τα προβλήματα με τη χρήση `Mathematica` και `Matlab` αντίστοιχα.

7.1 Εισαγωγή

Η Χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή δίνεται από τη σχέση:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{7.1}$$

και ορίζοντας $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$, $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ παίρνουμε την εξίσωση αδιάστατων μεγεθών:

$$\frac{H_0}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}(\frac{p}{p_0})^2 + \frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2 \,. \tag{7.2}$$

Μετρώντας την ενέργεια σε μονάδες $\hbar\omega$, τις αποστάσεις σε μονάδες x_0 και τις ορμές σε μονάδες p_0 παίρνουμε

$$H_0 = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 \tag{7.3}$$

Ο τελεστής H_0 μπορεί να διαγωνιοποιήθει εύκολα με τη βοήθεια των τελέστων δημιουργίας/καταστροφής:

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \qquad p = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \tag{7.4}$$

ή

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip) \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip) \tag{7.5}$$

που ικανοποιούν τη σχέση μετάθεσης

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{7.6}$$

και τότε

$$H_0 = a^\dagger a + \frac{1}{2} \,. \tag{7.7}$$

Οι ιδιοκαταστάσεις της H_0 ικανοποιούν τις σχέσεις ($n = 0, 1, 2, \ldots$)

$$a^\dagger \,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad a\,|0\rangle = 0 \tag{7.8}$$

οπότε

$$a^\dagger\, a\,|n\rangle = n\,|n\rangle \tag{7.9}$$

και

$$H_0\;|n\rangle = E_n\,|n\rangle\,, \qquad E_n = n + \frac{1}{2}\,. \tag{7.10}$$

Η αναπαράσταση θέσης των ιδιοκαταστάσεων $|n\rangle$ είναι:

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-x^2/2}H_n(x) \tag{7.11}$$

όπου $H_n(x)$ τα πολυώνυμα Hermite.

Από τις σχέσεις (7.4) , (7.8) προκύπτει ότι

$$x_{nm} = \langle n| x |m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{m}\,\delta_{n,m-1} \quad (7.12)$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{n+m+1}\,\delta_{|n-m|,1} \quad (7.13)$$

$$p_{nm} = \langle n| p |m\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}\sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1} + \frac{i}{\sqrt{2}}\sqrt{m}\,\delta_{n,m-1} \quad (7.14)$$

Από την παραπάνω σχέση μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε την Χαμιλτονιανή του αναρμονικού ταλαντωτή

$$H = H_0 + \lambda x^4 \quad (7.15)$$

και τα στοιχεία του πίνακα:

$$H_{nm} \equiv \langle n| H |m\rangle = \langle n| H_0 |m\rangle + \lambda\langle n| x^4 |m\rangle \quad (7.16)$$

$$= (n+\frac{1}{2})\delta_{n,m} + \lambda(x^4)_{nm} \quad (7.17)$$

όπου το $(x^4)_{nm}$ μπορούμε να υπολογίσουμε από τη σχέση (7.12) :

$$(x^4)_{nm} = \sum_{i_1,i_2,i_3=0}^{\infty} x_{ni_1}x_{i_1i_2}x_{i_2i_3}x_{i_3m}\,. \quad (7.18)$$

Το πρόβλημα ανάγεται στον υπολογισμό των ιδιοτιμών του πίνακα H_{nm}.

7.2 Υπολογισμός Ιδιοτιμών H_{nm}

Αρχικά επιλέγουμε το μέγεθος της βάσης/πινάκων, έστω N. Χρησιμοποιούμε τις σχέσεις που αναφέραμε στην προηγούμενη παράγραφο για να υπολογίσουμε τους πίνακες x, H_0, H. Για παράδειγμα, όταν $N = 4$ έχουμε:

$$x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (7.19)$$

$$H_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} \end{pmatrix} \tag{7.20}$$

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+\frac{3\lambda}{4} & 0 & \frac{3\lambda}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}+\frac{15\lambda}{4} & 0 & 3\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda \\ \frac{3\lambda}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{5}{2}+\frac{27\lambda}{4} & 0 \\ 0 & 3\sqrt{\frac{3}{2}}\lambda & 0 & \frac{7}{2}+\frac{15\lambda}{4} \end{pmatrix} \tag{7.21}$$

Σκοπός μας είναι να γράψουμε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει τις ιδιοτιμές $E_n(\lambda)$. Για το λόγο αυτό είναι αναγκαίο ο αναγνώστης να ανατρέξει στο 5ο και 6ο κεφάλαιο των σημείωσεων. Αντί όμως να γράψουμε τον δικό μας κώδικα για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων των πινάκων που μας ενδιαφέρουν θα χρησιμοποιήσουμε τις έτοιμες ρουτίνες που υπάρχουν στη βιβλιοθήκη LAPACK. Η βιβλιοθήκη αυτή υπάρχει στον δικτυακό τόπο `http://www.netlib.org/lapack/` και λεπτομέρειες για τη χρήση της μπορούν να βρεθούν στο `http://www.netlib.org/lapack`. Επισκευτήτε το δικτυακό τόπο και αναζητήστε ρουτίνες που σας ενδιαφέρουν.

Ως απλοί άπειροι χρήστες, θα αναζητήσουμε "ρουτίνες οδηγούς" (driver routines) που κάνουν μια δουλειά ολοκληρωμένα. Εχουμε να διαγωνιποιήσουμε πίνακα συμμετρικό και διαλέγουμε την ρουτίνα DSYEV (D = double precision, SY = symmetric, EV = eigenvalues with optional eigenvectors). Οι συναρτήσεις της LAPACK έχουν βοήθεια online από τα man pages του συστήματος (Unix/Linux). Η εντολή που δίνουμε είναι η

```
man dsyev
```

Από εκεί μαθαίνουμε ότι η χρήση της είναι:

```
 SUBROUTINE DSYEV( JOBZ, UPLO, N, A, LDA, W, WORK, LWORK, INFO )
           CHARACTER      JOBZ, UPLO
           INTEGER        INFO, LDA, LWORK, N
          DOUBLE         PRECISION A( LDA, * ), W( * ), WORK( * )

 ARGUMENTS
   JOBZ    (input) CHARACTER*1
           = 'N':  Compute eigenvalues only;
           = 'V':  Compute eigenvalues and eigenvectors.

   UPLO    (input) CHARACTER*1
```

```
          = 'U':  Upper triangle of A is stored;
          = 'L':  Lower triangle of A is stored.

 N        (input) INTEGER
          The order of the matrix A.  N >= 0.

 A      (input/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (LDA, N)
       On entry, the symmetric matrix A. If UPLO = 'U', the leading
       N-by-N upper triangular part of A contains the upper triangular
       part of the matrix A. If UPLO = 'L', the leading N-by-N lower
       triangular part of A contains the lower triangular part of the
       matrix A. On exit, if JOBZ = 'V', then if INFO = 0, A contains
       the orthonormal eigenvectors of the matrix A. If JOBZ = 'N',
       then on exit the lower triangle (if UPLO='L') or the upper tri-
       angle (if UPLO='U') of A, including the diagonal, is destroyed.
 LDA      (input) INTEGER
         The leading dimension of the array A.  LDA >= max(1,N).

 W        (output) DOUBLE PRECISION array, dimension (N)
          If INFO = 0, the eigenvalues in ascending order.

WORK    (workspace/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (LWORK)
         On exit, if INFO = 0, WORK(1) returns the optimal LWORK.

 LWORK    (input) INTEGER
      The length of the array WORK. LWORK >= max(1,3*N-1). For
      optimal efficiency, LWORK >= (NB+2)*N, where NB is the block-
          size for DSYTRD returned by ILAENV.

      If LWORK = -1, then a workspace query is assumed; the routine
      only calculates the optimal size of the WORK array, returns
      this value as the first entry of the WORK array, and no error
          message related to LWORK is issued by XERBLA.

 INFO     (output) INTEGER
          = 0:  successful exit
       < 0:  if INFO = -i, the i-th argument had an illegal value
      > 0:  if INFO = i, the algorithm failed to converge; i off-
      diagonal elements of an intermediate tridiagonal form did not
          converge to zero.
```

Οδηγούμαστε λοιπόν στο να γράψουμε τον εξής κώδικα για να δοκιμάσουμε τη χρήση της σε ένα πίνακα A(N,N):

```
      PROGRAM TEST_EVS
      IMPLICIT NONE
      INTEGER P,LWORK ! P= megisth diastash pinaka
      PARAMETER(P=100,LWORK=3*P-1)
      DOUBLE PRECISION A(P,P),W(P),WORK(LWORK)

     INTEGER N  !the dimension of the **used** part of the matrix A(N,N)
      INTEGER I,J
      CHARACTER *1,JOBZ,UPLO
      INTEGER LDA,INFO

C     Orizoume ton **symmetriko** pinaka pou 0a diagwniopoihsoume.
C     H routina xrhsimopoiei mono to anw trigwniko meros tou (UPLO='U')
C      opote to katw trigwniko den xreiazetai na oristei.
      N=4
      A(1,1)=-7.7
      A(1,2)= 2.1
      A(1,3)=-3.7
      A(1,4)= 4.4
      A(2,2)= 8.3
      A(2,3)=-16.
      A(2,4)= 4.6
      A(3,3)=-12.
      A(3,4)=-1.04
      A(4,4)=-3.7
C     Ton Typwnoume gia elegxo: (prin na kalesoume th routina giati
C      meta katastrefetai!!)
      DO I=1,N
       DO J=i,N
        PRINT *,'A( ',I,' , ',J,' )=',A(I,J)
       ENDDO
      ENDDO
C      Orizoume na ypologistoun kai ta idiodianysmata:
      JOBZ='V'
      UPLO='U'
      PRINT *,'COMPUTING WITH DSYEV:'
      LDA=P                      !notice that LDA-> P>N !!
      CALL DSYEV(JOBZ,UPLO,N,A,LDA,W,WORK,LWORK,INFO)
```

```
      PRINT *,'DSYEV: DONE. CHECKING NOW:'
C     An to INFO den einai 0 tote exoyme sfalma:
      IF(INFO .NE. 0)THEN
       PRINT *,'DSYEV FAILED. INFO= ',INFO
       STOP
      ENDIF
C     Typwnoume ta apotelesmata, W(I) exei tis idiotimes:
      PRINT *,'DSYEV: DONE.:'
      PRINT *,'EIGENVALUES OF MATRIX:'
      DO I=1,N
       PRINT *,'LAMBDA(',I,')=',W(I)
      ENDDO
C     O pinakas A exei ta idiodianysmata **stis sthles tou**:
C    (giati h fortran "trexei" ton mesa deikth grhgorotera anti0eta
C     apo thn C...)
      PRINT *,'EIGENVECTORS OF MATRIX'
      DO J=1,N
       PRINT*,'EIGENVECTOR ',J,' FOR EIGENVALUE ',W(J)
       DO I=1,N
        PRINT*,'V_',J,'(',I,')= ',A(I,J)
       ENDDO
      ENDDO
      END
```

Το επόμενο βήμα είναι να μεταγλωττίσουμε τον κώδικα. Το σημείο που πρέπει να προσέξουμε είναι ότι στο στάδιο της σύνδεσης (linking) πρέπει να δώσουμε οδηγίες στον loader ld πού βρίσκονται οι βιβλιοθήκες LAPACK και η BLAS (η βασικές υπολογιστικές ρουτίνας γραμμικής άλγεβρας είναι στην BLAS). Ολες οι συναρτήσεις είναι μεταγλωττισμένες και τα object files τους είναι αρχειοθετημένα στα αρχεία `lib`**lapack**`.a` `lib`**blas**`.a` που μπορούμε να αναζητήσουμε με τις εντολές:

```
locate libblas
locate liblapack
```

Για να δούμε τα περιεχόμενά τους δίνουμε τις εντολές:

```
ar -t /usr/lib/libblas.a
ar -t /usr/lib/liblapack.a
```

(ή αντικαθιστούμε το `/usr/lib` με τη διαδρομή που αντιστοιχεί στο σύστημά μας). Αν ο κώδικάς μας είναι στο αρχείο `test.f` για τη μεταγλώττιση δίνουμε την εντολή:

```
f77 test.f -o test -L/usr/lib -llapack -lblas
```

Η επιλογή `-L/usr/lib` λέει στον loader να αναζητήσει τις βιβλιοθήκες στο `/usr/lib` (άχρηστο στην περίπτωσή μας γιατί το ψάχνει έτσι και αλλιώς, χρήσιμο αν έχουμε βιβλιοθήκες σε μη συμβατικά μέρη) ενώ οι `-llapack -lblas` του λένε να ζητήσει όποια σύμβολα δεν έχουν ξεκαθαριστεί πρώτα στη βιβλιοθήκη `lib`**lapack**`.a` και μετά στην `lib`**blas**`.a`

Η παραπάνω εντολή έχει ως αποτέλεσμα το εκτελέσιμο αρχείο test που όταν το τρέξουμε παίρνουμε το αποτέλεσμα:

```
 EIGENVALUES OF MATRIX:
 LAMBDA( 1)= -21.4119907
 LAMBDA( 2)= -9.93394359
 LAMBDA( 3)= -2.55765591
 LAMBDA( 4)=  18.8035905
 EIGENVECTORS OF MATRIX
 EIGENVECTOR  1 FOR EIGENVALUE  -21.4119907
 V_ 1( 1)=  -0.197845668
 V_ 1( 2)=  -0.464798676
 V_ 1( 3)=  -0.854691009
 V_ 1( 4)=   0.119676904
 EIGENVECTOR  2 FOR EIGENVALUE  -9.93394359
 V_ 2( 1)=   0.824412399
 V_ 2( 2)=  -0.132429396
 V_ 2( 3)=  -0.191076519
 V_ 2( 4)=  -0.516039161
 EIGENVECTOR  3 FOR EIGENVALUE  -2.55765591
 V_ 3( 1)=   0.502684215
 V_ 3( 2)=  -0.247784372
 V_ 3( 3)=   0.132853329
 V_ 3( 4)=   0.817472616
 EIGENVECTOR  4 FOR EIGENVALUE   18.8035905
 V_ 4( 1)=   0.168848655
 V_ 4( 2)=   0.839659187
 V_ 4( 3)=  -0.464050682
 V_ 4( 4)=   0.226096318
```

Τώρα είμαστε έτοιμοι να λύσουμε το πρόβλημα του αναρμονικού ταλαντωτή. Το πρόγραμμα βρίσκεται στην ιστοσελίδα του μαθήματος `www.physics.ntua.gr/ph36/Lectures/15/anharmonic.f` από όπου μπορείτε να το κατεβάσετε. Στην κύρια ρουτίνα του προγράμματος ο χρήστης εισάγει τις βασικές παραμέτρους, τη διάσταση του χώρου Hilbert

DIM και τις τιμές του λ για τις οποίες επιθυμεί να υπολογιστούν οι ιδιοτιμές του τελεστή $H(\lambda)$. Οι τελευταίες ορίζονται από τις μεταβλητές lambda0, lambdaf, dlambda που αντιστοιχουν στις μέγιστες και ελάχιστες τιμές λ_{min}, λ_{max} και το βήμα $\delta\lambda$ αντίστοιχα (**Ερώτηση**: Στο πρόγραμμα που δίνεται παρακάτω, θα συμπεριλαμβάνεται το λ_{max} στις τιμές που γίνεται ο υπολογισμός ή οχι;). Το πρόγραμμα καλεί την υπορουτίνα calculate_X4 για να υπολογίσει τον πίνακα $(x^4)_{nm}$ του τελεστή x^4 στην $\{|\rangle\}$ αναπαράσταση. Ο υπολογισμός στην υπορουτίνα αυτή είναι ακριβή και μπορεί να γίνει πολύ γρηγορότερα υπολογίζοντας εύκολα τα $(x^4)_{nm}$ αναλυτικά. Αυτό αφήνεται σαν άσκηση στον αναγνώστη. Ο υπολογισμός γίνεται μία φορά αφού ο πίνακας είναι αναξάρτητος του λ. Στη συνέχεια για κάθε τιμή του λ υπολογίζονται οι ιδιοτιμές του $H(\lambda)$ καλώντας την υπορουτίνα calculate_evs και τα αποτελέσματα τυπώνονται στο stdout (standard output).

Η υπορουτίνα calculate_evs καλεί την calculate_H να υπολογίσει τον πίνακα $H(\lambda)_{nm}$ η οποία κάνει χρήση των σχέσεων (7.16) . Στη συνέχεια καλείται η DSYEV της LAPACK να κάνει τη διαγωνιοποίηση. Προσέχουμε στο όρισμα LDA της DSYEV να βάλουμε τη σωστή διάσταση του πίνακα H που είναι P και όχι DIM. Στη συνέχεια παρατίθεται ο κώδικας:

```
      program anharmonic_elevels
      implicit none
      integer P,LWORK
      parameter(P=1000,LWORK=3*P-1)
    double precision H (P,P),X(P,P) !telestes: Hamiltonian,Position
      double precision X4(P,P)        !telesths: X^4
      double precision E(P)           !energeiakes idiotimes
    double precision WORK(LWORK)   !boh0htikos xwros ergasias LAPACK
      double precision lambda,lambda0,lambdaf,dlambda
      integer DIM
      integer i

C     O xrhsths ka0orizei to mege0os ths bashs:
      print *,'Enter Hilbert Space dimension:'
      read(5,*)DIM
C     O Xrhsths dinei elaxisth/megisth timh sto lambda kai bhma
C     ypologismou:
      print *,'Enter lambda0,lambdaf,dlambda:'
      read(5,*)lambda0,lambdaf,dlambda
      print *,'lambda0= ',lambda0
C     Print Message:
```

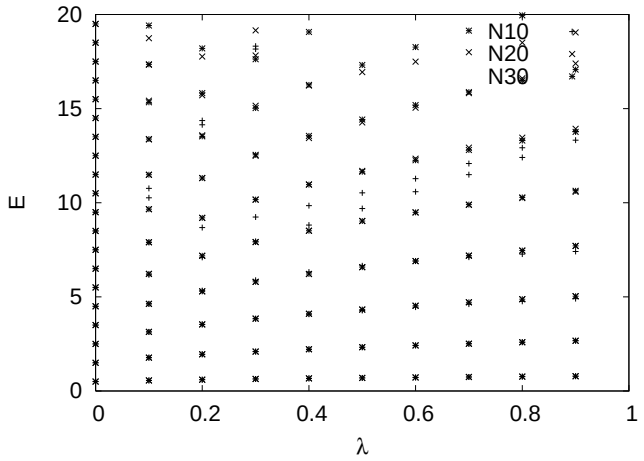
```
      print *,'# ######################################################'
      print *,'# Calculation of energy levels of anharmonic oscillator'
        print *,'# using matrix methods.'
        print *,'# Hilbert Space Dimension = ',DIM
        print *,'# lambda coupling = ',lambda0,' - ',lambdaf,
     *     ' step= ',dlambda
      print *,'# ######################################################'
        print *,'# Outpout: lambda E_0 E_1 .... E_{N-1}'
      print *,'# ------------------------------------------------------'

C     Ypologizoume ton telesth X^4:
      call calculate_X4(X,X4,DIM)
C     Kai twra tis idiotimes synarthsei toy lambda:
      do lambda=lambda0,lambdaf,dlambda
       call calculate_evs(H,X4,E,WORK,lambda,DIM)
C     Prosexte to format gia na mhn typwnontai oi idiotimes se
C     diaforetikh grammh an to N einai megalo
       write(6,100)'EV ',lambda,(E(i),i=1,DIM)
      enddo
 100  FORMAT(A3,1000G25.15)
      end


      subroutine calculate_evs(H,X4,E,WORK,lambda,DIM)
      implicit none
      integer P,LWORK
      parameter(P=1000,LWORK=3*P-1)
     double precision H(P,P)      !telestes: Hamiltonian,Position
      double precision X4(P,P)       !telesths: X^4
      double precision E(P)          !energeiakes idiotimes
     double precision WORK(LWORK)  !boh0htikos xwros ergasias LAPACK
      integer DIM
      double precision lambda

      character *1,JOBZ,UPLO
      integer LDA,INFO,i,j

      call calculate_H(H,X4,lambda,DIM)
      JOBZ='V'
      UPLO='U'
      call dsyev(JOBZ,UPLO,DIM,H,P,E,WORK,LWORK,INFO)
```

```
     print *,'# ********************** EVEC ******************'
      do j=1,DIM
       write(6,101)'# EVEC ',lambda,(H(i,j), i=1,DIM)
      enddo
     print *,'# ********************** EVEC ******************'
 101  FORMAT(A7,F6.4,1000G14.6)

C     An to INFO den einai 0 tote exoyme sfalma:
      if(INFO .ne. 0)then
       print *,'dsyev failed. INFO= ',INFO
       stop
      endif

      end

      subroutine calculate_H(H,X4,lambda,DIM)
      implicit none
      integer P,LWORK
      parameter(P=1000,LWORK=3*P-1)
    double precision H(P,P)      !telestes: Hamiltonian,Position
      double precision X4(P,P)       !telesths: X^4
      integer DIM
      double precision lambda

      integer i,j,n,m

      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        H(i,j)=lambda*X4(i,j)
       enddo
     H(j,j) = H(j,j) + DBLE(j) - 0.5D0  !E_n=n+1/2,n=j-1 => E_n=j-1/2
      enddo

      print *,'# ********************** H ******************'
      do j=1,DIM
       write(6,102)'# HH ',(H(i,j), i=1,DIM)
      enddo
      print *,'# ********************** H ******************'

 102  FORMAT(A5,1000G14.6)
      end
```

```
      subroutine  calculate_X4(X,X4,DIM)
      implicit none
      integer P
      parameter(P=1000)
      double precision X(P,P),X4(P,P)       !telesths: X, X^4
      integer DIM

      integer i,j,m,n,i1,i2,i3
      double precision isqrt2 ! 1/sqrt(2)
      parameter(isqrt2=0.70710678118654752440D0)
C     Arxika ypologizoume ton telesth 0eshs:
      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        X (i,j)=0.0D0
        X4(i,j)=0.0D0
       enddo
      enddo
C     Kai twra ta mh mhdenika stoixeia:
      do i=1,DIM
       n=i-1 !deiktes 0,...,DIM-1
C      O oros delta_{n,m+1}, dhladh m=n-1
       m=n-1 !to energeiako epipedo n -> i=n+1, m-> j=m+1
       j=m+1
       if(j.ge.1) X(i,j)=isqrt2*dsqrt(DBLE(m+1))
C      O oros delta_{n,m-1}, dhladh m=n+1
       m=n+1
       j=m+1
       X(i,j)=isqrt2*dsqrt(DBLE(m))
      enddo

C     Kai twra ypologizoume ton telesth H:
C     Arxizoume me ton oro X^4:
      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        do i1=1,DIM
         do i2=1,DIM
          do i3=1,DIM
           X4(i,j)=X4(i,j)+X(i,i1)*X(i1,i2)*X(i2,i3)*X(i3,j)
          enddo
         enddo
```

```
          enddo
         enddo
        enddo
C   Parathrhsh: Xanoume adiko xrono gia ton ypologismo toy X4 giati
C   ta perissotera stoixeia tou einai 0. Efoson o analytikos ypologismos
C   einai eykolos, systhnetai na ginei kai na ypologizontai mono ta
C    mh mhdenika stoixeia!! (na ginei san askhsh)
      end
```

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε ένα υπολογισμό για $N = 10,\ 20,\ 30$. Στο σχήμα φαίνεται καλά ότι οι 3 πρώτες ενεργειακές στάθμες έχουν συγκλίνει καλά για τις τιμές αυτές. Επίσης γίνεται φανερό ότι αποκλίσεις παρουσιάζονται για μεγάλες τιμές του λ και του N.



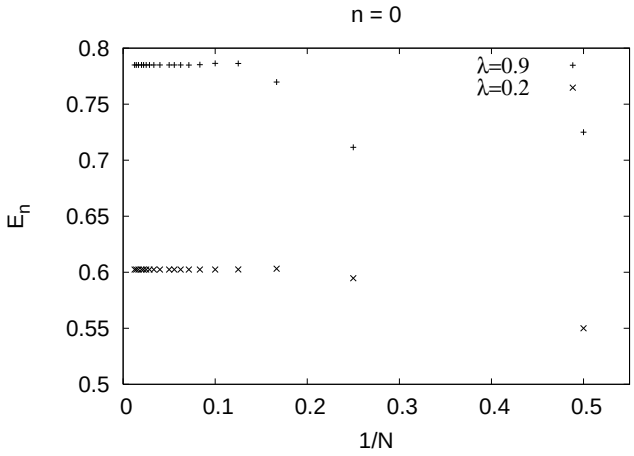
Σχήμα 7.1: Οι πρώτες 12 ενεργειακές στάθμες του αναρμονικού ταλαντωτή για τιμές του $0 \leq \lambda < 1$ για $N = 10, 20, 30$.

Η σύγκλιση μιάς συγκεκριμένης ιδιοτιμής E_n καθώς $N \to \infty$ για κάποια τιμή του λ φαίνεται στα παρακάτω σχήματα όπου φαίνεται ότι η σύγκλιση είναι γρήγορη για μικρά λ και n ενώ αργή για μεγάλα.

7.3 Το Διπλό Πηγάδι Δυναμικού

Θα χρησιμοποιήσουμε τις μεθόδους πινάκων που αναφέραμε για να υπολογίσουμε τα ενεργειακά επίπεδα σωματιδίου μέσα στο διπλό πηγάδι δυναμικού. Αυτό δίνεται από τη Χαμιλτονιανή:

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{x^2}{2} + \lambda \frac{x^4}{4} \tag{7.22}$$



Σχήμα 7.2: Η ενεργειακή στάθμη E_0 για $\lambda = 0.2, 0.9$ σαν συνάρτηση της (αντίστροφης) διάστασης του χώρου Hilbert $1/$ Σύγκλιση επιτυγχάνεται για μικρές τιμές του N ενώ φαίνεται ότι για λ=0.2 γίνεται ελαφρά γρηγορότερα από ότι για λ=0.9.

και τα σημεία ισορροπίας στην κλασσική κίνηση βρίσκονται στα ελάχιστα:

$$x_0 = \pm\frac{1}{\sqrt{\lambda}}, V_{min} = -\frac{1}{4\lambda} \tag{7.23}$$

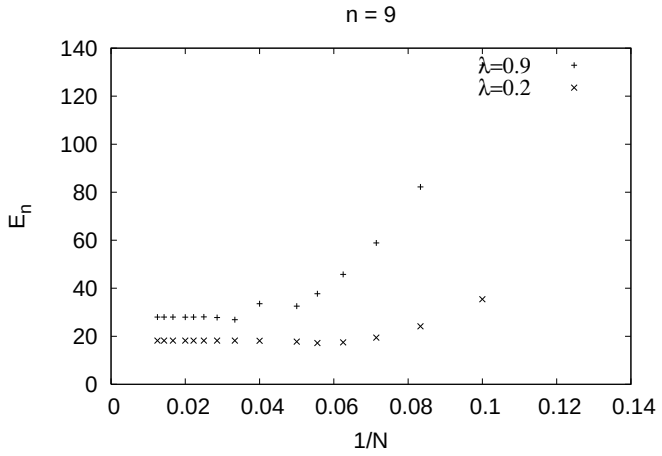
Οταν το πηγάδι είναι πολύ βαθύ τότε για τις χαμηλότερες στάθμες μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το δυναμικό προσεγγίζεται καλά από αυτό του αρμονικού ταλαντωτή με συχνότητα $\omega^2 = V''(x_0)$ οπότε

$$E_{min} \approx V_{min} + \frac{1}{2}\omega \tag{7.24}$$

Στην περίπτωση αυτή το φαινόμενο σύραγγας είναι πολύ ασθενές με αποτέλεσμα τα ενεργειακά επίπεδα να χωρίζονται ελαφρά μεταξύ τους ανά ζεύγη. Αυτό γίνεται γιατί οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις είναι συμμετρικοί και αντισυμμετρικοί συνδυασμοί κυματοσυναρτήσεων που αντιστοιχούν σε καταστάσεις εντοπισμένες στο αριστερό ή δεξιό ελάχιστο της δυναμικής ενέργειας. Π.χ. για τα δύο χαμηλότερα ενεργειακό επίπεδα περιμένουμε ότι

$$E_{0,1} = E_{min} \pm \frac{\Delta}{2} \tag{7.25}$$

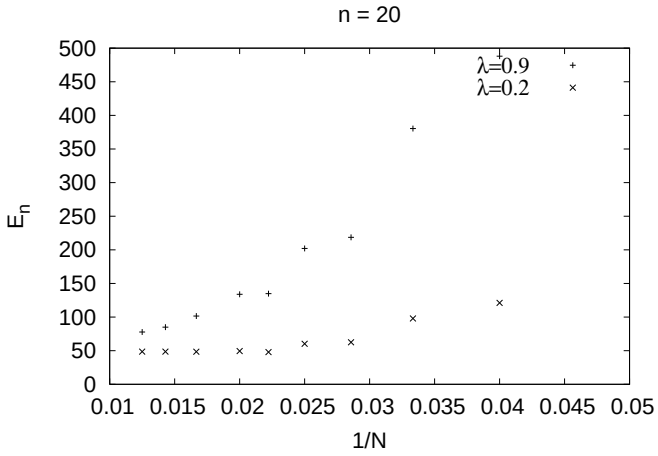
όπου $\Delta \ll |E_{min}|$.



Σχήμα 7.3: Η ενεργειακή στάθμη E_9 για $\lambda = 0.2, 0.9$ σαν συνάρτηση της (αντίστροφης) διάστασης του χώρου Hilbert $1/$.

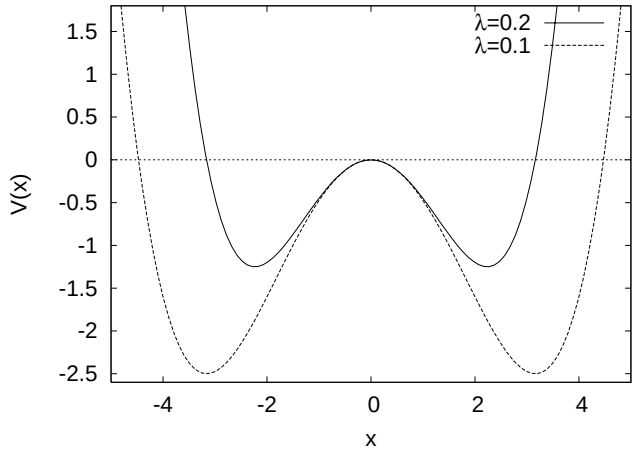
Ως βάση για τον υπολογισμό της Χαμιλτονιανής (7.22) θα χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις (7.12) . Οι απαραίτητες μεταβολές στον κώδικα μας είναι ελάχιστες. Απλά θα προσθέσουμε μία ρουτίνα που να υπολογίζει τους πίνακες p_{nm}. Παίρνουμε έτσι τον κώδικα που αποθηκεύουμε στο αρχείο `doublewell.f`:

```
      program doublewell_elevels
      implicit none
      integer P,LWORK
      parameter(P=1000,LWORK=3*P-1)
     double precision H (P,P),X(P,P) !telestes: Hamiltonian,Position
      double precision X4(P,P)        !telesths: X^4
      double precision X2(P,P)        !telesths: X^2
      double precision iP(P,P),P2(P,P)!telestes: i P, P^2
     double precision H0(P,P)      !telesths: H_0=1/2 P^2-1/2 X^2
      double precision E(P)           !energeiakes idiotimes
     double precision WORK(LWORK)   !boh0htikos xwros ergasias LAPACK
      double precision lambda,lambda0,lambdaf,dlambda
      integer DIM0,DIMF,dDIM,DIM
      integer i

C     O xrhsths ka0orizei to mege0os ths bashs:
      print *,'Enter Hilbert Space dimensions (DIM0,DIMF,DDIM):'
      read(5,*)DIM0,DIMF,DDIM
C     O Xrhsths dinei elaxisth/megisth timh sto lambda kai bhma
```



Σχήμα 7.4: Η ενεργειακή στάθμη E_{20} για $\lambda = 0.2, 0.9$ σαν συνάρτηση της (αντίστροφης) διάστασης του χώρου Hilbert $1/$. Η σύγκλιση δεν έχει επιτευχθεί για τις προβαλλόμενες τιμές του N με την ακρίβεια των παραπάνω σχημάτων.

```
C     ypologismou:
      print *,'Enter lambda0,lambdaf,dlambda:'
      read(5,*)lambda0,lambdaf,dlambda
      print *,'lambda0= ',lambda0
C     Print Message:
    print *,'# ##########################################################'
    print *,'# Calculation of energy levels of double well potential'
      print *,'# using matrix methods.'
      print *,'# Hilbert Space Dimensions = ',DIM0,' - ',DIMF,
     $     ' step= ',dDIM
      print *,'# lambda coupling = ',lambda0,' - ',lambdaf,
     $     ' step= ',dlambda
    print *,'# ##########################################################'
      print *,'# Outpout: DIM lambda E_0 E_1 .... E_{N-1}'
    print *,'# ----------------------------------------------------------'

      do DIM=DIM0,DIMF,dDIM
C     Ypologizoume telestes:
       call calculate_operators(X,X2,X4,iP,P2,H0,DIM)
C     Ypologizoume thn Hamiltonian H_0 xwris oro X^4
C     Kai twra tis idiotimes synarthsei toy lambda:
       do lambda=lambda0,lambdaf,dlambda
```



Σχήμα 7.5: Η δυναμική ενέργεια $V(x)$ για $\lambda = 0.1, 0.2$.

```
        call calculate_evs(H,H0,X4,E,WORK,lambda,DIM)
C     Prosexte to format gia na mhn typwnontai oi idiotimes se
C     diaforetikh grammh an to N einai megalo
        write(6,100)'EV ',DIM,lambda,(E(i),i=1,DIM)
       enddo
      enddo
 100  FORMAT(A3,I5,1000G25.15)
      end


      subroutine calculate_evs(H,H0,X4,E,WORK,lambda,DIM)
      implicit none
      integer P,LWORK
      parameter(P=1000,LWORK=3*P-1)
     double precision H(P,P)      !telestes: Hamiltonian,Position
      double precision X4(P,P)        !telesths: X^4
     double precision H0(P,P)      !telesths: H_0=1/2 P^2-1/2 X^2
      double precision E(P)           !energeiakes idiotimes
    double precision WORK(LWORK)  !boh0htikos xwros ergasias LAPACK
      integer DIM
      double precision lambda

      character *1,JOBZ,UPLO
      integer LDA,INFO,i,j
```

```
      call calculate_H(H,H0,X4,lambda,DIM)
      JOBZ='V'
      UPLO='U'
      call dsyev(JOBZ,UPLO,DIM,H,P,E,WORK,LWORK,INFO)
     print *,'# ********************** EVEC ******************'
      do j=1,DIM
       write(6,101)'# EVEC ',DIM,lambda,(H(i,j), i=1,DIM)
      enddo
     print *,'# ********************** EVEC ******************'
 101  FORMAT(A7,I5,F8.4,1000G14.6)

C     An to INFO den einai 0 tote exoyme sfalma:
      if(INFO .ne. 0)then
       print *,'dsyev failed. INFO= ',INFO
       stop
      endif

      end

      subroutine calculate_H(H,H0,X4,lambda,DIM)
      implicit none
      integer P,LWORK
      parameter(P=1000,LWORK=3*P-1)
     double precision H(P,P)      !telestes: Hamiltonian,Position
     double precision H0(P,P)      !telesths: H_0=1/2 P^2-1/2 X^2
      double precision X4(P,P)        !telesths: X^4
      integer DIM
      double precision lambda

      integer i,j,n,m

      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        H(i,j)=H0(i,j)+0.25D0*lambda*X4(i,j)
       enddo
      enddo

      print *,'# ********************** H ******************'
      do j=1,DIM
       write(6,102)'# HH ',(H(i,j), i=1,DIM)
      enddo
```

```
      print *,'# ********************* H ******************'

 102  FORMAT(A5,1000G14.6)
      end

      subroutine  calculate_operators(X,X2,X4,iP,P2,H0,DIM)
      implicit none
      integer P
      parameter(P=1000)
      double precision X(P,P),X4(P,P)       !telesths: X, X^4
      double precision X2(P,P)        !telesths: X^2
      double precision iP(P,P),P2(P,P)!telestes: i P, P^2
     double precision H0(P,P)      !telesths: H_0=1/2 P^2-1/2 X^2
      integer DIM

      integer i,j,m,n,i1
      double precision isqrt2 ! 1/sqrt(2)
      parameter(isqrt2=0.70710678118654752440D0)
C     Arxika ypologizoume ton telesth 0eshs,i*ormhs:
      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        X (i,j)=0.0D0
        X4(i,j)=0.0D0
        X2(i,j)=0.0D0
        iP(i,j)=0.0D0
        P2(i,j)=0.0D0
       enddo
      enddo
C     Kai twra ta mh mhdenika stoixeia:
      do i=1,DIM
       n=i-1 !deiktes 0,...,DIM-1
C      O oros delta_{n,m+1}, dhladh m=n-1
       m=n-1 !to energeiako epipedo n -> i=n+1, m-> j=m+1
       j=m+1
       if(j.ge.1) X (i,j) =  isqrt2*dsqrt(DBLE(m+1))
       if(j.ge.1) iP(i,j) =  isqrt2*dsqrt(DBLE(m+1))
C      O oros delta_{n,m-1}, dhladh m=n+1
       m=n+1
       j=m+1
       X (i,j) =  isqrt2*dsqrt(DBLE(m))
       iP(i,j) = -isqrt2*dsqrt(DBLE(m))
```

```
      enddo

      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        do i1=1,DIM
         X2(i,j)=X2(i,j)+ X(i,i1)* X(i1,j)
         P2(i,j)=P2(i,j)-iP(i,i1)*iP(i1,j)
        enddo
       enddo
      enddo
C     o oros X^4:
      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        do i1=1,DIM
         X4(i,j)=X4(i,j)+X2(i,i1)*X2(i1,j)
        enddo
       enddo
      enddo
C     kai h hamiltonianh:
      do j=1,DIM
       do i=1,DIM
        H0(i,j)=0.5D0*( P2(i,j)-X2(i,j) )
       enddo
      enddo

C   Parathrhsh: Xanoume adiko xrono gia ton ypologismo toy X4,P4 giati
C   ta perissotera stoixeia tou einai 0. Efoson o analytikos ypologismos
C   einai eykolos, systhnetai na ginei kai na ypologizontai mono ta
C    mh mhdenika stoixeia!! (na ginei san askhsh)
      end
```

7.4 Ασκήσεις

7.1 Υπολογίστε αναλυτικά τον πίνακα $H(\lambda)$ για $= 2, 3$. Υπολογίστε τις ιδιοτιμές για $N = 2$. Συγκρίνετε με τις τιμές που υπολογίζει το πρόγραμμά σας ως επιβεβαίωση ότι τρέχει σωστά.

7.2 Αλλάξτε τη σειρά `-llapack -lblas` σε `-lblas -llapack` στην εντολή μεταγλώττισης. Τι παρατηρήτε; Γιατί;

7.3 Μεταβάλλετε τον κώδικα `test.f` έτσι ώστε να επιβεβαιώνει ότι τα ιδιοδιανύσματα ικανοποιούν τις σχέσεις $\mathbf{A}\,\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$ και ότι αποτελούν ορθοκανονική βάση $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$.

7.4 Υπολογίστε τον πίνακα του τελεστή x^4 αναλυτικά και προγραμματίστε τον στο πρόγραμμα σας. Συγκρίνετε τους χρόνους που τρέχει το πρόγραμμά σας σε σχέση με πριν σαν συνάρτηση του N. Τι συμπεραίνετε;

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8

Χρονοανεξάρτητη Εξίσωση Schrödinger

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μελέτη της χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger για ένα μη σχετικιστικό σωμάτιο μάζας m χωρίς σπιν που κινείται σε μία διάσταση υπό την επίδραση ενός στατικού δυναμικού πεδίου που δίνεται από τη συνάρτηση δυναμικής ενέργειας ("δυναμικού") $V(x)$. Θα περιοριστούμε σε δέσμιες καταστάσεις. Οι λύσεις της εξίσωσης στην περίπτωση αυτή δίνουν το διακριτό ενεργειακό φάσμα $\{E_n\}$ καθώς και τις αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις που δίνονται, σε αναπαράσταση θέσης, από τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(x)$. Η εξίσωση που ικανοποιούν είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)\,, \tag{8.1}$$

μαζί με τη συνθήκη κανονικοποίησης

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)\,dx = 1\,. \tag{8.2}$$

Θυμίζουμε ότι ο τελεστής $\hat{H}$ που σε αναπαράσταση θέσης δίνεται από

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}) \tag{8.3}$$

είναι ερμιτιανός ($\hat{H}^\dagger = \hat{H}$) και η εξίσωση (8.1) είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)\,, \tag{8.4}$$

η οποία έχει λύσεις ένα διακριτό σύνολο από *πραγματικές* συναρτήσεις $\psi_n^*(x) = \psi_n(x)$ τέτοιες ώστε $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$. Οι αριθμοί $E_0 \leq$

$E_1 \leq E_2 \leq \ldots$ είναι πραγματικοί και αποτελούν το ενεργειακό φάσμα του σωματιδίου στο πεδίο $V(x)$. Η ελάχιστη ενέργεια E_0 αντιστοιχεί στη θεμελιώδη κατάσταση που βρίσκεται το σωματίδιο που δίνεται από μία μη τετριμμένη συνάρτηση $\psi_0(x)$. Σε συμφωνία με την αρχή απροσδιοριστίας του Heisenberg, στην κατάσταση αυτή $\Delta p > 0$ και $\Delta x > 0$ έτσι ώστε $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$.

Οι ιδιοκαταστάσεις $\psi_n(x)$ αποτελούν μια ορθοκανονική βάση

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_{\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x)\, dx = \delta_{n,m}\,. \tag{8.5}$$

έτσι ώστε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $\phi(x)$ που αντιστοιχεί στην κατάσταση $|\phi\rangle$ να δίνεται από το γραμμικό συνδυασμό

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)\,. \tag{8.6}$$

Οι αριθμοί $c_n = \langle \psi_n | \phi \rangle = \int_{\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\phi(x)\, dx$ δίνουν την πιθανότητα $p_n = |c_n|^2$ να μετρηθεί η ενέργεια E_n στην κατάσταση $|\phi\rangle$.

Επίσης θυμίζουμε ότι για οποιαδήποτε κατάσταση $|\phi\rangle$ η συνάρτηση

$$p_\phi(x) = |\phi(x)|^2 = \phi^*(x)\phi(x) \tag{8.7}$$

είναι η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματιδίου στη θέση x, δηλ. η πιθανότητα εύρεσης του σωματιδίου στο διάστημα $[x_1, x_2]$ δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{P}_\phi(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \phi^*(x)\phi(x)\, dx\,. \tag{8.8}$$

Η σχέση κανονικοποίησης (8.2) σύμφωνα με την παραπάνω ερμηνεία δίνει τη διατήρηση της πιθανότητας (ανεξάρτητη του χρόνου) και την πληρότητα (βεβαιότητα παρατήρησης του σωματιδίου κάπου στον άξονα των x).

Οι μετρήσιμες ποσότητες του παραπάνω κβαντομηχανικού συστήματος δίνονται από τελεστές $\hat{\mathcal{A}}(\hat{x}, \hat{p})$ και οι αναμενόμενες τιμές τους όταν το σύστημα είναι σε μια κατάσταση $|\phi\rangle$ δίνονται από τη σχέση

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_\phi = \langle \phi | \, \hat{\mathcal{A}} \, | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \hat{\mathcal{A}}(\hat{x}, \hat{p}) \phi(x)\, dx\,. \tag{8.9}$$

Από αριθμητικής άποψης, το πρόβλημα ιδιοτιμών (8.1) είναι η λύση μιας διαφορικής εξίσωσης δεύτερης τάξης. Οι διαφορές σε σχέση με τις περιπτώσεις που μελετήσαμε σε προηγούμενα κεφάλαια είναι:

- Αντί να έχουμε πρόβλημα αρχικών τιμών (τιμές της συνάρτησης και παραγώγου σε ένα σημείο) έχουμε πρόβλημα συνοριακών τιμών (τιμές της συνάρτησης ή της παραγώγου σε δύο σημεία).

- Η ιδιοτιμή (ενέργεια) είναι άγνωστη και πρέπει να προσδιοριστεί σα μέρος της λύσης.

Θα παρουσιάσουμε μερικές απλές μεθόδους επίλυσης του προβλήματος, ειδικές στη μία διάσταση, ως μια εισαγωγή στον τρόπο αριθμητικής λύσης ενός προβλήματος με τα παραπάνω χαρακτηριστικά.

Για την αριθμητική λύση της παραπάνω εξίσωσης καταφεύγουμε σε επανακανονικοποίηση των συναρτήσεων και των παραμέτρων τους, έτσι ώστε να έχουμε να κάνουμε με αδιάστατες ποσότητες. Για το λόγο αυτό, η (8.1) γράφεται αρχικά στη μορφή:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0\,. \tag{8.10}$$

Επί πλέον, επιλέγουμε μια χαρακτηριστική κλίμακα μήκους L στο πρόβλημα και επαναορίζουμε $x' = x/L$. Ορίζουμε $\tilde{\psi}(x') = \psi(x)$ $\tilde{\psi}'(x') = d\psi(x)/dx' = L\, d\psi(x)/dx$ και παίρνουμε

$$\tilde{\psi}''(x') + \frac{2mL^2}{\hbar^2}(E - V(x'L))\tilde{\psi}(x') = 0\,. \tag{8.11}$$

Ορίζουμε $v(x') = 2mL^2V(x)/\hbar^2 = 2mL^2V(x'L)/\hbar^2$, $\epsilon = 2mL^2E/\hbar^2$ και αλλάζουμε συμβολισμό $x' \to x$, $\tilde{\psi} \to \psi$ οπότε παίρνουμε

$$\psi''(x) = -(\epsilon - v(x))\psi(x)\,. \tag{8.12}$$

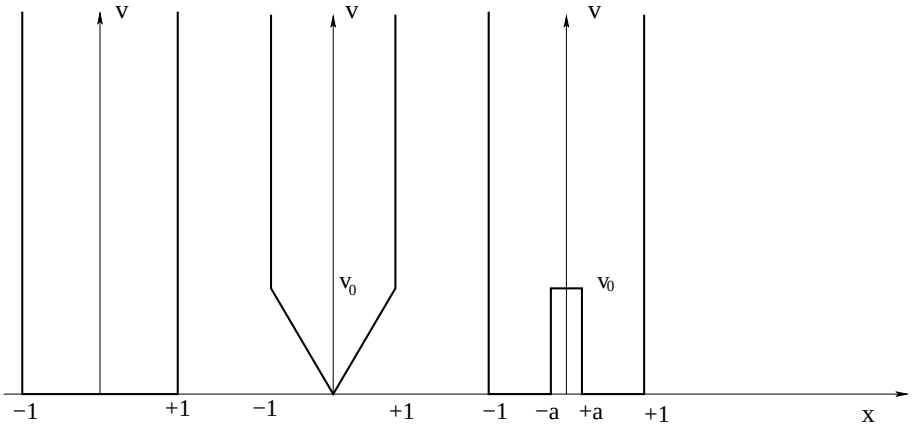
Οι λύσεις της (8.1) παίρνονται εύκολα από τις λύσεις της (8.12) χρησιμοποιώντας το "λεξικό"[1]:

$$x \to \frac{x}{L}\,, \quad E = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\epsilon\,, \quad V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^2}v(x/L)\,. \tag{8.13}$$

Τέλος να σημειώσουμε ότι για την ορμή, αν πάρουμε $p' = -i\hbar\partial/\partial x'$ $= -i\hbar L\partial/\partial x$ θα έχουμε

$$p' = Lp\,. \tag{8.14}$$

[1]Φυσικά αν κανονικοποιήσουμε τις λύσεις $\tilde{\psi}(x')$ της (8.12) σύμφωνα με τη σχέση $\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\psi}^*(x')\tilde{\psi}(x')dx' = 1$, θα πρέπει να πάρουμε και $\psi(x) = (1/\sqrt{L})\tilde{\psi}(x/L)$ για να έχουμε σωστή κανονικοποίηση $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx = 1$.



Σχήμα 8.1: Τα τρία δυναμικά που δίνονται από τις εξισώσεις (8.15) , (8.24) και (8.25) .

8.1 Το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού.

Το απλούστερο πρότυπο για τη μελέτη των ποιοτικών χαρακτηριστικών των δέσμιων καταστάσεων είναι το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού:

$$v(x) = \begin{cases} 0 & |x| < 1 \\ +\infty & |x| \geq 1 \end{cases} \tag{8.15}$$

Φυσικά, σύμφωνα με τα λεγόμενα στο τέλος της προηγούμενης παραγράφου, εδώ έχουμε επιλέξει L να είναι το πλάτος του πηγαδιού και η μεταβλητή x είναι αδιάστατη και αντιστοιχεί στο $x/(L/2)$ όταν το x έχει διαστάσεις μήκους.

Η λύση της (8.12) υπολογίζεται εύκολα. Τα χαρακτηριστικά που πρέπει να τονίσουμε είναι ότι λόγω της *συμμετρίας*

$$v(-x) = v(x)\,, \tag{8.16}$$

του δυναμικού (άρτια συνάρτηση της θέσης), οι λύσεις έχουν συγκεκριμένη *ομοτιμία* (parity), ιδιότητα που θα μας βοηθήσει σημαντικά στην αριθμητική αναζήτηση των λύσεων. Αυτό θα κάνει τη μέθοδο που θα παρουσιάσουμε ειδική για δυναμικά που είναι άρτιες συναρτήσεις της θέσης. Στην επόμενη παράγραφο θα αναπτύξουμε πιο γενική μέθοδο που θα περιλαμβάνει και μη άρτια δυναμικά. Οι λύσεις χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, μία με άρτια ομοτιμία $\psi_n(x) \equiv \psi_n^{(+)}(-x) = \psi_n^{(+)}(x)$ για $n = 1, 3, 5, 7, \ldots$ και μία με περιττή ομοτιμία $\psi_n(x) \equiv -\psi_n^{(-)}(-x)$

$= \psi_n^{(-)}(x)$ για $n = 2, 4, 6, 8, \ldots$.

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \psi_n^{(+)}(x) = \cos\left(\frac{n\pi}{2}x\right) & |x| < 1 \quad n = 1, 3, 5, 7, \ldots \\ \psi_n^{(-)}(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{2}x\right) & |x| < 1 \quad n = 2, 4, 6, 8, \ldots \end{cases} \tag{8.17}$$

όπου

$$\epsilon_n = \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \tag{8.18}$$

και η κανονικοποίηση έχει επιλεγεί έτσι ώστε[2] $\int_{-1}^{1}(\psi_n(x))^2\,dx = 1$.

Οι λύσεις που αναζητάμε είναι δυνατόν να βρεθούνε χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες ομοτιμίας των κυματοσυναρτήσεων. Παρατηρούμε ότι για τις λύσεις θετικής ομοτιμίας

$$\psi_n^{(+)}(0) = A \qquad \psi_n^{(+)\prime}(0) = 0\,, \tag{8.19}$$

ενώ για τις λύσεις αρνητικής ομοτιμίας

$$\psi_n^{(-)}(0) = 0 \qquad \psi_n^{(-)\prime}(0) = A\,. \tag{8.20}$$

Η σταθερά A εξαρτάται από την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης. Άρα μπορούμε να θέσουμε $A = 1$ και στη συνέχεια να επανακανονικοποιήσουμε την κυματοσυνάρτηση έτσι ώστε να ισχύει η (8.2) . Οι σχέσεις (8.19) και (8.20) μπορούν να θεωρηθούν ως οι αρχικές συνθήκες στην (8.12) αν η ενέργεια είναι γνωστή, οπότε με έναν αλγόριθμο της αρεσκείας μας (λ.χ. Runge–Kutta 4ης τάξης) να προωθήσουμε τη λύση προς τα $x = \pm 1$. Φυσικά το πρόβλημα είναι ότι η ενέργεια ϵ δεν είναι γνωστή. Αν η ενέργεια δεν είναι η επιτρεπτή από την κβαντική θεωρία, τότε θα βρούμε ότι παραβιάζονται οι συνοριακές συνθήκες

$$\psi_n^{(\pm)}(\pm 1) = 0\,. \tag{8.21}$$

Όσο πλησιάζουμε τη σωστή ενέργεια, τόσο $\psi_n^{(\pm)}(\pm 1) \to 0$.

Οπότε ακολουθούμε την παρακάτω διαδικασία:

- Επιλέγουμε ενέργεια ϵ η οποία είναι χαμηλότερη από τη ζητούμενη. Αν το δυναμικό δεν είναι απλό τετραγωνικό, χρησιμοποιούμε τις λύσεις ανάλογου τετραγωνικού προβλήματος για την εκτίμηση τάξης μεγέθους ή ξεκινάμε από ενέργεια λίγο μεγαλύτερη από την ελάχιστη δυναμική ενέργεια.

[2]Σύμφωνα με το "λεξικό" που αναφέραμε στο τέλος της προηγούμενης παραγράφου, για πηγάδι δυναμικού όπου $x \in [-L/2, L/2]$ έχουμε επιλέξει ως αδιάστατη μεταβλητή την $x/(L/2) \in [-1, 1]$. Τότε $E_n = \frac{\hbar^2}{2m(L/2)^2}\epsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$ και $\psi_n^{(+)}(x) = \sqrt{2/L}\cos(n\pi x/L)$, $\psi_n^{(-)}(x) = \sqrt{2/L}\sin(n\pi x/L)$. Επίσης παρατηρείστε πως $\epsilon_n = k_n^2$ όπως προκύπτει από τις σχέσεις (8.13) και (8.14) .

- Επιλέγουμε την ομοτιμία της ζητούμενης λύσης και θέτουμε αρχικές συνθήκες σύμφωνα με τις (8.19) και (8.20) .
- Χρησιμοποιούμε τη μέθοδο Runge-Kutta για να εξελίξουμε τη λύση από[3] $x = 0$ σε $x = +1$.
- Αν δεν εκπληρώνεται η (8.21) αυξάνουμε την ενέργεια κατά $\delta\epsilon$ (επιλεγμένη παράμετρος) και επαναλαμβάνουμε.
- Επαναλαμβάνουμε μέχρι η $\psi_n^{(\pm)}(1)$ να αλλάξει πρόσημο. Τότε μειώνουμε την ενέργεια κατά $\delta\epsilon = -\delta\epsilon/2$.
- Η διαδικασία τερματίζεται όταν $|\psi_n^{(\pm)}(1)| < \delta$ για κατάλληλα επιλεγμένο δ.

Για την οργάνωση του κώδικα, αναφέρουμε πρώτα την εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης από $x = 0$ σε $x = 1$ με χρήση της μεθόδου Runge-Kutta 4ης τάξης. Για τα βήματα ολοκλήρωσης χρησιμοποιούμε τον κώδικα από το Κεφάλαιο 3 που βρίσκεται στο αρχείο `rk.f`. Απομονώνουμε μόνο την subroutine `RKSTEP`, που θα βρείτε στο πρόγραμμα της σελίδας 163, και την αποθηκεύουμε σε ένα αρχείο `rk.f`. Για την ολοκλήρωση της (8.12) χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση $\phi(x) \equiv \psi'(x)$ και παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \phi(x) \\ \phi'(x) &= (v(x) - \epsilon)\psi(x)\,, \end{aligned} \tag{8.22}$$

μαζί με τις αρχικές συνθήκες

$$\begin{aligned} &\psi(0) = 1 \quad , \quad \phi(0) = 0 \quad \text{άρτια ομοτιμία} \\ &\psi(0) = 0 \quad , \quad \phi(0) = 1 \quad \text{περιττή ομοτιμία}\,. \end{aligned} \tag{8.23}$$

Χρησιμοποιούμε το συμβολισμό $\psi(x) \to$ `psi`, $\phi(x) \to$ `psip`. Οι συναρτήσεις `f1` και `f2` αντιστοιχούν στο δεξί μέλος της (8.22) , είναι οι παράγωγοι των $\psi(x)$ και $\phi(x)$ αντίστοιχα. Άρα απλά `f1=psip` και `f2=(V-energy)*psi`. Ο προγραμματισμός τους γίνεται σε ξεχωριστό αρχείο, έτσι ώστε να είναι εύκολη η μελέτη και άλλων δυναμικών $v(x)$. Στο αρχείο `wellInfSq.f` προγραμματίζουμε τα παραπάνω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     file: wellInfSq.f
C
```

[3] Από την ομοτιμία της συνάρτησης, συμπεραίνουμε την τιμή της συνάρτησης στο διάστημα $[-1, 0)$.

```
C     Functions used in RKSTEP routine. Here:
C     f1 = psip(x) = psi(x)'
C     f2 = psip(x)'= psi(x)''
C
C     All one has to set is V, the potential
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     -------- trivial function: derivative of psi
      real*8 function f1(x,psi,psip)
      real*8 x,psi,psip
      f1=psip
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     -------- the second derivative of wavefunction:
C     psip(x)' = psi(x)'' = -(E-V) psi(x)
      real*8 function f2(x,psi,psip)
      implicit none
      real*8 x,psi,psip,energy,V
      common /params/energy

C     ------- potential, set here:
      V  = 0.0D0
C     ------- Schroedinger eq: RHS
      f2 = (V-energy)*psi
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

Απλά τονίζουμε πως η ενέργεια $\epsilon =$ energy τοποθετείται σε common block ώστε να μπορούμε να τη μεταβάλλουμε από το κυρίως πρόγραμμα.

Το κυρίως πρόγραμμα βρίσκεται στο αρχείο well.f. Αφού ζητήσουμε τα δεδομένα από το χρήστη (energy, parity, STEPS) ξεκινάει η βασική αναζήτηση της ενέργειας

```
      do while (iter .lt. 10000)
      .............
       if(DABS(psinew) .le. epsilon) goto 123
      .............
      enddo                       ! do while
 123  continue
```

όπου δείχνουμε το σημείο εξόδου όταν $\psi(1) =$psinew έχει απόλυτη τιμή μικρότερη από epsilon. Μέσα στο βρόχο εκτελείται ο αλγόριθμος

που περιγράφεται στη σελίδα 337. Μετά το continue η ενέργεια έχει προσδιοριστεί με τη ζητούμενη ακρίβεια και το υπόλοιπο πρόγραμμα απλά καταγράφει τη λύση στο array psifinal(STEPS). Τα αποτελέσματα καταγράφονται στο αρχείο psi.dat. Παρατηρήστε τη χρήση της μεταβλητής parity για την ενοποιημένη αντιμετώπιση των περιπτώσεων parity$= \pm 1$. Ολόκληρος ο κώδικας παρατίθεται παρακάτω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     file: well.f
C
C     Computation of energy eigenvalues and eigenfunctions
C     of a particle in an infinite well with V(-x)=V(x)
C
C     Input:  energy: initial guess for energy
C             parity: desired parity of solution (+/- 1)
C             STEPS : Number of RK4 steps from x=0 to x=1
C     Output: energy: energy eigenvalue
C             psi.dat: final psi(x)
C             all.dat: all psi(x) for trial energies
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program even_potential_well
      implicit none
      integer   P
      parameter(P=10000)
      real*8 energy,dx,x,epsilon,de
      common /params/energy
      integer parity,STEPS,iter,i
      real*8 psi,psip,psinew,psiold
      real*8 psifinal(-P:P),xstep(-P:P)
C     ------ Input:
      print *,'Enter energy,parity,STEPS:'
      read(5,*) energy,parity,STEPS
      if(STEPS  .gt. P) stop 'STEPS > P'
      if(parity .gt. 0) then
       parity =  1
      else
       parity = -1
      endif
      print *,'# ######################################'
      print *,'# Estart= ',energy,' parity= ',parity
```

```
      dx      = 1.0D0/(STEPS-1)
      epsilon = 1.0D-6
      print *,'# STEPS=  ',STEPS ,' dx = ',dx,' eps= ',epsilon
      print *,'# ########################################'

C     ----- Calculate:
      open(unit=11,file='all.dat')
      iter    = 0
      psiold  = 0.0D0 ! calculated values of psi at x=1
      psinew  = 1.0D0
      de      = 0.1D0*DABS(energy) ! original change in energy
      do while (iter .lt. 10000)
C     ---------- Initial conditions at x=0
       x      = 0.0D0
       if(parity .eq. 1)then
        psi   = 1.0D0
        psip  = 0.0D0
       else
        psi   = 0.0D0
        psip  = 1.0D0
       endif
       write(11,*) iter,energy, x, psi,psip
C      --------- Use Runge-Kutta to forward to x=1
       do i=2,STEPS
        x     = (i-2)*dx
        call RKSTEP(x,psi,psip,dx)
        write(11,*) iter,energy,x,psi,psip
       enddo                    ! do i=2,STEPS
       psinew = psi
       print *,iter, energy, de,psinew
C      --------- Stop if value of psi close to 0
       if(DABS(psinew) .le. epsilon) goto 123
C      --------- Change direction of energy search:
       if(psinew*psiold .lt. 0.0D0) de = -0.5D0*de
       energy = energy + de
       psiold = psinew
       iter   = iter + 1
      enddo                     ! do while
 123  continue
      close(11)
```

```
C     ------- solution: calculate it once again and store it
      if(parity .eq. 1)then
       psi    = 1.0D0
       psip   = 0.0D0
      else
       psi    = 0.0D0
       psip   = 1.0D0
      endif
      x              = 0.0D0
      xstep   (0)    = x
      psifinal(0)    = psi ! array that stores psi(x)
C     ------- Use Runge-Kutta to move to x=1
      do i=2,STEPS
       x             = (i-2)*dx
       call RKSTEP(x,psi,psip,dx)
       xstep   (i-1) = x
       psifinal(i-1) = psi
C      ------ Use parity to compute psi(-x)
       xstep   (1-i) = -x
       psifinal(1-i) = parity*psi
      enddo                     ! do i=2,STEPS
C     ------- Print final solution:
      open(unit=11,file='psi.dat')
      print *,'Final result: E= ',energy,' parity= ',parity
      write(11,*)'# E= '         ,energy,' parity= ',parity
      do i=-(STEPS-1),(STEPS-1)
       write(11,*) xstep(i),psifinal(i)
      enddo
      close(11)
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

Η μεταγλώττιση και το τρέξιμο γίνεται εύκολα με τις εντολές

```
> f77  well.f wellInfSq.f rk.f -o well
> ./well
 Enter energy,parity,STEPS:
2.0 1 400
 # ######################################
 # Estart=  2.0000000000000000       parity= 1
 # STEPS= 400 dx = 2.50626566416E-003 eps= 9.9999999999E-007
 # ######################################
```

n	$(n\pi/2)^2$	Τετραγωνικό	Τριγωνικό	Διπλό Πηγάδι
1	2.467401100	2.467401123	5.248626709	15.294378662
2	9.869604401	9.869604492	14.760107422	15.350024414
3	22.206609902	22.206604004	27.069021606	59.190820312
4	39.478417604	39.478393555	44.510925293	59.968872070
5	61.685027507	61.685024261	66.638431549	111.324737549
6	88.826439610	88.826611328	93.845886230	126.376281738
7	120.902653913	120.902664185	125.878829956	150.745214844
8	157.913670417	157.913818359	162.925689697	194.075781250
9	199.859489122	199.859490204	204.845026016	235.017471313
10	246.740110027	246.740600586	251.748138428	275.673828125
11	298.555533133	298.555554390	303.545814514	331.428306580
12	355.305758439	355.306396484	360.310668945	388.744384766

Πίνακας 8.1: Οι ιδιοτιμές της ενέργειας για το τετραγωνικό, τριγωνικό και διπλό πηγάδι απειρόβαθου δυναμικού (Εξισώσεις (8.15) , (8.24) με $v_0 = 10$) και (8.25) με $v_0 = 100$, $a = 0.3$). Παρατηρούμε την εξαιρετική ακρίβεια προσδιορισμού των ενεργειακών σταθμών για το τετραγωνικό δυναμικό. Επίσης, για τα άλλα δυναμικά, πως καθώς απομακρυνόμαστε από τον πάτο του δυναμικού, οι ενεργειακές στάθμες τείνουν να γίνουν οι ίδιες: Το σωμάτιο παύει να επηρεάζεται από τις λεπτομέρειες του δυναμικού στον πάτο καθώς αυξάνεται η ενέργειά του.

```
  0   2.0000000000000     0.200000000000      0.15594369476721
  1   2.2000000000000     0.200000000000      8.74448016806986E-2
.........................................
 28   2.4674072265624     1.220703125000E-5 -1.95005436858826E-6
 29   2.4674011230468    -6.103515625000E-6 -7.24621589476086E-9
 Final result: E=    2.4674011230468746       parity=           1
```

Η τιμή της ενέργειας προσδιορίζεται σε ϵ =2.467401123 που μπορεί να συγκριθεί με την ακριβή τιμή $\epsilon = (\pi/2)^2 \approx 2.467401100$. Το ποσοστό σφάλματος είναι $\sim 10^{-8}$, μάλλον καλά πήγαμε! Η διαδικασία της σύγκλισης φαίνεται στο Σχήμα 8.2.

Για την εύρεση των διεγερμένων καταστάσεων αλλάζουμε την ομοτιμία και διαλέγουμε κάθε φορά ενέργεια ελαφρά μεγαλύτερη από τη λύση που έχουμε ήδη βρει[4]. Τα αποτελέσματα δίνονται στον πίνακα 8.1. Παρατηρούμε την εξαιρετική συμφωνία του αριθμητικού υπολογισμού συγκρινόμενου με το αναλυτικά γνωστό αποτέλεσμα $\epsilon_n = (n\pi/2)^2$.

Τελειώνουμε την παράγραφο με δύο ακόμα παραδείγματα δυναμι-

[4]Προσοχή: αν τα επίπεδα ενέργειας είναι πολύ κοντά, μπορούμε να κρατάμε την αρχική ενέργεια σταθερή και να αλλάζουμε μόνο την ομοτιμία.

κών. Πρώτα του δυναμικού με τριγωνικό σχήμα στον πάτο

$$v(x) = \begin{cases} v_0|x| & |x| < 1 \\ +\infty & |x| > 1 \end{cases} \tag{8.24}$$

καθώς και ένα διπλό πηγάδι δυναμικού με

$$v(x) = \begin{cases} v_0 & |x| < a \\ 0 & a < |x| < 1 \\ +\infty & 1 < |x| \end{cases} \tag{8.25}$$

όπου οι παράμετροι v_0, a είναι θετικοί αριθμοί. Η μορφή των δυναμικών αναπαρίσταται πρόχειρα στο Σχήμα 8.1.

Για το τριγωνικό δυναμικό επιλέγουμε $v_0 = 10$, ενώ για το διπλό πηγάδι $v_0 = 100$ και $a = 0.3$. Οι μεταβολές στον κώδικά γίνονται μέσα στο αρχείο `wellInfSq.f` και αποθηκεύονται μέσα στα αρχεία `wellInfTr.f` και `wellInfDbl.f` αντίστοιχα. Απλά αλλάζουμε τη γραμμή του κώδικα που αφορά τη συνάρτηση του δυναμικού μέσα στη συνάρτηση `f2`. Λ.χ. στο αρχείο `wellInfTr.f`

```
C     ------- potential, set here:
      V  = 10.0D0*DABS(x)
```

ενώ στο αρχείο `wellInfDbl.f`

```
C     ------- potential, set here:
      if( DABS(x) .le. 0.3D0)then
       V = 100.0D0
      else
       V = 0.0D0
      endif
```

Η ανάλυση γίνεται με τον ίδιο ακριβώς τρόπο και τα αποτελέσματα για το ενεργειακό φάσμα δίνονται στον πίνακα 8.1. Παρατηρούμε ότι οι υψηλές ενεργειακές στάθμες των τριών δυναμικών τείνουν να γίνουν οι ίδιες καθώς το n γίνεται πολύ μεγάλο. Ο λόγος είναι ότι όταν το σωμάτιο έχει πολύ υψηλή ενέργεια σε σχέση με το v_0, επηρεάζεται πολύ λίγο από τις λεπτομέρειες της μορφής το δυναμικού στον πάτο και ουσιαστικά βλέπει ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού. Στην περίπτωση του τριγωνικού δυναμικού, οι πρώτες ενεργειακές στάθμες είναι υψηλότερες από αυτές του τετραγωνικού δυναμικού, αφού κατά μέσο όρο η δυναμική ενέργεια είναι μεγαλύτερη και η μορφή του δυναμικού τείνει να περιορίσει το σωμάτιο σε μικρότερη περιοχή (Δx μειώνεται,

άρα Δp αυξάνεται). Το τελευταίο φαίνεται και στο Σχήμα 8.3 όπου συγκρίνονται οι κυματοσυναρτήσεις των δύο δυναμικών.

Το ίδιο παρατηρούμε και για το διπλό πηγάδι δυναμικού. Επί πλέον βλέπουμε και τον προσεγγιστικό εκφυλισμό των 4 πρώτων ενεργειακών σταθμών ανά ζεύγη, κάτι που αναμένεται σε δυναμικά της μορφής αυτής. Αυτό σας θυμίζω μπορεί να κατανοηθεί ποιοτικά παρατηρώντας λ.χ. ότι οι κυματοσυναρτήσεις $\psi_+(x) = (1/\sqrt{2})(\psi_1(x) + \psi_2(x))$ και $\psi_-(x) = (1/\sqrt{2})(\psi_1(x) - \psi_2(x))$ αντιστοιχούν σε κυματοσυναρτήσεις καταστάσεων στις οποίες το σωμάτιο σχεδόν περιορίζεται στο αριστερό και δεξί πηγάδι αντίστοιχα. Αυτό μπορείτε να το δείτε στο Σχήμα 8.4. Καθώς $v_0 \to +\infty$ τα δύο πηγάδια αποσυζεύγνυνται και οι $\psi_\pm(x)$ τείνουν προς τις κυματοσυναρτήσεις θεμελιώδους κατάστασης δύο ανεξάρτητων απειρόβαθων πηγαδιών πλάτους $1-a$ και οι αντίστοιχες ενέργειες σε $\epsilon_{+,1} = \epsilon_{-,1} = (\pi/(1-a))^2$. Η διαφορά των ϵ_1 και ϵ_2 από τις τιμές αυτές οφείλεται στην πεπερασμένη τιμή του δυναμικού v_0 (δείτε άσκηση 4).

Τέλος να τονίσουμε τους περιορισμούς της μεθόδου αυτής. Καταρχήν θυμίζουμε ότι μπορούμε να την χρησιμοποιήσουμε μόνο σε απειρόβαθα πηγάδια δυναμικού που είναι άρτια $v(x) = v(-x)$. Αυτό χρησιμοποιήθηκε στις αρχικές συνθήκες (8.19) και (8.20) που ισχύουν για καταστάσεις δεδομένης ομοτιμίας. Όταν το δυναμικό είναι άρτιο, οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας έχουν καλά καθορισμένη ομοτιμία. Το άλλο πρόβλημα γίνεται αντιληπτό αν κάνετε την άσκηση 4: Αν η κυματοσυνάρτηση είναι σχεδόν μηδέν για $x = 0$, όπως συμβαίνει όταν $v(0) \gg \epsilon$, τότε τα αριθμητικά σφάλματα μας εμποδίζουν να ολοκληρώσουμε με μεγάλη ακρίβεια από $x = 0$ σε $x = 1$. Το ίδιο θα συμβαίνει και όταν έχουμε να περάσουμε μέσα από ψηλά φράγματα δυναμικού. Παρόλα αυτά είναι απλή μέθοδος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στην περίπτωση που έχουμε δέσμιες καταστάσεις σε ένα άρτιο δυναμικό που δεν είναι απειρόβαθο: Στην περίπτωση αυτή παίρνουμε το δυναμικό που μας δίνεται και απλά τοποθετούμε τους αδιαπέραστους τοίχους σε σημεία όπου η κυματοσυνάρτηση αναμένεται να είναι πρακτικά μηδέν. Τότε η επίδραση του τείχους θα είναι πολύ μικρή πάνω στις λύσεις του αρχικού προβλήματος. Δείτε το πρόβλημα 3.

8.2 Δέσμιες Καταστάσεις.

Το σπουδαιότερο πρόβλημα με την απλή μέθοδο που παρουσιάσαμε στην παράγραφο 8.1 είναι ότι παρουσιάζει αριθμητική αστάθεια όταν προσπαθούμε να λύσουμε ένα πρόβλημα δέσμιων καταστάσεων. Αυτό θα το συναντήσατε ήδη αν προσπαθήσατε να λύσετε την άσκηση 3 όπου

μετακινώντας τα τείχη μακρύτερα από $|x| = 3$ η σύγκλιση του αλγόριθμου γίνεται ιδιαίτερα δυσχερής. Για να το καταλάβουμε αυτό, όταν ολοκληρώνουμε την εξίσωση Schrödinger από την ελεύθερη περιοχή προς την κλασικά απαγορευμένη, περνάμε από ταλαντούμενη κυματοσυνάρτηση μέτρου της τάξης της μονάδας σε κυματοσυνάρτηση η οποία έχει εκθετική απόσβεση. Δεν πρέπει όμως να ξεχνάμε ότι για $|x| \to +\infty$, μαζί με τη φυσικά αποδεκτή λύση $\psi(x) \sim \mathrm{e}^{-k|x|}$ έχουμε και τη λύση $\psi(x) \sim \mathrm{e}^{+k|x|}$ η οποία αποκλίνει εκθετικά γρήγορα και την απορρίπτουμε λόγω της (8.2) .Έτσι χρειάζεται πολύ λεπτή ρύθμιση της τιμής της ενέργειας για την επίτευξη σύγκλισης, ειδικά αν ολοκληρώνουμε για μεγάλα $|x|$. Για το λόγο αυτό είναι προτιμότερο να ολοκληρώνουμε από την περιοχή εκθετικής απόσβεσης προς την κλασικά επιτρεπόμενη περιοχή. Η ιδέα είναι να ξεκινήσουμε από τέτοιες περιοχές και να ταιριάξουμε τις τιμές των λύσεων σε κατάλληλα επιλεγμένα σημεία. Το ταίριασμα γίνεται προσπαθώντας να εντοπίσουμε την ενέργεια που η τιμή της κάνει το λόγο

$$f(\epsilon) = \frac{\psi^{(+)\prime}(x_m)/\psi^{(+)}(x_m) - \psi^{(-)\prime}(x_m)/\psi^{(-)}(x_m)}{\psi^{(+)\prime}(x_m)/\psi^{(+)}(x_m) + \psi^{(-)\prime}(x_m)/\psi^{(-)}(x_m)} \tag{8.26}$$

να είναι μηδέν μέσα στα όρια της αριθμητικής ακρίβειας που θέτουμε σε κατάλληλα επιλεγμένο σημείο x_m. Το σημείο x_m είναι καλό να βρίσκεται μέσα στην κλασικά επιτρεπόμενη περιοχή ($\epsilon > v(x)$) και συνήθως το παίρνουμε στο σημείο όπου $\epsilon = v(x)$. Με κατάλληλη επανακανονικοποίηση των $\psi^{(\pm)}(x)$, επιλέγουμε $\psi^{(+)}(x_m) = \psi^{(-)}(x_m)$, οπότε η (8.26) απλά σημαίνει ότι $\psi^{(+)\prime}(x_m) \approx \psi^{(-)\prime}(x_m)$. Ο παρονομαστής της (8.26) απλά θέτει την κλίμακα στην ακρίβεια που θέλουμε να πετύχουμε[5].

Η ιδέα σκιαγραφείται γραφικά στο Σχήμα 8.5. Ο αλγόριθμος έχει ως εξής:

- Επιλέγουμε το διάστημα ολοκλήρωσης `[xmin,xmax]`.
- Επιλέγουμε τις αρχικές συνθήκες ολοκλήρωσης $\psi^{(-)}$(`xmin`), $\psi^{(-)\prime}$(`xmin`), $\psi^{(+)}$(`xmax`), $\psi^{(+)\prime}$(`xmax`). Η επιλογή γίνεται ανάλογα με το πρόβλημα, δηλ. με το δυναμικό $v(x)$ που θα μελετήσουμε. Συνήθως τα `xmin, xmax` είναι αρκετά βαθιά μέσα στην κλασικά απαγορευμένη περιοχή και παίρνουμε τα $\psi^{(-)}$(`xmin`), $\psi^{(+)}$(`xmax`) μηδέν ή εκθετικά μικρά ($\sim \mathrm{e}^{-k|x|}$, $k^2 = v(x) - \epsilon$). Οι παράγωγοι $\psi^{(-)\prime}$(`xmin`), $\psi^{(+)\prime}$(`xmax`) παίρνονται ανάλογα μικρές. Η ελευθερία επιλογής της σταθεράς κανονικοποίησης της $\psi(x)$ μας επιτρέπει οι επιλογές αυτές να είναι σχετικά αυθαίρετες. Το σχετικό πρόσημο των παραγώγων (που

[5]Προσοχή: αν έχουμε την ατυχία να επιλέξουμε x_m τέτοιο ώστε $\psi'(x_m) = 0$, τότε το παραπάνω κριτήριο μάλλον θα αποτύχει.

καθορίζεται λ.χ. από την ομοτιμία σε περίπτωση συμμετρικού δυναμικού) δεν έχει αρχικά σημασία και λαμβάνεται υπόψη στην επανακανονικοποίηση της $\psi^{(-)}(x)$ όταν παρακάτω θα κάνουμε την ταύτιση των τιμών στο σημείο xm. Σε ένα απειρόβαθο πηγάδι, τα xmin,xmax είναι τα σημεία απειρισμού του δυναμικού και φυσικά $\psi^{(-)}(\texttt{xmin}) = \psi^{(+)}(\texttt{xmax}) = 0$.

- Επιλέγουμε αρχική ενέργεια ϵ και βήμα μεταβολής της $\delta\epsilon$.
- Από την τιμή της ενέργειας υπολογίζουμε το σημείο xm, το οποίο βρίσκεται κοντά στο πιο αριστερό σημείο που λύνει την εξίσωση[6] $v(x) = \epsilon$.
- Εξελίσσουμε τις εξισώσεις (8.22) από xmin στο xm και παίρνουμε τις $\psi^{(-)}(x)$,$\psi^{(-)\prime}(x)$.
- Εξελίσσουμε τις εξισώσεις (8.22) από xmax στο xm και παίρνουμε τις $\psi^{(+)}(x)$,$\psi^{(+)\prime}(x)$.
- Επανακανονικοποιούμε την $\psi^{(-)}(x) \to \psi^{(-)}(x)(\psi^{(+)}(\texttt{xm})/\psi^{(-)}(\texttt{xm}))$, έτσι ώστε να έχουμε $\psi^{(+)}(\texttt{xm}) = \psi^{(-)}(\texttt{xm}))$.
- Υπολογίζουμε το λόγο $f(\epsilon)$ της (8.26) .
- Αν η $|f(\epsilon)|$ είναι μικρότερη από μια μικρή σταθερά ανοχής, σταματάμε και θεωρούμε τον υπολογισμό της ιδιοενέργειας και ιδιοκατάστασης ικανοποιητική.
- Αν η $|f(\epsilon)|$ άλλαξε πρόσημο από την προηγούμενη επανάληψη, σημαίνει πως μόλις περάσαμε την αναζητούμενη τιμή της ιδιοενέργειας. Μεταβάλλουμε τη φορά αναζήτησης $\delta\epsilon \to -\delta\epsilon/2$.
- Μεταβάλλουμε την τιμή της ενέργειας $\epsilon \to \epsilon + \delta\epsilon$ και επαναλαμβάνουμε από το δεύτερο βήμα.

Μετά από τον παραπάνω αλγόριθμο, η κυματοσυνάρτηση αποτελεί καλή προσέγγιση της ιδιοκατάστασης $\psi_n(x)$ με ιδιοενέργεια ϵ_n. Περαιτέρω επεξεργασία αφορά την κανονικοποίηση σύμφωνα με την (8.2) και ο υπολογισμός των αναμενόμενων τιμών σύμφωνα με την (8.9) . Ενδιαφέρον παρουσιάζει και ο αριθμός n_0 των σημείων μηδενισμού της κυματοσυνάρτησης που δίνει την τάξη του ενεργειακού επιπέδου n της ενέργειας ϵ_n ($n = n_0 + 1$).

[6] Προσοχή, το σημείο αυτό αλλάζει όταν αλλάζουμε την ϵ.

Παρατίθεται το πρόγραμμα που κωδικοποιεί τον παραπάνω αλγόριθμο. Κατ' αρχήν, όπως και στην προηγούμενη παράγραφο, χρησιμοποιούμε τη ρουτίνα RKSTEP (βλ. σελίδα 163) που πραγματοποιεί ένα βήμα Runge-Kutta 4ης τάξης την οποία προγραμματίζουμε στο αρχείο rk.f.

Το δυναμικό προγραμματίζεται σε μια συνάρτηση V(x). Οι αρχικές συνθήκες στα σημεία xmin και xmax προγραμματίζονται στη ρουτίνα boundary(xmin, xmax, psixmin, psipxmin, psixmax, psipxmax) η οποία επιστρέφει στο κυρίως πρόγραμμα τις τιμές psixmin= $\psi^{(-)}$(xmin), psipxmin= $\psi^{(-)\prime}$(xmin), psixmax= $\psi^{(+)}$(xmax), psipxmax= $\psi^{(-)\prime}$(xmax). Αυτές τις τοποθετούμε σε ένα αρχείο του οποίου το όνομα έχει σχέση με το δυναμικό $v(x)$. Για παράδειγμα, για το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού (8.15) δημιουργούμε το αρχείο schInfSq.f. Στο ίδιο αρχείο προγραμματίζουμε και της συναρτήσεις των παραγώγων f1, f2, όπως κάναμε και στην προηγούμενη παράγραφο.

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     file: schInfSq.f
C
C     Functions used in RKSTEP routine. Here:
C     f1 = psip(x) = psi(x)'
C     f2 = psip(x)'= psi(x)''
C
C     One has to set:
C       1. V(x), the potential
C     2. The boundary conditions for psi,psip at x=xmin and x=xmax
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     ----- potential:
      real*8 function V(x)
      implicit none
      real*8 x
      V = 0.0D0
      end
C     ----- boundary conditions:
     subroutine boundary(xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax)
      implicit none
      real*8 xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax,V
C    ----- for infinite square well we set psi=0 at boundary and psip=+/-1
      psixmin  =  0.0D0
      psipxmin =  1.0D0
```

```
      psixmax  =  0.0D0
      psipxmax = -1.0D0
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     ----- trivial function: derivative of psi
      real*8 function f1(x,psi,psip)
      real*8 x,psi,psip
      f1=psip
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     ----- the second derivative of wavefunction:
C     psip(x)' = psi(x)'' = -(E-V) psi(x)
      real*8 function f2(x,psi,psip)
      implicit none
      real*8 x,psi,psip,energy,V
      common /params/energy
C     ----- Schroedinger eq: RHS
      f2 = (V(x)-energy)*psi
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

Παρατηρούμε ότι τα σημεία απειρισμού του δυναμικού καθορίζονται από τις συνοριακές συνθήκες στα `xmin, xmax`.

Το κυρίως πρόγραμμα προγραμματίζεται στο αρχείο `sch.f`. Παρακάτω παραθέτουμε τον κώδικα ο οποίος συμπεριλαμβάνει κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης και υπολογισμό του αριθμού των δεσμών της κυματοσυνάρτησης. Η κανονικοποίηση γίνεται από τη συνάρτηση `integrate(psi, dx, STEPS)` η οποία ολοκληρώνει αριθμητικά με τη μέθοδο Simpson μια συνάρτηση που οι τιμές της `psi(i) i=1,...,STEPS` δίνονται σε ένα περιττό αριθμό από STEPS σημεία τα οποία ισαπέχουν απόσταση dx.

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C File: sch.f
C
C Integrate 1d Schrodinger equation from xmin to xmax. Determine energy
C eigenvalue and eigenfunction by matching evolving solutions from
C xmin and from xmax at a point xm. Mathing done by equating values of
C functions and their derivatives at xm. The point xm chosen at the
C left most turning point of the potential at any given value of the
C energy. The potential and boundary conditions chosen in different file.
```

```
C ---------------------------------------------------------------------
C Input:  energy: Trial value of energy
C             de: energy step, if matching fails de -> e+de, if
C                 logderivative changes sign     de -> -de/2
C         xmin, xmax, STEPS
C ---------------------------------------------------------------------
C Output: Final value of energy, number of nodes of wavefunction in stdout
C         Final eigenfunction in file psi.dat
C         All trial functions and energies in file all.dat
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program schroedinger_equation_1D
      implicit none
      integer P,STEPS,STEPSL,STEPSR
      parameter (P=20001)
      real*8  psi(P),psip(P)
      real*8  dx
      real*8  xmin,xmax,xm       !left/right/matching points
      real*8  psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax
      real*8  psileft ,psiright ,psistep,psinorm
      real*8  psipleft,psipright,psipstep
      real*8  energy,de,epsilon,integrate
      common/params/energy
      real*8  matchlogd,matchold,psiold,norm,x
      integer iter,i,imatch,nodes
      real*8  V
C     ---------- Input:
      print *,'# Enter energy,de,xmin,xmax,STEPS'
      read(5,*)energy,de,xmin,xmax,STEPS
C     --- need even intervals for normalization integration
      if( mod(STEPS,2).eq.0)STEPS=STEPS+1
      if( STEPS .gt. P   ) stop 'Fatal Error: 2*STEPS>P'
      if( xmin  .ge. xmax) stop 'Error: xmin >= xmax'
      dx      = (xmax - xmin)/(STEPS-1)
      epsilon = 1.0D-6
     call boundary(xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax)
      print *,'# ######################################'
      print *,'# Estart= ',energy, ' de= ',de
      print *,'# STEPS=  ',STEPS ,' eps= ',epsilon
      print *,'# xmin= ',xmin,' xmax= ',xmax, ' dx= ',dx
      print *,'# psi(xmin)= ',psixmin,' psip(xmin)= ',psipxmin
      print *,'# psi(xmax)= ',psixmax,' psip(xmax)= ',psipxmax
```

```
      print *,'# ########################################'
C     ----- Calculate:
      open(unit=11,file='all.dat')
      matchold   = 0.0d0
      do iter=1,10000
C    ----- Determine matching point at turning point from the left:
       imatch = -1
       do i=1,STEPS
        x = xmin + (i-1)*dx
      if( imatch .lt. 0 .and. (energy-V(x)) .gt. 0.0D0) imatch = i
       enddo
     if( imatch .le. 100 .or. imatch .ge. STEPS-100) imatch = STEPS/5
       xm     = xmin + (imatch-1)*dx
       STEPSL = imatch
       STEPSR = STEPS-imatch+1
C     ----- Evolve wavefunction from the left:
       psi  (1)  = psixmin
       psip (1)  = psipxmin
       psistep   = psixmin
       psipstep  = psipxmin
       do i=2,STEPSL
        x        = xmin + (i-2)*dx !this is x before the step
        call RKSTEP(x,psistep,psipstep, dx)
        psi (i)  = psistep
        psip(i)  = psipstep
       enddo
     psinorm  = psistep    ! use this to normalize eigenfunction to match at xm
       psipleft  = psipstep
C     ----- Evolve wavefunction from the right:
       psi (STEPS)      = psixmax
       psip(STEPS)      = psipxmax
       psistep          = psixmax
       psipstep         = psipxmax
       do i=2,STEPSR
        x               = xmax - (i-2)*dx
        call RKSTEP(x,psistep,psipstep,-dx)
        psi (STEPS-i+1) = psistep
        psip(STEPS-i+1) = psipstep
       enddo
       psinorm          = psistep/psinorm
       psipright        = psipstep
```

```
C     ----- Renormalize psil so that psil(xm)=psir(xm)
       do i=1,STEPSL-1
        psi (i)         = psinorm * psi (i)
        psip(i)         = psinorm * psip(i)
       enddo
       psipleft         = psinorm * psipleft
C     ----- print current solution:
       do i=1,STEPS
        x = xmin + (i-1)*dx
        write(11,*)iter,energy,x,psi(i),psip(i)
       enddo
C     ----- matching using derivatives:
C    Careful: this can fail if psi'(xm) = 0 !! (use also |de|<1e-6
C     criterion)
     matchlogd = (psipright-psipleft)/(DABS(psipright)+DABS(psipleft))
     print *,'# iter,energy,de,xm,logd: ',iter,energy,de,xm,matchlogd
C     ----- Exit condition:
     if(DABS(matchlogd).le.epsilon .or. DABS(de/energy).lt.1.0D-12)
     $      goto 123
       if( matchlogd * matchold .lt. 0.0D0) de = -0.5D0*de
       energy    = energy + de
       matchold  = matchlogd
      enddo ! do iter=1,10000
 123  continue ! come here if iterations converged
      close(11)
C     ------------------------------------------------
C     ----- Solution has been found and now it is stored:
      norm     = integrate(psi,dx,STEPS)
      norm     = 1.0D0/dsqrt(norm)
      do i=1,STEPS
       psi(i)  = norm*psi(i)
      enddo
C     ----- Cound number of zeroes, add one and get energy level:
      nodes    = 1
      psiold   = psi(1)
      do i=2,STEPS-1
     if( DABS(psi(i)) .gt. epsilon)then !should be 0 within epsilon
        if( psiold*psi(i) .lt. 0.0D0  )nodes = nodes+1
        psiold = psi(i)
       endif
      enddo !i=2,STEPS-1
```

```
C     ------- Print final solution:
      open(unit=11,file='psi.dat')
      print *,'Final result: E= ',energy,' n= ',nodes,
     $     ' norm = '      ,norm
      if( DABS(matchlogd) .gt. epsilon) print *
     $     ,'Final result: SOS: logd>epsilon. logd= ',matchlogd
      write(11,*)'# E= '         ,energy,' n= ',nodes,
     $     ' norm = '      ,norm
      do i=1,STEPS
       x = xmin + (i-1)*dx
       write(11,*) x,psi(i)
      enddo
      close(11)
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C     Simpson's rule to integrate psi(x)*psi(x) for proper
C     normalization. For n intervals of width dx (n even)
C     Simpson's rule is:
C     int(f(x)dx) =
C      (dx/3)*(f(x_0)+4 f(x_1)+2 f(x_2)+...+4 f(x_{n-1})+f(x_n))
C
C     Input:   Discrete values of function psi(STEPS)
C              Integration step dx
C     Returns: Integral(psi(x)psi(x) dx)
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      real*8 function integrate(psi,dx,STEPS)
      implicit none
      integer   STEPS
C     ------------- Note: we need P due to geometry of array
      real*8 psi(STEPS),dx
C     -------------
      real*8 int
      integer i
C     ----- zeroth order point:
      i    = 1
      int  = psi(i)*psi(i)
C     ----- odd  order points (i=k+1 is even):
      do i=2,STEPS-1,2
       int = int + 4.0D0*psi(i)*psi(i)
      enddo
```

```
C     ----- even order points:
      do i=3,STEPS-2,2
       int = int + 2.0D0*psi(i)*psi(i)
      enddo
C     ----- last point:
      i    = STEPS
      int  = int + psi(i)*psi(i)
C     ----- measure normalization:
      int  = int*dx/3.0D0
C     ----- final result:
      integrate = int
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

Αφήνουμε σαν άσκηση στον αναγνώστη να αναπαράγει τα αποτελέσματα της προηγούμενης παραγράφου για το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού. Για το τρέξιμο του προγράμματος, μεταγλωττίστε τον κώδικα και τρέξτε τον με την εντολή:

```
> f77 sch.f schInfSq.f rk.f -o s
> ./s
 # Enter energy,de,xmin,xmax,STEPS
1 0.5 -1 1 2000
 # ######################################
 # Estart=    1.000  de=    0.5
 # STEPS=     2001   eps=   1.0E-006
 # xmin=     -1.000  xmax=  1.000 dx=  1.000E-003
 # psi(xmin)= 0.000  psip(xmin)=    1.000
 # psi(xmax)= 0.000  psip(xmax)=   -1.000
 # ######################################
 # iter,energy,de,xm,logd:  1 1.000000  0.500      -0.601 -0.9748
 # iter,energy,de,xm,logd:  2 1.500000  0.500      -0.601 -0.6412
.....
 # iter,energy,de,xm,logd: 30 2.467399 -3.8146E-006 -0.601 -1.007E-006
 # iter,energy,de,xm,logd: 31 2.467401  1.9073E-006 -0.601  2.708E-007
 Final result: E= 2.4674015045166016  n= 1  norm =   1.5707965025006119
```

Παραπάνω θέσαμε `xmin= -1, xmax = 1, STEPS= 2000` καθώς και $\epsilon = 1$, $\delta\epsilon = 0.5$. Τελικά πήραμε ότι η ενέργεια της πρώτης (θεμελιώδους, `n=1`) ενεργειακής κατάστασης είναι $\epsilon_1 = 2.4674015045166016$. Η κυματοσυνάρτηση βρίσκεται στο αρχείο `psi.dat` και μπορούμε να τη δούμε γραφικά με το `gnuplot` με την εντολή

```
gnuplot> plot "psi.dat" using 1:2 with lines
```

Η διαδικασία σύγκλισης στην κυματοσυνάρτηση είναι αποθηκευμένη στο αρχείο `all.dat`. Η πρώτη στήλη έχει τον αριθμό προσπάθειας σύγκλισης (εδώ `iter = 0, ... 31`) και μπορούμε εύκολα να φιλτράρουμε κάθε προσπάθεια με τις εντολές

```
gnuplot> plot   "<awk '$1==1' all.dat" using 3:4 w l t "iter=1
gnuplot> replot "<awk '$1==2' all.dat" using 3:4 w l t "iter=2
gnuplot> replot "<awk '$1==3' all.dat" using 3:4 w l t "iter=3
gnuplot> replot "<awk '$1==4' all.dat" using 3:4 w l t "iter=4
.....
```

οι οποίες παράγουν το Σχήμα 8.6

8.3 Μετρήσεις.

Όταν για μια κατάσταση $|\psi\rangle$ γνωρίζουμε την κυματοσυνάρτηση σε αναπαράσταση θέσης $\psi(x)$, είναι εύκολο να υπολογίσουμε τη δράση τελεστών που αντιστοιχούν σε παρατηρήσιμες ποσότητες $\mathcal{A}(x,p)$ που είναι συνάρτηση της θέσης και της ορμής. Η δράση των τελεστών

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \qquad \hat{p}\psi(x) = -i\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \tag{8.27}$$

δίνουν[7]

$$\hat{\mathcal{A}}(\hat{x},\hat{p})\psi(x) = \mathcal{A}(x, -i\frac{\partial}{\partial x})\psi(x)\,. \tag{8.28}$$

Χρησιμοποιώντας την (8.9) μπορούμε να υπολογίσουμε την αναμενόμενη (ή μέση) τιμή $\langle\mathcal{A}\rangle$ του τελεστή $\mathcal{A}$ όταν το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|\psi\rangle$. Ενδιαφέροντα παραδείγματα αποτελούν οι παρατηρήσιμες ποσότητες "θέση" x, "θέση τετράγωνο" x^2, "ορμή" p, "ορμή τετράγωνο" p^2, "κινητική ενέργεια" $T = p^2/2m$, "δυναμική ενέργεια" $V(x)$, "ενέργεια/Χαμιλτονιανή" $H = T + V(x)$ των οποίων οι μέσες τιμές

[7] Εδώ δε λαμβάνουμε υπόψη προβλήματα διάταξης τελεστών που δεν μετατίθενται λ.χ. xp^2.

δίνονται από τις σχέσεις ($\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx \\
\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, x^2\, \psi(x)\, dx \\
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x)\, dx \\
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x)\, dx \\
\langle T \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x)\, dx \\
\langle V(x) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, V(x)\, \psi(x)\, dx \\
\langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi(x)\, dx\,. \qquad (8.29)
\end{aligned}$$

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι "αβεβαιότητες" $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ οι οποίες πρέπει να ικανοποιούν τη σχέση ("αρχή αβεβαιότητας Heisenberg")

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2}\,. \qquad (8.30)$$

Στις προηγούμενες παραγράφους εξηγούμε πώς να υπολογίζουμε αριθμητικά τις κυματοσυναρτήσεις των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας. Σε αυτές επειδή $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ παίρνουμε $\langle H \rangle = (1/2mL^2)\epsilon$, αλλά οι υπόλοιποι τελεστές θέλουν κάποια αριθμητική προσέγγιση για τον υπολογισμό των μέσων τιμών τους. Αν οι τιμές της κυματοσυνάρτησης δίνονται σε N ισαπέχοντα σημεία $x_1, x_2, \ldots, x_N$ Θα πάρουμε

$$\frac{\partial \psi(x_i)}{\partial x} \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_{i-1})}{2h} \qquad (8.31)$$

όπου $h = x_{i+1} - x_i$ και

$$\frac{\partial^2 \psi(x_i)}{\partial x^2} \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{h^2}\,. \qquad (8.32)$$

Και οι δύο τύποι έχουν ακρίβεια $\mathcal{O}(h^2)$. Θα πρέπει να προσέξουμε λίγο την εφαρμογή των τύπων στα άκρα του διαστήματος $[x_1, x_N]$. Αρχικά

θα χρησιμοποιήσουμε τις προσεγγίσεις[8]

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi(x_1)}{\partial x} &\approx \frac{\psi(x_2)-\psi(x_1)}{h} \\ \frac{\partial\psi(x_N)}{\partial x} &\approx \frac{\psi(x_N)-\psi(x_{N-1})}{h} \end{aligned} \tag{8.33}$$

και

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\psi(x_1)}{\partial x^2} &\approx \frac{\psi(x_3)-2\psi(x_2)+\psi(x_1)}{h^2} \\ \frac{\partial^2\psi(x_N)}{\partial x^2} &\approx \frac{\psi(x_N)-2\psi(x_{N-1})+\psi(x_{N-2})}{h^2}\,. \end{aligned} \tag{8.34}$$

Το σχετικό πρόγραμμα υπολογισμού των $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, Δx, Δp προγραμματίζεται στο αρχείο `observables.f` και δίνεται παρακάτω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C File observables.f
C Compile: f77 observables.f -o o
C Usage:   ./o <psi.dat>
C
C Read in a file with a wavefunction in the format of psi.dat:
C # E= <energy> ....
C x1  psi(x1)
C x2  psi(x2)
C ............
C
C Outputs expectation values:
C normalization Energy <x> <p> <x^2> <p^2> Dx Dp DxDp
C where Dx = sqrt(<x^2>-<x>^2) Dp = sqrt(<p^2>-<p>^2)
C       DxDp = Dx * Dp
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      program observables_expectation
      implicit none
      integer P,STEPS,i
      parameter(P=50000)
```

[8]Στο συνοδευτικό λογισμικό `obserbables.f, Derivatives.nb` εξηγείται πώς να χρησιμοποιήσετε σχέσεις με ακρίβεια $\mathcal{O}(h^2)$. Στα παραδείγματα που θα χρησιμοποιήσουμε η επίδραση της μειωμένης ακρίβειας $\mathcal{O}(h)$ στα αποτελέσματα είναι περίπου στο 4ο δεκαδικό ψηφίο.

```
      real*8 xstep(P),psi(P),obs(P)
      real*8 xav, pav, x2av, p2av, Dx, Dp, DxDp,energy,h,norm
      character*20 psifile,scratch
      real*8 integrate

C     the first argument of the command line must be the path
C    to the file with the wavefunction. (GNU fortran extension...)
      if( iargc() .ne. 1) stop 'Usage: o  <filename>'
      call getarg(1,psifile)
C     If the file does not exist, we go to label 100 (stop):
      open(unit=11,file=psifile,status='OLD',err=100)
      print *,"# reading wavefunction from file:", psifile
C     we read the first comment line from the file:
      read(11,*) scratch,scratch,energy
C     ------------------------------------------------------
C     Input data: psi(x)
      STEPS = 1
      do while(.TRUE.)
       if(STEPS .ge. P) stop 'Too many points'
       read(11,*,end=101) xstep(STEPS),psi(STEPS)
       STEPS = STEPS+1
      enddo !do while(.TRUE.)
 101  continue
      STEPS = STEPS - 1
      if(mod(STEPS,2) .eq. 0) STEPS = STEPS - 1
      h  = (xstep(STEPS)-xstep(1))/(STEPS-1)
C     ------------------------------------------------------
C     Calculate:
C     ---------- norm:
      do i=1,STEPS
       obs(i) = psi(i)*psi(i)
      enddo
      norm = integrate(obs,h,STEPS)
C     ---------- <x> :
      do i=1,STEPS
       obs(i) = xstep(i)*psi(i)*psi(i)
      enddo
      xav = integrate(obs,h,STEPS)/norm
C     ---------- <p>/i :
      obs(1) = psi(1)*(psi(2)-psi(1))/h
      do i=2,STEPS-1
```

```
       obs(i) = psi(i)*(psi(i+1)-psi(i-1))/(2.0D0*h)
      enddo
     obs(STEPS) = psi(STEPS)*(psi(STEPS)-psi(STEPS-1))/h !naive
      pav = -integrate(obs,h,STEPS)/norm
C     --------- <x^2>
      do i=1,STEPS
       obs(i) = xstep(i)*xstep(i)*psi(i)*psi(i)
      enddo
      x2av = integrate(obs,h,STEPS)/norm
C     -------- <p^2>
      obs(1) = psi(1)*(psi(3)-2.0D0*psi(2)+psi(1))/(h*h)
      do i=2,STEPS-1
       obs(i) = psi(i)*(psi(i+1)-2.0D0*psi(i)+psi(i-1))/(h*h)
      enddo
      obs(STEPS) = psi(STEPS)*
     $     (psi(STEPS)-2.0D0*psi(STEPS-1)+psi(STEPS-2))/(h*h)
      p2av = -integrate(obs,h,STEPS)/norm
C     -------- Dx
      Dx = dsqrt(x2av - xav*xav)
C     -------- Dp
      Dp = dsqrt(p2av - pav*pav)
C     -------- Dx . Dp
      DxDp = Dx*Dp
C     print results:
      print *,'# norm E <x> <p>/i <x^2> <p^2> Dx Dp DxDp'
    print '(10G25.17)',norm,energy,xav,pav,x2av,p2av,Dx,Dp,DxDp
      stop !normal execution ends here. Error messages follow
 100  stop 'Cannot open file'
      end

C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C     Simpson's rule to integrate psi(x)*psi(x) for proper
C     normalization. For n intervals of width dx (n even)
C     Simpson's rule is:
C     int(f(x)dx) =
C      (dx/3)*(f(x_0)+4 f(x_1)+2 f(x_2)+...+4 f(x_{n-1})+f(x_n))
C
C     Input:   Discrete values of function psi(STEPS)
C              Integration step dx
C     Returns: Integral(psi(x)psi(x) dx)
```

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      real*8 function integrate(psi,dx,STEPS)
      implicit none
      integer   STEPS
C     ------------- Note: we need P due to geometry of array
      real*8 psi(STEPS),dx
C     -------------
      real*8 int
      integer i
C     ----- zeroth order point:
      i    = 1
      int  = psi(i)
C     ----- odd  order points (i=k+1 is even):
      do i=2,STEPS-1,2
       int = int + 4.0D0*psi(i)
      enddo
C     ----- even order points:
      do i=3,STEPS-2,2
       int = int + 2.0D0*psi(i)
      enddo
C     ----- last point:
      i    = STEPS
      int  = int + psi(i)
C     ----- measure normalization:
      int  = int*dx/3.0D0
C     ----- final result:
      integrate = int
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

Για τη χρήση του προγράμματος χρειάζεστε την κυματοσυνάρτηση στα σημεία $x_1, \ldots, x_{\texttt{STEPS}}$ στο φορμά που παράγουν τα προγράμματα που γράψαμε μέχρι τώρα. Στην πρώτη γραμμή θα πρέπει να είναι καταγεγραμμένη η ενέργεια στην 3η στήλη ενώ από τη 2η γραμμή και μετά έχουμε δύο στήλες με τα ζευγάρια $(x_i, \psi(x_i))$. Η κυματοσυνάρτηση δεν είναι αναγκαίο να είναι κανονικοποιημένη, το κάνει το πρόγραμμα. Αν τα παραπάνω δεδομένα είναι καταγεγραμμένα στο αρχείο `psi.dat`, τότε η χρήση του προγράμματος γίνεται με τις εντολές

```
> f77  f77 observables.f -o obs
> ./obs psi.dat
```

Το πρόγραμμα τυπώνει στο stdout τη σταθερά κανονικοποίησης της $\psi(x)$, την ενέργεια (διαβασμένη από το αρχείο - όχι υπολογισμένη), και στη συνέχεια οι $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle/i$, $\langle p^2\rangle$, Δx, Δp και το γινόμενο $\Delta x \cdot \Delta p$.

Μερικές διευκρινήσεις πάνω στις λεπτομέρειες του προγράμματος. Για να διαβάσουμε τα δεδομένα από το αρχείο psi.dat χρησιμοποιούμε τις συναρτήσεις iargc(), getarg(n,string) που είναι επέκταση της γλώσσας Fortran στον GNU compiler. Η πρώτη επιστρέφει τον αριθμό των arguments στη γραμμή εντολών και η δεύτερη αποθηκεύει το n-οστό argument στην CHARACTER μεταβλητή string. Οπότε οι εντολές

```
      character*20 psifile
      if( iargc() .ne. 1) stop
      call getarg(1,psifile)
```

σταματάνε το πρόγραμμα αν η εντολή δεν έχει ακριβώς ένα argument ενώ η δεύτερη αποθηκεύει το πρώτο argument στη μεταβλητή file.

Η εντολή

```
      open(unit=11,file=psifile,status='OLD',err=100)
 100  stop 'Cannot open filename'
```

ανοίγει ένα αρχείο που πρέπει να υπάρχει ήδη (status='OLD') αλλιώς παράγεται σφάλμα. Ο προσδιορισμός err=100 μεταφέρει τον έλεγχο του προγράμματος στο statement με label '100'. Στο παραπάνω παράδειγμα, σταματάει το πρόγραμμα με μήνυμα σφάλματος 'Cannot open filename'.

Οι εντολές

```
      STEPS = 1
      do while(.TRUE.)
       read(11,*,end=101) xstep(STEPS),psi(STEPS)
       STEPS = STEPS+1
      enddo
 101  continue
```

διαβάζουν το αρχείο που ανοίγουμε γραμμή-γραμμή. Ο προσδιορισμός end=101 στο statement read(11,*,end=101) μεταφέρει τον έλεγχο του προγράμματος στο statement με label 101 (δηλ. εκτός του do loop) όταν φτάσουμε στο τέλος του αρχείου.

Οι υπόλοιπες εντολές είναι εφαρμογές των σχέσεων (8.31), (8.32), (8.33) και (8.34) στους τύπους (8.29) και ο αναγνώστης παρακαλείται να τις μελετήσει προσεκτικά. Επίσης χρησιμοποιείται και η ρουτίνα integrate για τα απαραίτητα ολοκληρώματα.

8.4 Αναρμονικός Ταλαντωτής - Ξανά...

Στο Κεφάλαιο 7 μελετήσαμε τον αρμονικό και αναρμονικό ταλαντωτή στην αναπαράσταση των ιδιοκαταστάσεων ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή $|n\rangle$. Στην παράγραφο αυτή θα επανεξετάσουμε το πρόβλημα στην αναπαράσταση θέσης. Θα υπολογίσουμε τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_{n,\lambda}(x)$ που διαγωνιοποιούν τη Χαμιλτονιανή (7.15) , είναι δηλ. λύσεις της εξίσωσης Schrödinger. Θέτοντας $L = \sqrt{\hbar/m\omega}$ στην (8.13) , η (8.12) γίνεται:

$$\psi''(x) = -(\epsilon - v(x))\psi(x) \tag{8.35}$$

με $v(x) = x^2 + 2\lambda x^4$. Για $\lambda = 0$ παίρνουμε τον αρμονικό ταλαντωτή με

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \mathrm{e}^{-x^2/2} H_n(x)\,, \epsilon_n = 2\left(n + \frac{1}{2}\right)\,, \tag{8.36}$$

όπου $H_n(x)$ είναι τα πολυώνυμα Hermite.

Για έλεγχο του προγράμματος και της ακρίβειας της διαδικασίας, ξεκινάμε από τον αρμονικό ταλαντωτή. Το δυναμικό και οι αρχικές συνθήκες προγραμματίζονται στο αρχείο `schHOC.f`. Οι αλλαγές που γίνονται αφορούν τις συναρτήσεις `V(x)`, `boundary(xmin, xmax, psixmin, psipxmin, psixmax, psipxmax)`:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     file: schHOC.f
C
      ...................
C
C     ----- potential:
      real*8 function V(x)
      implicit none
      real*8 x
      V = x*x
      end
C     ----- boundary conditions:
     subroutine boundary(xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax)
      implicit none
      real*8 xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax,V

      psixmin    =  dexp(-0.5D0*xmin*xmin)
      psipxmin   = -xmin*psixmin
```

```
      psixmax    =  dexp(-0.5D0*xmax*xmax)
      psipxmax   = -xmax*psixmax
      end
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
    ....................
```

όπου ο κώδικας παραλείπεται στις τελείες λόγω του ότι είναι ίδιος με την προηγούμενη παράγραφο. Οι αρχικές συνθήκες λαμβάνουν υπόψη τη γνωστή ασυμπτωτική συμπεριφορά των λύσεων της εξίσωσης Schrödinger[9] $\psi_0(x) \sim \mathrm{e}^{-x^2/2}$, $\psi_n'(x) \sim -x\psi_n(x)$. Δοκιμάστε να τις αλλάξετε για να δείτε αν υπάρχει επίδραση στα αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα δίνονται γραφικά στο Σχήμα 8.7 όπου πέρα από την ποιοτική συμφωνία, διαγράφεται και η απόκλιση από τις αναλυτικά υπολογισμένες τιμές (8.36) που είναι της τάξης 10^{-11}–10^{-7}. Οι τιμές των ενεργειών ϵ_n βρίσκονται σε συμφωνία με την (8.36) με σχετική ακρίβεια καλύτερη από 10^{-9} για $n \leq 14$.

Στη συνέχεια υπολογίζουμε τις τιμές των μέσων τιμών $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, Δx, Δp. Αυτές υπολογίζονται πολύ εύκολα από τις σχέσεις (7.4) , (7.8) . Βλέπουμε ότι $\langle x\rangle = \langle n|\,(a^\dagger + a)/\sqrt{2}\,|n\rangle = 0$, $\langle p\rangle = \langle n|\,i(a^\dagger - a)/\sqrt{2}\,|n\rangle = 0$, ενώ

$$\langle x^2\rangle = \langle p^2\rangle = \langle n|\,\frac{1}{2}(a^\dagger a + aa^\dagger)\,|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{8.37}$$

Το πρόγραμμα `observables.f` μας δίνει $\langle x\rangle = 0$ με ακρίβεια $\sim 10^{-6}$ και $\langle p\rangle = 0$ με ακρίβεια $\sim 10^{-11}$. Οι τιμές των $\langle x^2\rangle$, $\langle p^2\rangle$ δίνονται στον Πίνακα 8.2.

Στη συνέχεια επαναλαμβάνουμε τον υπολογισμό μας για τον αναρμονικό ταλαντωτή και για $\lambda = 0.5, 2.0$. Αυτό γίνεται με απλή μετατροπή στο αρχείο `schHOC.f` που αποθηκεύεται στο αρχείο `schUOC.f`. Απλά αλλάζουμε το δυναμικό σε:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     file: schUOC.f
C
      ..........................................
C     ----- potential:
      real*8 function V(x)
```

[9] Κανονικά $\psi_n(x) \sim x^n \mathrm{e}^{-x^2/2}$ το οποίο αγνοούμε και βρίσκουμε ότι δεν παίζει σημαντικό ρόλο στα τελικά αποτελέσματα για τα n που μελετάμε. Δοκιμάστε αν αυτό είναι αναγκαίο να το λάβουμε υπόψη για πολύ μεγαλύτερα n.

n	$\langle x^2 \rangle$	$\langle p^2 \rangle$	$\Delta x \cdot \Delta p$
0	0.500000000	0.4999977	0.4999989
1	1.500000284	1.4999883	1.4999943
2	2.499999747	2.4999711	2.4999854
3	3.499999676	3.4999441	3.4999719
4	4.499999607	4.4999082	4.4999539
5	5.499999520	5.4998633	5.4999314
6	6.499999060	6.4998098	6.4999044
7	7.499999642	7.4995484	7.4997740
8	8.499999715	8.4994203	8.4997100
9	9.499999837	9.4992762	9.4996380
10	10.500000012	10.4991160	10.4995580
11	11.499999542	11.4994042	11.4997019
12	12.499999610	12.4992961	12.4996479
13	13.499999705	13.4991791	13.4995894
14	14.499999835	14.4990529	14.4995264

Πίνακας 8.2: Οι αναμενόμενες τιμές των $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, $\Delta x \cdot \Delta p$ για τον απλό αρμονικό ταλαντωτή για τις καταστάσεις $|n\rangle$, $n = 0, \ldots, 14$.

```
implicit none
real*8 x, lambda
lambda = 2.0D0
V = x*x+2.0D0*lambda*x*x*x*x
end
.........................................
```

Οι κυματοσυναρτήσεις δείχνονται στο Σχήμα 8.8 όπου φαίνεται ότι η αύξηση του λ οδηγεί σε επί πλέον περιορισμό του σωματιδίου στο χώρο όπως αναμένεται. Στον Πίνακα 8.3 καταχωρούνται οι τιμές της ϵ_n για $n = 0, ..., 9$. Παρατηρείται η αύξηση των τιμών της ενέργειας για αυξανόμενο λ. Στον Πίνακα 8.4 καταχωρούνται οι αναμενόμενες τιμές των $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, $\Delta x \cdot \Delta p$ για τον αναρμονικό ταλαντωτή για τις καταστάσεις $|n\rangle$, $n = 0, \ldots, 9$. Παρατηρούμε τη μείωση της $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ και αύξηση $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$ καθώς αυξάνεται το λ. Το γινόμενο $\Delta x \cdot \Delta p$ φαίνεται να είναι πολύ κοντά στις τιμές που παίρνουμε από τον αρμονικό ταλαντωτή και για τις δύο τιμές του λ.

n	ϵ_n	$\epsilon_{n,\lambda=0.5}$	$\epsilon_{n,\lambda=2.0}$
0	1.0000	1.3924	1.9031
1	3.0000	4.6488	6.5857
2	5.0000	8.6550	12.6078
3	7.0000	13.1568	19.4546
4	9.0000	18.0576	26.9626
5	11.0000	23.2974	35.0283
6	13.0000	28.8353	43.5819
7	15.0000	34.6408	52.5723
8	17.0000	40.6904	61.9598
9	19.0000	46.9650	71.7129

Πίνακας 8.3: Οι τιμές της ενέργειας ϵ_n για τον αρμονικό ταλαντωτή καθώς και τον αναρμονικό ταλαντωτή για $\lambda = 0.5, 2.0$. Παρατηρείται η αύξηση των τιμών της ενέργειας για αυξανόμενο λ.

	$\lambda = 0.5$			$\lambda = 2.0$		
n	$\langle x^2 \rangle$	$\langle p^2 \rangle$	$\Delta x \cdot \Delta p$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle p^2 \rangle$	$\Delta x \cdot \Delta p$
0	0.3058	0.8263	0.5027	0.2122	1.1980	0.5042
1	0.8013	2.8321	1.5064	0.5408	4.2102	1.5089
2	1.1554	5.3848	2.4944	0.7612	8.1513	2.4909
3	1.4675	8.2819	3.4862	0.9582	12.6501	3.4816
4	1.7509	11.4545	4.4784	1.1370	17.5955	4.4728
5	2.0141	14.8599	5.4707	1.3029	22.9169	5.4643
6	2.2617	18.4691	6.4631	1.4590	28.5668	6.4560
7	2.4970	22.2607	7.4555	1.6074	34.5103	7.4478
8	2.7220	26.2184	8.4478	1.7492	40.7206	8.4397
9	2.9384	30.3289	9.4402	1.8856	47.1762	9.4316

Πίνακας 8.4: Οι αναμενόμενες τιμές των $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, $\Delta x \cdot \Delta p$ για τον αναρμονικό ταλαντωτή για τις καταστάσεις $|n\rangle$, $n = 0, \ldots, 9$. Παρατηρούμε τη μείωση της $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ και αύξηση της $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$ καθώς αυξάνεται το λ. Το γινόμενο $\Delta x \cdot \Delta p$ φαίνεται να είναι πολύ κοντά στις τιμές που παίρνουμε από τον αρμονικό ταλαντωτή και για τις δύο τιμές του λ.

8.5 Το Δυναμικό Lennard–Jones

Το δυναμικό Lennard–Jones είναι ένα απλό φαινομενολογικό μοντέλο για να περιγράψει την αλληλεπίδραση δύο ουδέτερων ατόμων σε ένα διατομικό μόριο. Αυτό δίνεται από

$$V(x) = 4V_0 \left\{ \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{6} \right\} . \tag{8.38}$$

Ο απωστικός όρος περιγράφει την άπωση επικάλυψης των ηλεκτρονικών νεφών κατά Pauli, ενώ ο ελκτικός όρος τη δύναμη Van der Waals. Επιλέγουμε $L = \sigma$ στην (8.13) και ορίζουμε $v_0 = 2m\sigma^2 V_0/\hbar^2$. Η (8.38) γίνεται

$$v(x) = 4v_0 \left\{ \left(\frac{1}{x}\right)^{12} - \left(\frac{1}{x}\right)^{6} \right\} , \tag{8.39}$$

ενώ οι υπολογιζόμενες ιδιοτιμές ϵ_n συνδέονται με την ενέργεια μέσω της σχέσης

$$\epsilon_n = 4v_0 \left(\frac{E_n}{V_0}\right) . \tag{8.40}$$

Το δυναμικό αναπαρίσταται γραφικά στο Σχήμα 8.5 για $v_0 = 250$. Το ελάχιστο του δυναμικού βρίσκεται στη θέση $x_m = 2^{1/6} \approx 1.12246$ και η τιμή του είναι $-v_0$. Ο προγραμματισμός του δυναμικού γίνεται στο αρχείο `schLJ.f`. Το κομμάτι του κώδικα που μεταβάλλουμε από τα προηγούμενα αρχεία δίνεται παρακάτω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C     file: schLJ.f (Lennard-Jones)
C
      ................................................
C     ----- potential:
      real*8 function V(x)
      implicit none
      real*8 x,V0

      V0 = 250.0D0
      V  = 4.0D0*V0*(1/x**12-1/x**6)

      end
C     ----- boundary conditions:
    subroutine boundary(xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax)
      implicit none
```

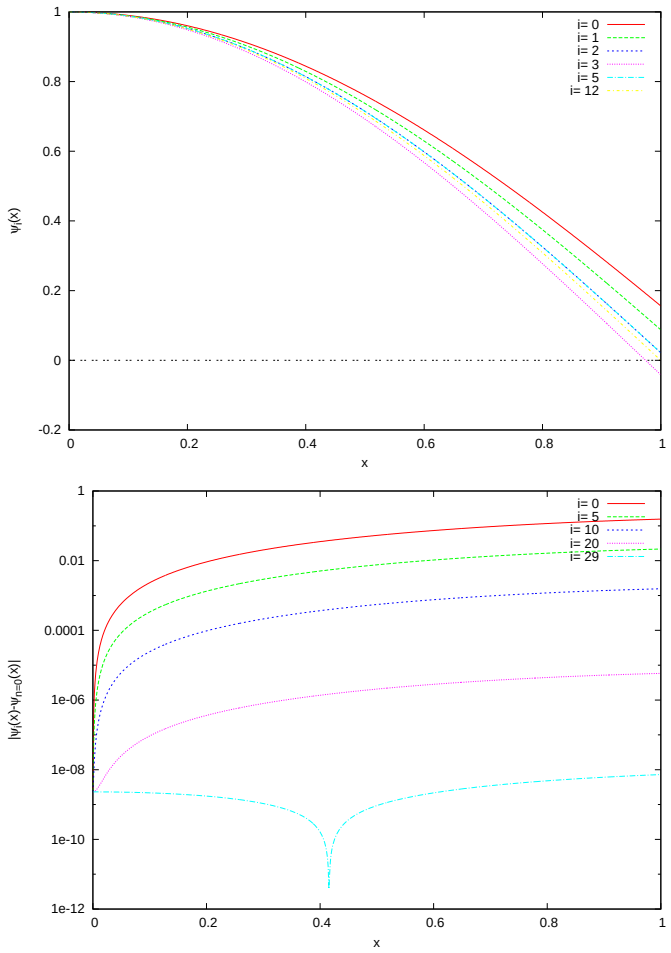
n	ϵ_n	$\langle x\rangle$	$\langle p\rangle$	$\langle x^2\rangle$	$\langle p^2\rangle$	Δx	Δp	$\Delta x \cdot \Delta p$
0	-173.637	1.186	1.0e-10	1.415	34.193	0.091	5.847	0.534
1	-70.069	1.364	6.0e-11	1.893	56.832	0.178	7.539	1.338
2	-18.191	1.699	-4.5e-08	2.971	39.480	0.291	6.283	1.826
3	-1.317	2.679	-2.6e-08	7.586	9.985	0.638	3.160	2.016

Πίνακας 8.5: Τα αποτελέσματα των μετρήσεων για το δυναμικό Lennard-Jones με $v_0 = 250$. Έχουμε 4 δέσμιες καταστάσεις.

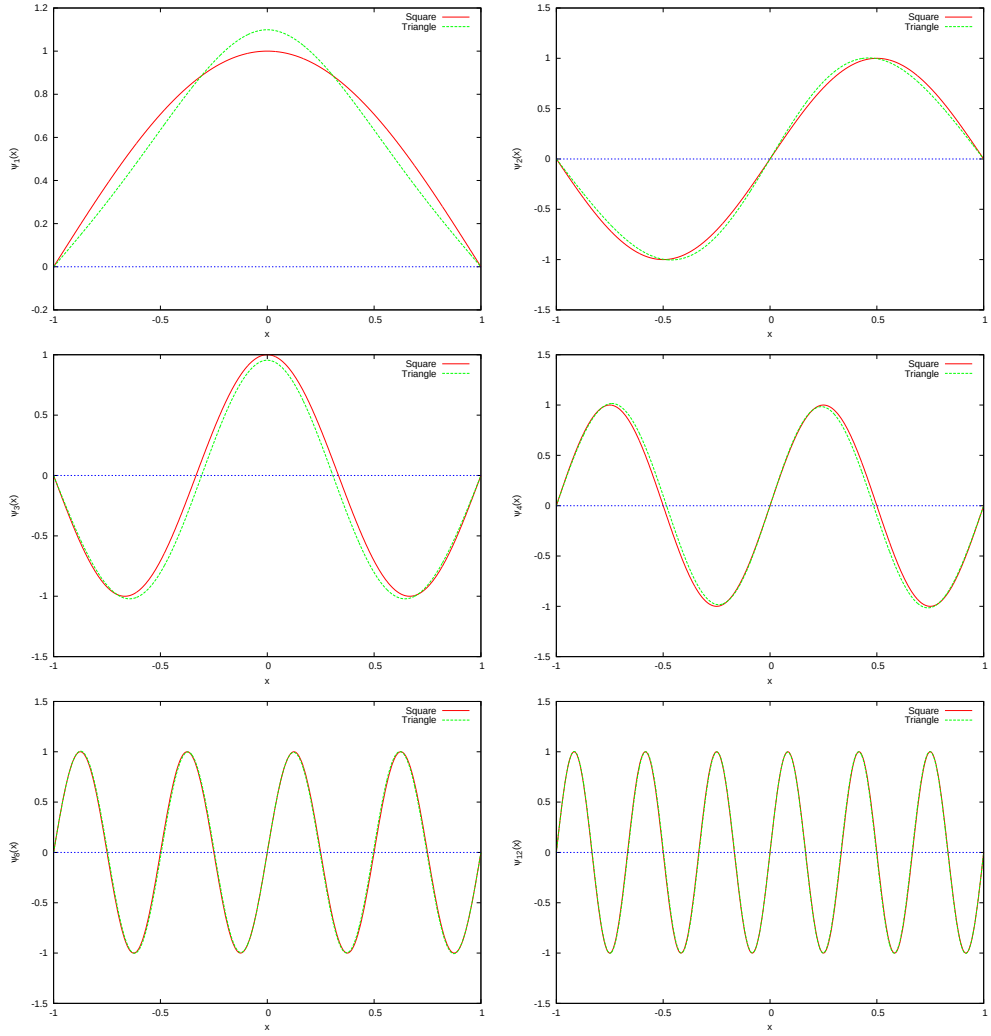
```
      real*8 xmin,xmax,psixmin,psipxmin,psixmax,psipxmax,V
      real*8 energy
      common/params/energy
C     ----- Initial values at xmin and xmax
      psixmin    =  dexp(-xmin*dsqrt(DABS(energy-V(xmin))))
      psipxmin   =  dsqrt(DABS(energy-V(xmin)))*psixmin
      psixmax    =  dexp(-xmax*dsqrt(DABS(energy-V(xmax))))
      psipxmax   = -dsqrt(DABS(energy-V(xmax)))*psixmax
      end
      ..........................................................
```

Για την ολοκλήρωση επιλέγουμε τις παραμέτρους $v_0 = 250$ και `xmin = 0.7`, `xmax = 4-10`. Τα αποτελέσματα δείχνονται γραφικά στο Σχήμα 8.9, όπου φαίνονται τα τέσσερα ενεργειακά επίπεδα των δέσμιων καταστάσεων μαζί με τις κυματοσυναρτήσεις τους. Αυτές είναι περιορισμένες μέσα στο πηγάδι του δυναμικού για τις δύο πρώτες στάθμες, ενώ αρχίζουν να "ξεχειλίζουν" για τις δύο τελευταίες. Στον Πίνακα 8.5 παραθέτουμε τις μετρήσεις μας. Παρατηρούμε ότι $\langle p\rangle = 0$ μέσα στα όρια της ακρίβειας που έχουμε θέσει, όπως περιμένουμε για πραγματικές, δέσμιες κυματοσυναρτήσεις[10].

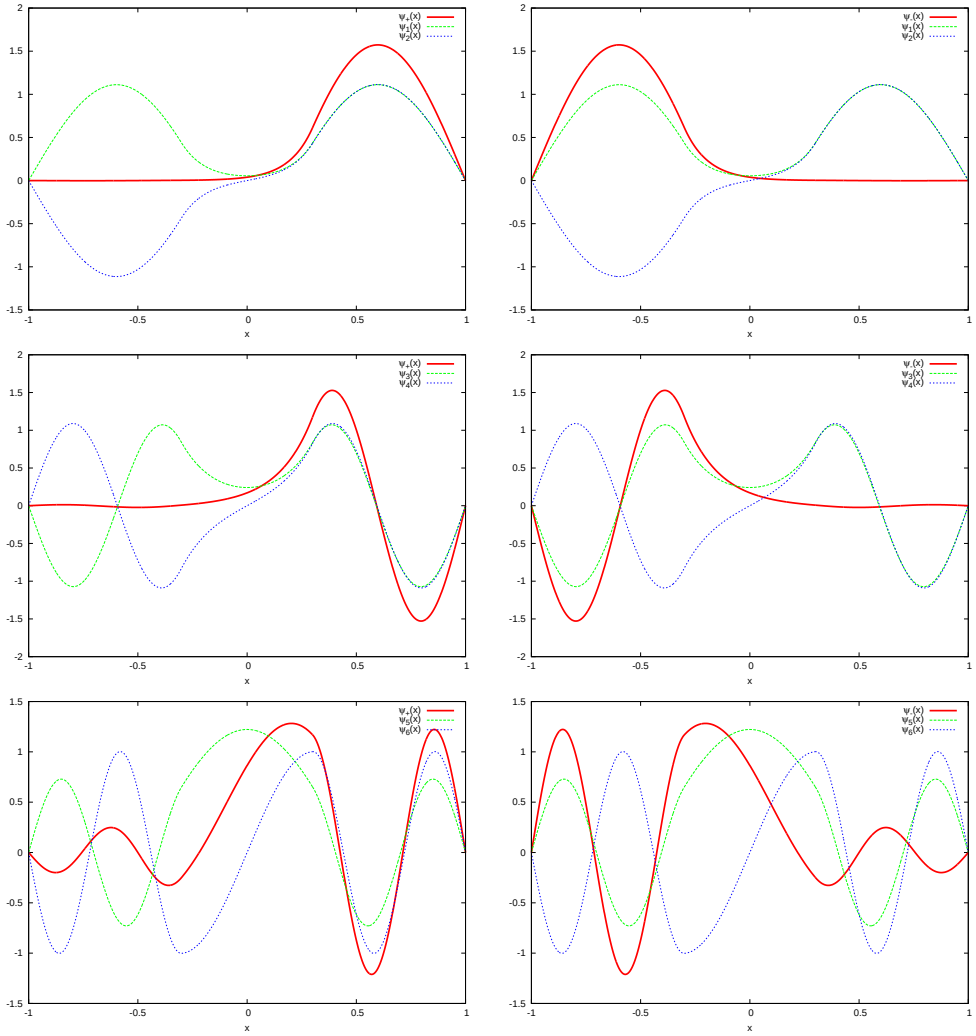
[10] Για $\psi(+\infty) = \psi(-\infty) = 0$ και $\psi^*(x) = \psi(x)$ έχουμε $i\langle p\rangle/\hbar = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)(d/dx)\psi(x)\,dx = -\int_{-\infty}^{+\infty}(d/dx)\psi(x)\psi(x)\,dx = 0$.



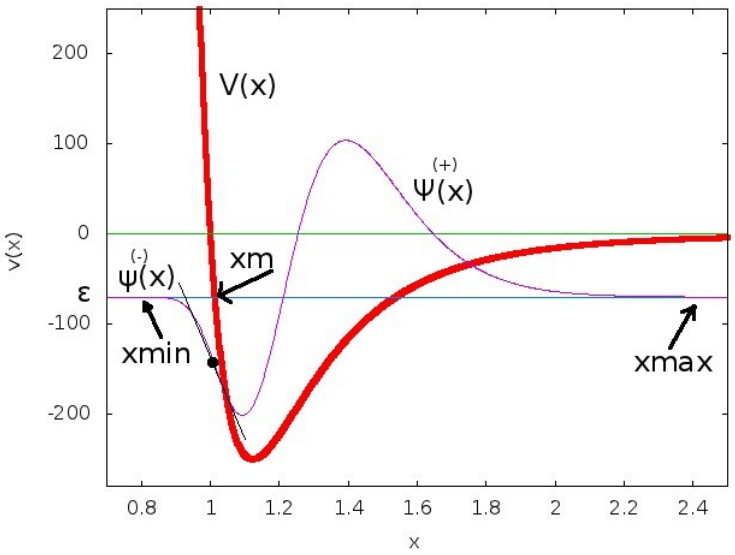
Σχήμα 8.2: Η διαδικασία σύγκλισης της λύσης $\psi_i(x)$ της (8.12) με το δυναμικό (8.15) σα συνάρτηση του αριθμού επαναλήψεων i στο πρόγραμμα `well.f`. Αρχικά επιλέγουμε `energy = 2.0` και θετική ομοτιμία `parity = 1`. Μετά από 29 επαναλήψεις, η λύση συγκλίνει στην θεμελιώδη κατάσταση $\psi_1(x) = \cos(\pi x/2)$ με ενέργεια $\epsilon = (\pi/2)^2$ με σχετική ακρίβεια $\sim 10^{-9}$. Στο κάτω σχήμα βλέπουμε (σε λογαριθμική κλίμακα) το σχετικό σφάλμα και τη μείωση του με τον αριθμό των επαναλήψεων. Η ενέργεια σε κάθε επανάληψη είναι για $i \equiv$`iter = 1,2,3,5,10,12,20` `energy = 2.4, 2.6, 2.4, 2.4625, 2.46875, 2.4673828125.`



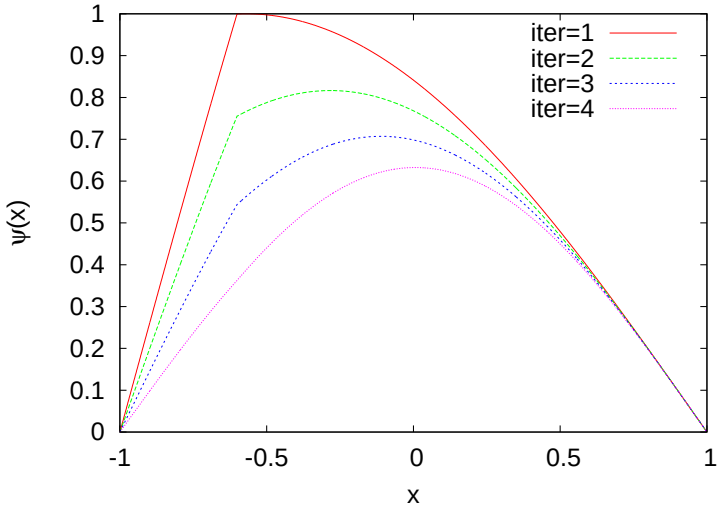
Σχήμα 8.3: Οι κυματοσυναρτήσεις των ενεργειακών ιδιοκαταστάσεων για $n = 1, 2, 3, 4, 8, 12$ για το απειρόβαθο τετραγωνικό και τριγωνικό δυναμικό των εξισώσεων (8.15) και (8.24) με $v_0 = 10$. Παρατηρούμε την επίδραση του τριγωνικού δυναμικού στις κυματοσυναρτήσεις μικρού n, ενώ για $n \geq 8$ η διάκριση γίνεται ολοένα και μικρότερη.



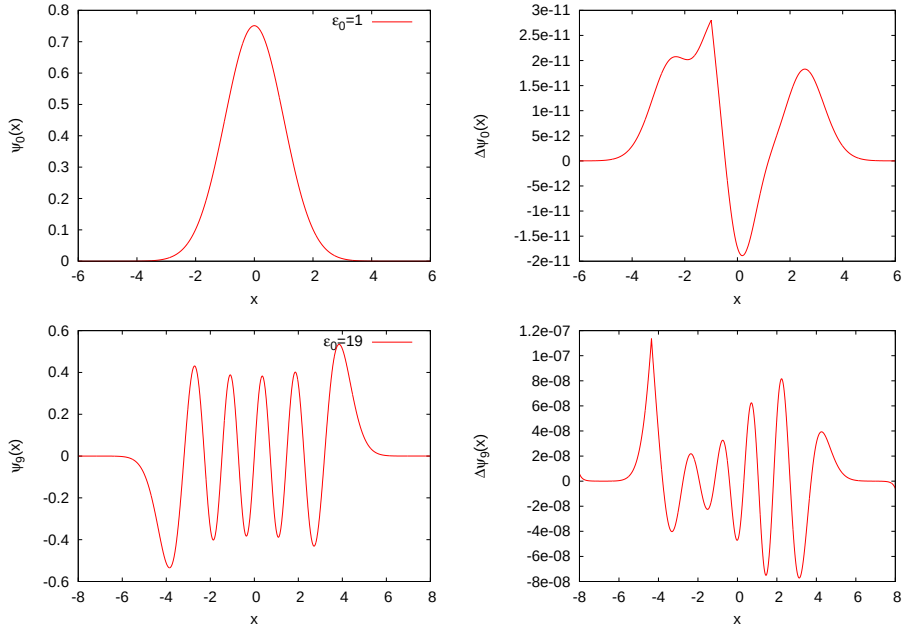
Σχήμα 8.4: Οι συναρτήσεις $\psi_{\pm}(x) = (1/\sqrt{2})(\psi_n(x) \pm \psi_{n+1}(x))$ για $n = 1, 3, 5$ του διπλού πηγαδιού δυναμικού (Εξ. (8.25) με $v_0 = 100, a = 0.3$) φαίνονται με έντονο χρώμα. Παρατηρούμε ότι στις καταστάσεις αυτές όσο πιο έντονος είναι ο προσεγγιστικός εκφυλισμός, τόσο εντονότερος είναι και ο εντοπισμός του σωματιδίου στο δεξί ή αριστερό μέρος του διπλού πηγαδιού. Με αχνότερο χρώμα δείχνονται οι κυματοσυναρτήσεις των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας για $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.



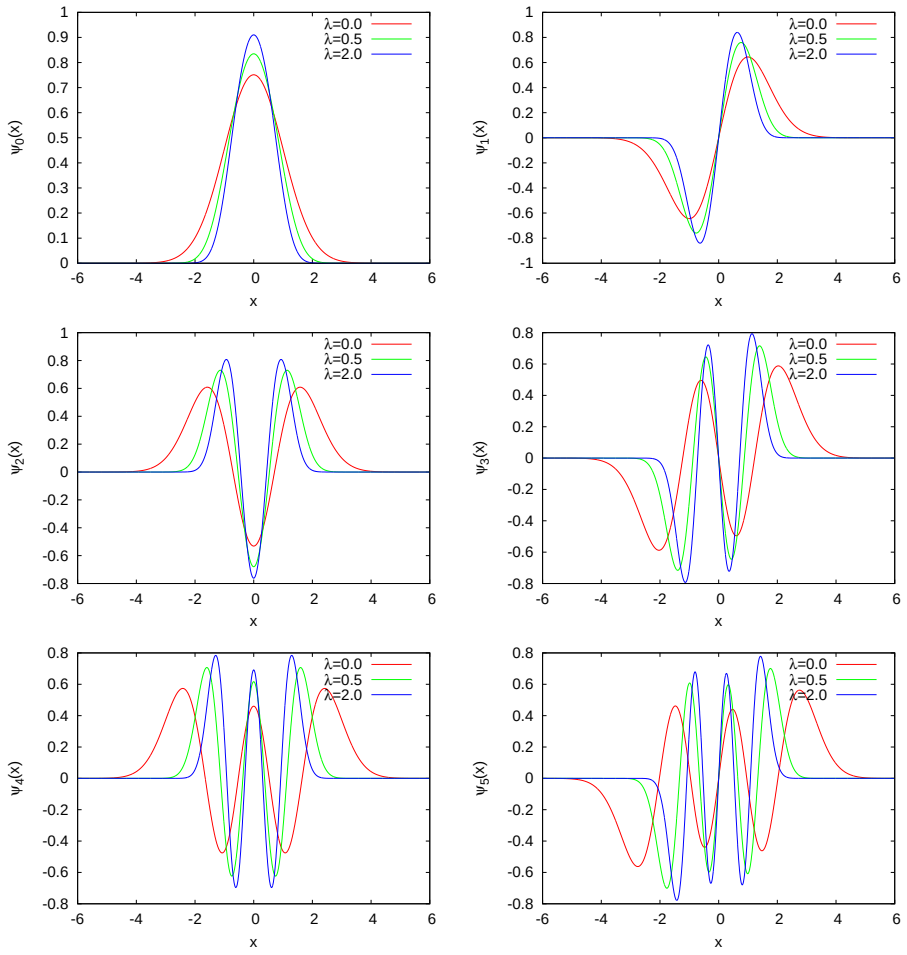
Σχήμα 8.5: Ολοκλήρωση της εξίσωσης Schrödinger σύμφωνα με τον αλγόριθμο της παραγράφου 8.2. Οι κυματοσυναρτήσεις και οι παράγωγοί τους ορίζονται να έχουν μικρές τιμές στις κλασικά απαγορευμένες τιμές του x `xmin` και `xmax`. Το σημείο x_m υπολογίζεται από τη σχέση $v(x_m) = \epsilon$. Οι κυματοσυναρτήσεις εξελίσσονται μέχρι το x_m σύμφωνα με τις (8.22) και παίρνουμε τις $\psi^{(+)}(x)$ και $\psi^{(-)}(x)$. Αφού ορίσουμε $\psi^{(+)}(x_m) = \psi^{(-)}(x_m)$ επανακανονικοποιώντας την $\psi^{(-)}(x)$, μεταβάλλουμε την ενέργεια μέχρι οι παράγωγοι $\psi^{(+)\prime}(x_m) \approx \psi^{(-)\prime}(x_m)$.



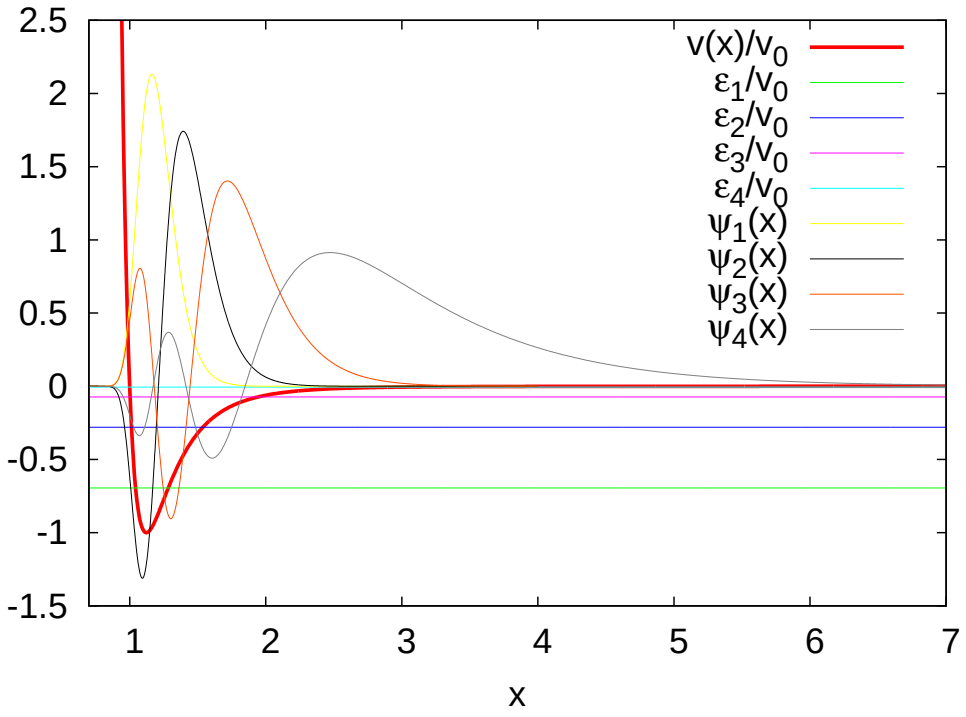
Σχήμα 8.6: Η διαδικασία σύγκλισης των λύσεων της εξίσωσης Schrödinger όπως περιγράφεται στη σελίδα 355 για τη θεμελιώδη κατάσταση στο άπειρο πηγάδι δυναμικού.



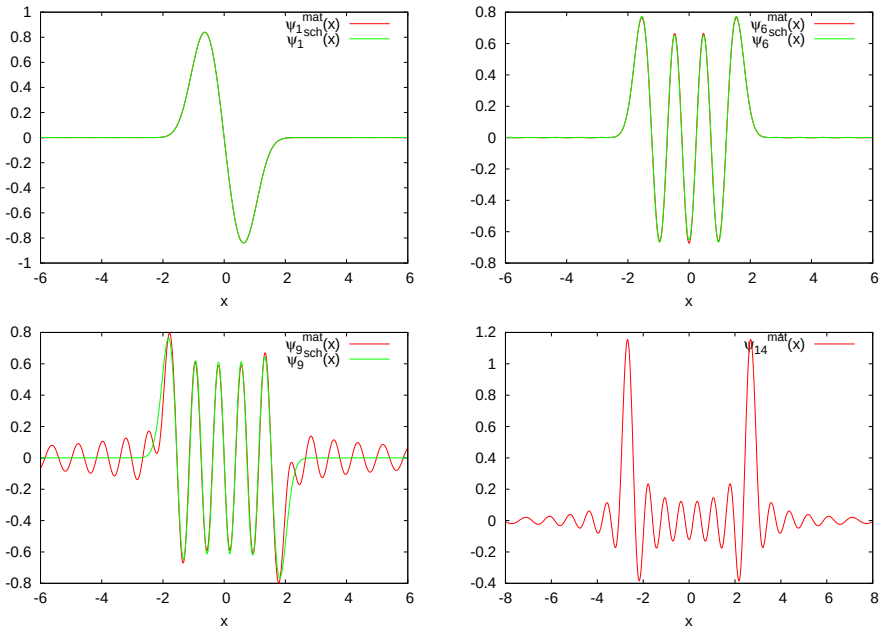
Σχήμα 8.7: Ο υπολογισμός των κυματοσυναρτήσεων $\psi_0(x)$, $\psi_9(x)$ από το πρόγραμμα `sch.f`, `schHOC.f`. Στα διαγράμματα δεξιά φαίνεται η διαφορά των τιμών τους από τις αναμενόμενες τιμές (8.36) .



Σχήμα 8.8: Οι κυματοσυναρτήσεις του αναρμονικού ταλαντωτή $\psi_{n,\lambda}(x)$ για $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ και $\lambda = 0.5, 2.0$ συγκρινόμενες με αυτές του αρμονικού ταλαντωτή. Φαίνεται ότι η αύξηση του λ οδηγεί σε περιορισμό του σωματιδίου στο χώρο.



Σχήμα 8.9: Οι τέσσερις δέσμιες καταστάσεις για το δυναμικό Lennard-Jones με $v_0 = 250$. Φαίνεται το δυναμικό $v(x)/v_0$ με παχιά κόκκινη γραμμή, τα ενεργειακά επίπεδα ϵ_n/v_0 και οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις.



Σχήμα 8.10: Σύγκριση των αποτελεσμάτων για τον υπολογισμό των κυματοσυναρτήσεων $\psi_{n,\lambda}(x)$ του αναρμονικού ταλαντωτή για $\lambda = 2.0$ με τις μεθόδους που περιγράφονται στην άσκηση 12. Οι κυματοσυναρτήσεις $\psi^{\text{sch}}(x)$ αναφέρονται στις $\psi_{n,\lambda}(x)$ που υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τις μεθόδους που περιγράφονται στο κεφάλαιο αυτό. Οι κυματοσυναρτήσεις $\psi^{\text{mat}}(x)$ αναφέρονται στις $\psi_{n,\lambda}(x)$ που υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τις μεθόδους που περιγράφονται στο Κεφάλαιο 7 με διάσταση χώρου Hilbert $N = 40$. Παρατηρούμε ότι οι τελευταίες παρουσιάζουν αποκλίσεις για μεγάλα x. Αυτό οφείλεται στο ότι στα πλάτη $\psi_{n,\lambda}(x) = \langle x|n,\lambda\rangle$ για μεγάλα x συνεισφέρουν καταστάσεις $|m\rangle$ μεγάλης ενέργειας (γιατί;).

8.6 Ασκήσεις

8.1 Προσθέστε τον κατάλληλο κώδικα στο πρόγραμμα `well.f` έτσι ώστε η τελική κυματοσυνάρτηση να τυπώνεται στο `psi.dat` σωστά κανονικοποιημένη. Για το ολοκλήρωμα $\int_{-1}^{1} \psi(x)\psi(x)\,dx$ χρησιμοποιήστε τον κανόνα του Simpson:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= (h/3)\,(f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+\ldots \\ &\quad +2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n))\end{aligned}$$

όπου το διάστημα $[a,b]$ έχει χωριστεί σε διαστήματα πλάτους h από n σημεία $x_0=a, x_1, x_2, \ldots, x_n=b$ που το n είναι άρτιος αριθμός.

8.2 Προσθέστε τον κατάλληλο κώδικα στο πρόγραμμα `well.f` έτσι ώστε να υπολογίζετε τον αριθμό των σημείων μηδενισμού της κυματοσυνάρτησης. Από αυτά, το πρόγραμμα να τυπώνει το ενεργειακό επίπεδο n της υπολογιζόμενης κυματοσυνάρτησης $\psi_n(x)$.

8.3 Υπολογίστε τις κυματοσυναρτήσεις των ενεργειακών ιδιοκαταστάσεων στο δυναμικό (8.25) με $v_0<0$. Αυτό είναι το πρόβλημα του πεπερασμένου πηγαδιού δυναμικού. Λύστε το για $v_0=-100$ και $a=0.3$. Πόσες δέσμιες καταστάσεις έχετε μέσα στο πεπερασμένο πηγάδι; Στη συνέχεια μελετήστε την επίδραση του τοίχους πάνω στις λύσεις. Εισάγετε την παράμετρο b έτσι ώστε $v(x\geq b)=+\infty$ και να μελετήσετε την επίδραση του τείχους πάνω στις λύσεις. Θέστε $b=0.35, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$ και υπολογίστε τη μεταβολή της ενέργειας στις δύο πρώτες ενεργειακές στάθμες. Εκτιμήστε την ακρίβεια επιτυχίας της μεθόδου σας. Στη συνέχεια μειώστε την τιμή του $|v_0|$ μέχρι να εξαφανιστεί η δέσμια κατάσταση μέσα στο πεπερασμένο πηγάδι. Ποια είναι η σχέση μεταξύ το a και v_0 όταν αυτό συμβαίνει; Συγκρίνετε με τη θεωρητικά αναμενόμενη σχέση που μάθατε στο μάθημα της κβαντομηχανικής.
Υπόδειξη: Για τις μεγαλύτερες τιμές του b να αυξήσετε αρκετά την `STEPS > 1000` και αν δεν πετύχετε σύγκλιση να μειώσετε την `epsilon`.

8.4 Στο διπλό πηγάδι δυναμικού βάλτε $v_0=1000, 5000$. Παρατηρήστε τον (σχεδόν) εκφυλισμό των καταστάσεων και παραστήστε γραφικά τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_{\pm,n}=(1/\sqrt{2})(\psi_n(x)\pm\psi_{n+1}(x))$, όπου n περιττός. Συγκρίνετε με τις αντίστοιχες ενεργειακές στάθμες και

κυματοσυναρτήσεις του απειρόβαθου πηγαδιού. Δοκιμάστε πόσο μεγάλο μπορεί να γίνει το v_0 ώστε να μην μπορείτε πια να λύσετε το πρόβλημα με ανεκτή ακρίβεια.
Υπόδειξη: Για μεγάλα v_0 έχουμε αύξηση αριθμητικής δυσκολίας. Για $|x| < a$ η κυματοσυνάρτηση είναι σχεδόν μηδέν, και από αυτή θα πρέπει να προκύψει η μη τετριμμένη κυματοσυνάρτηση για $a < |x| < 1$. Άρα η ακρίβεια θα μειώνεται και θα πρέπει να αυξήσουμε το `epsilon` μέσα στον κώδικά ώστε να πετύχουμε σύγκλιση αρκετά γρήγορα.

8.5 Επαναλάβατε τις ασκήσεις 3 και 4 χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα `sch.f`. Συγκρίνετε τα αποτελέσματά σας.

8.6 Μελετήστε τις δέσμιες καταστάσεις στα δυναμικά

$$v(x) = \begin{cases} 0 & a < |x| \\ -V_0 & b < |x| < a \\ -V_1 & |x| < b \end{cases}$$

για $a = 1, b = 0.2, V_0 = 100, V_1 = 0, 50$ και

$$v(x) = \begin{cases} V_1 & x < 0 \\ -V_0 & 0 < x < a \\ 0 & a < x \end{cases}$$

για $a = 1, V_0 = 100, V_1 = +\infty, 10, 100$ και

$$v(x) = \begin{cases} V_1 & a < |x| \\ -V_0 & b < |x| < a \\ 0 & c < |x| < b \\ -V_0 & |x| < c \end{cases}$$

για $a = 1, b = 0.7, c = 0.6, 0.3, V_0 = 100, V_1 = +\infty, 10, 0$. Για κάθε περίπτωση, υπολογίστε τα $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, Δx, Δp, $\Delta x \cdot \Delta p$.

8.7 Γράψτε πρόγραμμα που από την κυματοσυνάρτηση που δίνει το πρόγραμμα `sch.f`, να υπολογίζει την πιθανότητα το σωμάτιο να βρίσκεται μέσα σε ένα πεπερασμένο διάστημα $[x_1, x_2]$. Στα αποτελέσματα που πήρατε από την προηγούμενη άσκηση, προσδιορίστε τα διαστήματα $[-x_1, x_1]$ μέσα στα οποία έχουμε πιθανότητα 1/3 να βρούμε το σωμάτιο.

8.8 Συμπληρώστε τους Πίνακες 8.3 και 8.4 για $\lambda = 0.2, 0.7, 1.0, 1.3, 1.6, 2.5, 3.0$ και παραστήστε γραφικά κάθε αναμενόμενη τιμή συναρτήσει του λ.

8.9 Θεωρήστε το σωμάτιο που κινείται μέσα στο δυναμικό

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\lambda(\lambda-1)\left\{\frac{1}{2} - \frac{1}{\cosh^2(\alpha x)}\right\} .$$

Το ενεργειακό φάσμα δίνεται από τη σχέση

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\left\{\frac{\lambda(\lambda-1)}{2} - (\lambda-1-n)^2\right\}$$

για τις τιμές του $n = 0, 1, 2, \ldots$ για τις οποίες $E_n > V_{\min}$. Υπολογίστε αριθμητικά τις ενεργειακές ιδιοτιμές ϵ_n των δέσμιων καταστάσεων θέτοντας $L = 1/\alpha$ στην (8.13) και $\lambda = 4$. Κάνετε τις γραφικές παραστάσεις του δυναμικού $v(x)$ και των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων. Υπολογίστε τις μέσες τιμές της θέσης, ορμής, αβεβαιότητες στη θέση, ορμή και το γινόμενό τους. Επαναλάβατε για $\lambda = 2, 6, 8, 10$.

8.10 Να γράψετε πρόγραμμα που από την κυματοσυνάρτηση να υπολογίζει τη μέση τιμή της ενέργειας

$$\langle\hat{H}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x)\,dx ,$$

υποθέτοντας πως η $\psi(x)$ είναι πραγματική. Στη συνέχεια να υπολογίσετε τις $\psi_n(x)$ για τον αρμονικό ταλαντωτή για $n = 1, \ldots, 10$ και να δείξετε (αριθμητικά) ότι $\langle\hat{H}\rangle_n = E_n$.

8.11 Θεωρήστε το σωμάτιο που κινείται μέσα στο δυναμικό Morse

$$V(x) = D_e\left\{\left(1 - \mathrm{e}^{-a(r-r_e)}\right)^2 - 1\right\} .$$

Υπολογίστε το φάσμα των δέσμιων καταστάσεων. Επιλέξτε $L = 1/a$, $x = ar$, $x_e = ar_e$, $\lambda^2 = 2mD_e/a^2\hbar^2$ και πάρτε

$$v(x) = \lambda^2\left(\mathrm{e}^{-2(x-x_e)} - 2\mathrm{e}^{-(x-x_e)}\right) .$$

Συγκρίνετε με τις αναλυτικά υπολογισμένες λύσεις

$$\epsilon_n = \left(\lambda - n - \frac{1}{2}\right)^2$$

$$\psi_n(z) = N_n z^{\lambda-n-1/2}\mathrm{e}^{-z/2}L_n^{2\lambda-2n-1}(z)$$

με $z = 2\lambda \mathrm{e}^{-(x-x_e)}$, $N_n = n!\sqrt{(2\lambda - 2n - 1)/(\Gamma(n+1)\Gamma(2\lambda - n))}$, και $L_n^\alpha(z)$ είναι πολυώνυμο Laguerre που δίνεται από τη σχέση $L_n^\alpha(z) = (z^{-\alpha}\mathrm{e}^z/n!)(d^n/dz^n)(z^{n+\alpha}\mathrm{e}^{-z}) = (\Gamma(\alpha+2)/(\Gamma(n+2)\Gamma(\alpha-n+2))_1F_1(-n, \alpha+1, z)$. Ενδεικτικά μπορείτε να πάρετε $\lambda = 4$, $x_e = 1$. Για κάθε περίπτωση υπολογίστε τα $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, Δx, Δp, $\Delta x \cdot \Delta p$.

8.12 Να υπολογίσετε τις κυματοσυναρτήσεις του αναρμονικού ταλαντωτή για $\lambda = 2.0$ και $n = 0, \ldots, 15$. Στη συνέχεια να υπολογίσετε τις κυματοσυναρτήσεις που δίνει το πρόγραμμα `anharmonic.f` από το Κεφάλαιο 7 για $N = 15, 40, 100$ και να τις συγκρίνετε με αυτές που υπολογίσατε προηγουμένως.
Υπόδειξη: Να γράψετε πρόγραμμα που να υπολογίζει τις ιδιοσυναρτήσεις ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-x^2/2}H_n(x)$$

όπου τα πολυώνυμα Hermite ικανοποιούν τις σχέσεις

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x\,.$$

Το πρόγραμμα `anharmonic.f` υπολογίζει τις ιδιοκαταστάσεις του αναρμονικού ταλαντωτή

$$|\psi_{n,\lambda}\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} \mathtt{H(m+1, n+1)}\,|\psi_m\rangle$$

βάζοντας τους γραμμικούς συντελεστές στα στοιχεία του πίνακα `H(N,N)`. Για τις κυματοσυναρτήσεις τους $\psi_{n,\lambda}(x)$, $\psi_n(x)$ ισχύει η ίδια σχέση. Από τις $\psi_n(x)$ και `H(i,j)` υπολογίστε τις $\psi_{n,\lambda}(x)$ για $-8 < x < 8$ για κάθε N και μελετήστε την ακρίβεια υπολογισμού. Για ποιες τιμές του x η ακρίβεια δεν είναι καλή; Θυμηθείτε ότι για μεγάλα x οι καταστάσεις μεγάλης ενέργειες πρέπει να παίζουν σημαντικότερο ρόλο από ότι για x μικρά. Το Σχήμα 8.10 μπορεί να σας βοηθήσει.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 9

Εξίσωση Διάχυσης στη Μία Διάσταση

9.1 Εισαγωγή

Η εξίσωση διάχυσης είναι στενά συνδεδεμένη με την τυχαία διαδρομή ενός τυχαίου περιπατητή (random walker). Ας υποθέσουμε ότι μελετάμε την κίνηση ενός τέτοιου σωμάτιου πάνω στην ευθεία ("μία διάσταση"). Η διαδικασία της κίνησης είναι στοχαστική και η συνάρτηση ("διαδότης")

$$K(x, x_0; t) \tag{9.1}$$

ερμηνεύεται ως η πυκνότητα πιθανότητας να παρατηρηθεί το σωμάτιο στη θέση x αν τη χρονική στιγμή $t = 0$ το σωμάτιο βρίσκεται στη θέση x_0. Η εξίσωση που καθορίζει το $K(x, x_0; t)$ είναι

$$\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial t} = D \, \frac{\partial^2 K(x, x_0; t)}{\partial x^2} \tag{9.2}$$

που είναι η εξίσωση διάχυσης. Ο συντελεστής διάχυσης D μπορεί να καθοριστεί από τις λεπτομέρειες του συστήματος που μελετάμε. Για την κίνηση Brown ενός σωματιδίου σκόνης μέσα σε ένα υγρό, το οποίο κινείται με την επίδραση των τυχαίων θερμικών κρούσεων με τα μόρια του υγρού παίρνουμε $D = T/\gamma$, όπου T είναι η απόλυτη θερμοκρασία του υγρού και γ ο συντελεστής τριβής του σωματιδίου μέσα στο υγρό.

Συνήθως επιλέγουμε για αρχικές συνθήκες ($t = 0$) το σωμάτιο να είναι εντοπισμένο σε ένα σημείο x_0, δηλ.[1]

$$K(x, x_0; 0) = \delta(x - x_0) \tag{9.3}$$

[1]Θυμίζουμε ότι $\delta(x - x_0)$ είναι το περίφημο δέλτα του Dirac. Ορίζεται από τη σχέση $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)\, dx = 1$ και για οποιαδήποτε συνάρτηση $f(x)$ έχουμε $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x -$

Η ερμηνεία της $K(x, x_0; t)$ σα συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας συνεπάγεται ότι *για κάθε* t θα πρέπει να έχουμε[2]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t)\, dx = 1\,. \tag{9.4}$$

Αυτή η σχέση δεν είναι προφανές ότι μπορεί να ισχύει για κάθε χρονική στιγμή. Ακόμα και αν την επιβάλλουμε για $t = 0$, η χρονική εξέλιξη που καθορίζεται από την (9.2) μπορεί να την αλλάξει σε μεγαλύτερους χρόνους.

Αυτό είναι εύκολο να αναλυθεί. Αν επιβάλλουμε την (9.4) όταν $t = 0$, η συνθήκη θα ισχύει για κάθε χρονική στιγμή αν

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t)dx = 0\,. \tag{9.5}$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial K(x,x_0;t)}{\partial t}dx$ και ότι $\frac{\partial K(x,x_0;t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 K(x,x_0;t)}{\partial x^2}$ παίρνουμε

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t)dx &= D\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x}\right) dx \\ &= D\,\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x}\bigg|_{x\to+\infty} - D\,\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x}\bigg|_{x\to-\infty}\end{aligned} \tag{9.6}$$

Η παραπάνω σχέση μας λέει πως για συναρτήσεις που το δεξί μέλος μηδενίζεται, η συνθήκη κανονικοποίησης μπορεί να επιβληθεί για όλες τις χρονικές στιγμές $t > 0$.

Η προσεκτική ανάλυση της εξίσωσης (9.2) δίνει ότι, για μικρούς χρόνους, η ασυμπτωτική συμπεριφορά του $K(x, x_0; t)$ είναι

$$K(x, x_0; t) \sim \frac{\mathrm{e}^{-\frac{|x-x_0|^2}{4Dt}}}{t^{d/2}} \sum_{i=0}^{\infty} a_i(x, x_0)t^i\,. \tag{9.7}$$

Η σχέση αυτή δείχνει πως η διάχυση είναι ισότροπη (ίδια προς όλες τις κατευθύνσεις) και η πιθανότητα ανίχνευσης ελαττώνεται δραστικά με την απόσταση από την αρχική θέση του σωματιδίου. Αυτή η σχέση

$x_0)\, dx = f(x_0)$. Μπορεί κανείς να τη φανταστεί σα μια συνάρτηση που είναι πρακτικά μηδέν παντού, εκτός από μια απειροστή περιοχή γύρω από το x_0.

[2]Εναλλακτικά, αν η $K(x, x_0; t)$ δίνει λ.χ. την πυκνότητα μάζας μιας σταγόνας μελανιού μάζας m_{ink} που διαχέεται μέσα σε ένα διαφανές υγρό, θα έχουμε $\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t)\, dx = m_{ink}$ και $K(x, x_0; 0) = m_{ink}\delta(x - x_0)$.

δεν μπορεί να ισχύει για πάντα, αφού για αρκετά μεγάλους χρόνους το σωμάτιο κατανέμεται ομοιόμορφα μέσα στο χώρο[3].

Η πιθανότητα επιστροφής του σωματιδίου στην αρχική του θέση ορίζεται να είναι

$$P_R(t) = K(x_0, x_0; t) \sim \frac{1}{t^{d/2}} \sum_{i=0}^{\infty} a_i(x_0, x_0) t^i \tag{9.8}$$

που ορίζει τη φασματική διάσταση του χώρου.

Η μέση τιμή του τετραγώνου της απόστασης που βρίσκεται το σωματίδιο σε χρόνο t είναι εύκολο να υπολογιστεί[4]

$$\langle r^2 \rangle = \langle (x - x_0)^2 \rangle (t) = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_0)^2 K(x, x_0; t)\, dx \sim 2Dt\,. \tag{9.9}$$

Η τελευταία σχέση είναι πολύ σημαντική. Μας λέει πως η κίνηση του τυχαίου περιπατητή (κίνηση Brown) δεν μπορεί να έχει κλασική περιγραφή αλλά μόνο στοχαστική: Για ένα κλασικό σωμάτιο που κινείται πάνω σε μια ομαλή τροχιά $x - x_0 \sim vt$ άρα $r^2 \sim t^2$.

Στα επόμενα κεφάλαια, για απλότητα παίρνουμε[5] $D = 1$ και ορίζουμε

$$u(x, t) \equiv K(x - x_0, x_0; t)\,. \tag{9.10}$$

9.2 Απαγωγή Θερμότητας σε μια Λεπτή Ραβδο

Έστω μια λεπτή ευθύγραμμη ράβδος μήκους L και $T(x, t)$ η κατανομή της θερμοκρασίας της τη χρονική στιγμή t και έστω ότι τα άκρα της τα κρατάμε σε σταθερή θερμοκρασία $T(0, t) = T(L, t) = T_0$. Αν η αρχική κατανομή της θερμοκρασίας είναι $T(x, 0)$ η θερμοκρασία σε κάθε άλλη χρονική στιγμή προσδιορίζεται από την εξίσωση διάχυσης

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} \tag{9.11}$$

όπου $\alpha = k/(c_p \rho)$ ο θερμικός συντελεστής διάχυσης (thermal diffusivity), k η θερμική αγωγιμότητα , ρ η πυκνότητα και c_p η ειδική θερμότητα της ράβδου.

[3] Θυμηθείτε την αναλογία με τη σταγόνα μελανιού που διαχέεται μέσα σε ένα ποτήρι νερό και μετά από αρκετό χρόνο έχει διαχυθεί ομοιόμορφα μέσα στο νερό.

[4] $\int_0^\infty dr\, r^n \mathrm{e}^{-r^2/4Dt} = 2^n \Gamma(\frac{n+1}{2})(Dt)^{\frac{n+1}{2}}$.

[5] Αυτό σύμφωνα με την (9.2) αντιστοιχεί στο να πάρουμε $t \to Dt$.

Ορίζουμε

$$u(x,t) = \frac{T(xL, \frac{L^2}{\alpha}t) - T_0}{T_0}\,, \tag{9.12}$$

όπου $x \in [0,1]$. Με τον ορισμό αυτό, η συνάρτηση $u(x,t)$ είναι καθαρός αριθμός (αδιάστατη) εκφράζει το κλάσμα της διαφοράς θερμοκρασίας σε σχέση με αυτής των άκρων της ράβδου και

$$u(0,t) = u(1,t) = 0\,. \tag{9.13}$$

Αυτές λέγονται συνοριακές συνθήκες τύπου Dirichlet[6]

Η (9.11) γίνεται

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \tag{9.14}$$

Η σχέση (9.6) γινεται

$$\frac{d}{dt}\int_0^1 u(x,t)dx = \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=1} - \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=0} \tag{9.15}$$

Η παραπάνω σχέση δεν μπορεί να δίνει πάντα 0 λόγω των συνοριακών συνθηκών (9.13) . Αυτό μπορούμε να το δούμε με ένα παράδειγμα. Έστω

$$u(x,0) = \sin(\pi x)\,, \tag{9.16}$$

τότε μπορείτε εύκολα να επιβεβαιώσετε ότι ικανοποιούνται οι απαιτούμενες συνοριακές συνθήκες και ότι η συνάρτηση

$$u(x,t) = \sin(\pi x)\mathrm{e}^{-\pi^2 t}\,, \tag{9.17}$$

είναι η ζητούμενη λύση της εξίσωσης διάχυσης που ικανοποιεί επίσης της συνοριακές συνθήκες. Είναι εύκολο να διαπιστώσετε ότι

$$\int_0^1 u(x,t)dx = \frac{2}{\pi}\mathrm{e}^{-\pi^2 t}$$

φθίνει εκθετικά γρήγορα στο μηδέν με το χρόνο και ότι

$$\frac{d}{dt}\int_0^1 u(x,t)dx = -2\pi\mathrm{e}^{-\pi^2 t}$$

σε συμφωνία με τις σχέσεις (9.15) .

Η εκθετική πτώση του μέτρου της $u(x,t)$ είναι σε συμφωνία με την φυσική απαίτηση ότι η ράβδος σε αρκετά μεγάλο χρόνο θα έχει ομοιόμορφη θερμοκρασία, ίση με αυτή που επιβάλαμε στα άκρα της ($\lim_{t\to+\infty} u(x,t) = 0$).

[6] Αν προσδιορίζαμε τις παραγώγους $\partial u/\partial x$ στα άκρα (λ.χ. ταλάντωση ελεύθερης ράβδου) θα είχαμε συνοριακές συνθήκες τύπου Neumann.

9.3 Διακριτοποίηση

Η αριθμητική λύση της εξίσωσης (9.14) θα αναζητηθεί στο διάστημα $x \in [0,1]$ και $t \in [0,t_f]$. Το πρόβλημα πρέπει να οριστεί πάνω σε ένα διακριτό πλέγμα και η διαφορική εξίσωση να προσεγγιστεί από αλγεβρικές εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών.

Το πλέγμα ορίζεται από N_x χωρικά σημεία $x_i \in [0,1]$

$$x_i = 0 + (i-1)\Delta x \quad i = 1, \ldots, N_x \,, \tag{9.18}$$

όπου τα $N_x - 1$ διαστήματα έχουν σταθερό πλάτος

$$\Delta x = \frac{1-0}{N_x - 1} \,, \tag{9.19}$$

και από N_t χρονικά πλεγματικά σημεία $t_j \in [0,t_f]$

$$t_j = 0 + (j-1)\Delta t \quad j = 1, \ldots, N_t \,, \tag{9.20}$$

όπου τα $N_t - 1$ διαστήματα έχουν σταθερό πλάτος

$$\Delta t = \frac{t_f - 1}{N_t - 1} \,. \tag{9.21}$$

Σημειώνουμε ότι τα άκρα των διαστημάτων αντιστοιχούν στα

$$x_1 = 0 \,, \quad x_{N_x} = 1 \,, \quad t_1 = 0 \,, \quad t_{N_t} = t_f \,. \tag{9.22}$$

Η συνάρτηση $u(x,t)$ προσεγγίζεται από τις τιμές της πάνω στο διακριτό $N_x \times N_t$ πλέγμα

$$u_{i,j} \equiv u(x_i, t_j) \,. \tag{9.23}$$

Οι παράγωγοι διακριτοποιούνται σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \approx \frac{u(x_i, t_j + \Delta t) - u(x_i, t_j)}{\Delta t} \equiv \frac{1}{\Delta t} \left(u_{i,j+1} - u_{i,j} \right) \,, \tag{9.24}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} &\approx \frac{u(x_i + \Delta x, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i - \Delta x, t_j)}{(\Delta x)^2} \\ &\equiv \frac{1}{(\Delta x)^2} \left(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j} \right) \,. \end{aligned} \tag{9.25}$$

Εξισώνοντας τα δύο μέλη των παραπάνω σχέσεων σύμφωνα με την (9.14) , παίρνουμε τη δυναμική εξέλιξη της $u_{i,j}$ στο χρόνο

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j} \right) \,. \tag{9.26}$$

Αυτή είναι μια επαγωγική σχέση ενός βήματος ως προς το χρόνο. Αυτό είναι πολύ σημαντικό γιατί δε χρειάζεται στο πρόγραμμα να αποθηκεύσουμε στη μνήμη τις τιμές $u_{i,j}$ για κάθε j

Ο δεύτερος όρος της "δεύτερης παραγώγου" στην (9.26) περιέχει μόνο τους πλησιέστερους γείτονες $u_{i\pm1,j}$ κάθε πλεγματικού σημείου $u_{i,j}$ μιας χρονικής φέτας t_j του πλέγματος, άρα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για κάθε $i = 2, \ldots, N_x - 1$. Για τα σημεία $i = 1$ και $i = N_x$ δε χρειάζεται να χρησιμοποιηθούν οι σχέσεις (9.26) αφού κρατάμε τις τιμές $u_{1,j} = u_{N_x,j} = 0$ αμετάβλητες.

Τέλος η παράμετρος

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \tag{9.27}$$

είναι αυτή που καθορίζει τη χρονική εξέλιξη στον αλγόριθμο. Ονομάζεται παράμετρος του Courant και για να έχουμε χρονική εξέλιξη χωρίς να παρουσιάζονται γρήγορα αστάθειες, θα πρέπει

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2}\,. \tag{9.28}$$

Αυτό είναι κάτι που εμείς θα το ελέγξουμε εμπειρικά με την αριθμητική ανάλυση που θα κάνουμε.

9.4 Το Πρόγραμμα

Τα μόνα σημεία που τονίζουμε σχετικά με το σχεδιασμό του προγράμματος είναι ότι η σχέση (9.26) είναι μια επαγωγική σχέση ενός βήματος ως προς το χρόνο. Άρα σε κάθε χρονικό βήμα αρκεί να αποθηκεύσουμε σε ένα array τις τιμές του δεύτερου όρου (τη "δεύτερη παράγωγο") και να το χρησιμοποιήσουμε για να ενημερώσουμε τις νέες τιμές της συνάρτησης $u_{i,j}$. Άρα, στην επαναλαμβανόμενη διαδικασία (9.26) υπολογισμού της $u_{i,j+1}$ από την $u_{i,j}$ αρκεί να χρησιμοποιήσουμε *μονάχα* ένα array u_i, $i = 1, \ldots, N_x$ και ένα $(\partial^2 u/\partial x^2)_i$, $i = 1, \ldots, N_x$ που δίνουν τις αντίστοιχες τιμές της $u_{i,j}$ και $\Delta t/(\Delta x)^2(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})$ τη χρονική στιγμή t_j αντίστοιχα. Στο παρακάτω πρόγραμμα αυτά κωδικοποιούνται στα arrays `u(P)` και `d2udx2(P)`.

Τα χρήσιμα δεδομένα βρίσκονται στις θέσεις `u(1) ... u(Nx)` `d2udx2(1) ... d2udx2(Nx)` και η παράμετρος `P` επιλέγεται αρκετά μεγάλη ώστε οι τιμές του `Nx` που θα μελετηθούν να είναι πάντα μικρότερες.

Ο χρήστης δίνει στην είσοδο τις τιμές $N_x =$ `Nx`, $Nt =$`Nt`, $t_f =$`tf`. Οι τιμές Δx, Δt και $\Delta t/\Delta x^2 =$ `courant` υπολογίζονται στα αρχικά στάδια του προγράμματος.

Στην έξοδο παίρνουμε το αρχείο d.dat που περιέχει σε στήλες τις τιμές $(t_j, x_i, u_{i,j})$. Όταν τελειώνει μια χρονική φέτα t_j, το πρόγραμμα τυπώνει μια κενή γραμμή, έτσι ώστε το gnuplot να κάνει αμέσως την τρισδιάστατη γραφική παράσταση.

Το προγραμμά μπορεί να βρεθεί στο αρχείο diffusion.f στο συνοδευτικό λογισμικό και ο κώδικας που περιέχει δίνεται παρακάτω:

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C 1-dimensional Diffusion Equation with simple
C Dirichlet boundary conditions u(0,t)=u(1,t)=0
C 0<= x <= 1 and 0<= t <= tf
C
C We set initial condition u(x,t=0) that satisfies
C the given boundary conditions.
C Nx is the number of points in spatial lattice:
C x = 0 + (j-1)*dx, j=1,...,Nx and dx = (1-0)/(Nx-1)
C Nt is the number of points in temporal lattice:
C t = 0 + (j-1)*dt, j=1,...,Nt and dt = (tf-0)/(Nt-1)
C
C u(x,0) = sin(pi*x) tested against analytical solution
C u(x,t) = sin(pi*x)*exp(-pi*pi*t)
C
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      program diffusion_1d
      implicit none
      integer P              ! Max no of points
      real*8  PI
      parameter (P=100000,PI=3.14159265358979320D0)
      real*8 u(P), d2udx2(P)
      real*8 t,x,dx,dt,tf,courant
      integer Nx,Nt,i,j
C --- Input:
      print *, '# Enter: Nx, Nt, tf: (P= ',P,' Nx must be < P)'
      read(5,*) Nx,Nt,tf
      if(Nx .ge. P) stop 'Nx >= P'
      if(Nx .le. 3) stop 'Nx <= 3'
      if(Nt .le. 2) stop 'Nt <= 2'
C --- Initialize:
      dx      = 1.0D0/(Nx-1)
      dt      = tf   /(Nt-1)
```

```
      courant = dt/dx**2
      print * ,'# 1d Diffusion Equation: 0<=x<=1, 0<=t<=tf'
      print * ,'# dx= ',dx,' dt= ',dt,' tf= ', tf
      print * ,'# Nx= ',Nx,' Nt= ',Nt
      print * ,'# Courant Number= ',courant
      if(courant .gt. 0.5D0) print *,'# WARNING: courant > 0.5'
      open(unit=11,file='d.dat') ! data file
C --- Initial condition at t=0 -----------------------------
C     u(x,0) = sin( pi x)
      do i= 1, Nx
       x    = (i-1)*dx
       u(i) = sin(PI*x)
      enddo
      u(1)  = 0.0d0
      u(Nx) = 0.0d0
      do i= 1,Nx
       x    = (i-1)*dx
       write(11,*) 0.0D0, x, u(i)
      enddo
      write(11,*)' '

C ------------------------------------------------------------
C --- Calculate time evolution:
      do j=2,Nt
       t = (j-1)*dt
C ----- second derivative:
       do i=2,Nx-1
        d2udx2(i) = courant*(u(i+1)-2.0D0*u(i)+u(i-1))
       enddo
C ----- update:
       do i=2,Nx-1
        u(i) = u(i) + d2udx2(i)
       enddo
       do i=1,Nx
        x =  (i-1)*dx
        write(11,*) t, x, u(i)
       enddo
       write(11,*)' '

      enddo ! do j=2,Nt
```

```
      close(11)
      end
```

9.5 Αποτελέσματα

Αρχικά γίνεται η μεταγλώττιση και το τρέξιμο του προγράμματος

```
> f77 diffusion.f -o d
> echo "10 100 0.4" | ./d
 # Enter: Nx, Nt, tf: (P= 100000  Nx must be < P)
 # 1d Diffusion Equation: 0<=x<=1, 0<=t<=tf
 # dx= 0.11111111111111110  dt= 4.04040404040404040E-003  tf=  0.4
 # Nx= 10                    Nt= 100
 # Courant Number=   0.32727272727272733
```

Στη δεύτερη σειρά, "ταΐζουμε" το stdin του πραγράμματος τις τιμές Nx=10, Nt=100, tf= 0.4 από το stdout της εντολής echo. Οι επόμενες γραμμές είναι το output του προγράμματος.

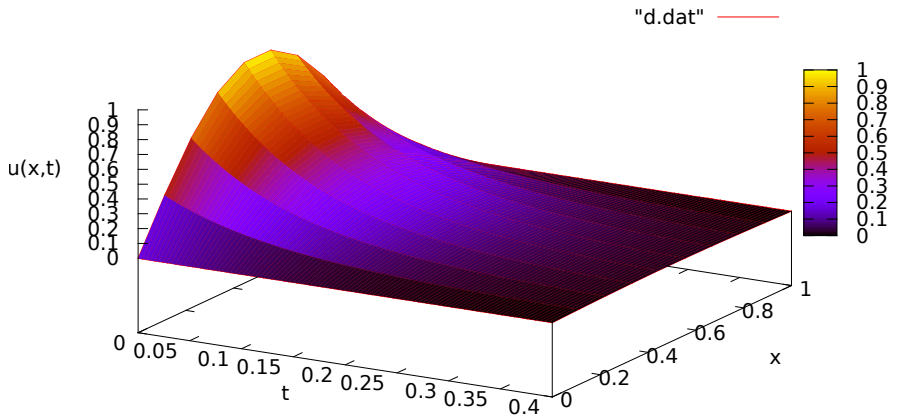
Στη συνέχεια μπορούμε να κάνουμε μια τρισδιάστατη γραφική αναπαράσταση της $u(x,t)$ με τη βοήθεια του gnuplot:

```
gnuplot> set pm3d
gnuplot> set hidden3d
gnuplot> splot "d.dat" with lines
gnuplot> unset pm3d
```

Στη συνέχεια θέλουμε να δούμε τη συνάρτηση $u(x,t)$ σα συνάρτηση του x για δεδομένες τιμές του χρόνου. Παρατηρούμε ότι ο χρόνος αλλάζει κάθε φορά που συναντάμε μια κενή γραμμή στο αρχείο d.dat. Το παρακάτω πρόγραμμα awk μετράει τις κενές γραμμές και τυπώνει μόνο εκείνη που εμείς επιθυμούμε. Ο μετρητής n=0, 1, ..., Nt-1 μπορεί να καθορίσει την τιμή του $t_j = t_{n-1}$. Τα αποτελέσματα τα σώζουμε σε ένα αρχείο tj το οποίο μπορούμε να το δούμε με το gnuplot. Επαναλαμβάνουμε όσες φορές χρειάζεται:

```
> awk 'NF<3{n++}n==3  {print}' d.dat > tj
gnuplot> plot "tj" using 2:3 with lines
```

Την παραπάνω εργασία μπορούμε να την κάνουμε χωρίς τη δημιουργία ενδιάμεσων αρχείων tj χρησιμοποιώντας το φίλτρο της awk μέσα από το gnuplot. Έτσι για παράδειγμα οι εντολές



Σχήμα 9.1: Η συνάρτηση $u(x,t)$ για Nx=10, Nt=100, tf= 0.4.

```
gnuplot> ! echo "10 800 2" | ./d
gnuplot> plot  "<awk 'NF<3{n++}n==3  {print}' d.dat" u 2:3 w l notit
gnuplot> replot "<awk 'NF<3{n++}n==6  {print}' d.dat" u 2:3 w l notit
gnuplot> replot "<awk 'NF<3{n++}n==10 {print}' d.dat" u 2:3 w l notit
gnuplot> replot "<awk 'NF<3{n++}n==20 {print}' d.dat" u 2:3 w l notit
gnuplot> replot "<awk 'NF<3{n++}n==30 {print}' d.dat" u 2:3 w l notit
gnuplot> replot "<awk 'NF<3{n++}n==50 {print}' d.dat" u 2:3 w l notit
gnuplot> replot "<awk 'NF<3{n++}n==100{print}' d.dat" u 2:3 w l notit
```

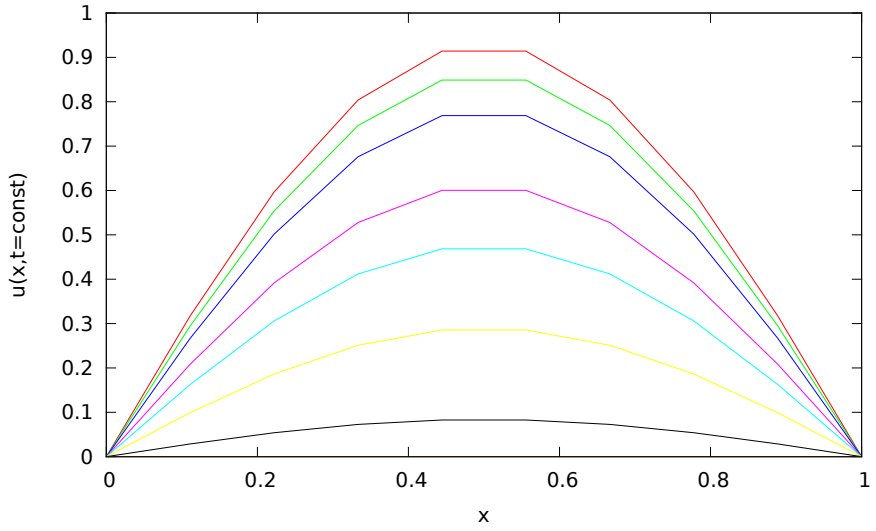
τρέχουν το πρόγραμμα για Nx=10, Nt=800, tf= 2 και παράγουν το σχήμα 9.2

Στη συνέχεια είναι ενδιαφέρον να συγκρίνει κανείς τα αποτελέσματα του με την ακριβή λύση $u(x,t) = \sin(\pi x)\mathrm{e}^{-\pi^2 t}$. Ένας τρόπος να γίνει είναι να ορίσουμε το σχετικό σφάλμα

$$\frac{u_{i,j} - u(x_i, t_j)}{u_{i,j}},$$

και να το υπολογίσουμε ορίζοντας τη σχετική συνάρτηση μέσα στο gnuplot:

```
gnuplot> u(x,y,z) = (z - sin(pi*x)*exp(-pi*pi*y))/z
gnuplot> plot "<awk 'NF<3{n++}n==2  ' d.dat" u 2:(u($2,$1,$3)) w l
gnuplot> plot "<awk 'NF<3{n++}n==6  ' d.dat" u 2:(u($2,$1,$3)) w l
```



Σχήμα 9.2: Η συνάρτηση $u(x,t)$ για `Nx=10, Nt=800, tf= 2` για διαφορετικές σταθερές τιμές του χρόνου t_j. Εδώ $j = 4, 7, 11, 21, 31, 51, 101$ όπου η $u(x,t)$ φθίνει όταν αυξάνει το j.

```
gnuplot> plot "<awk 'NF<3{n++}n==20 ' d.dat" u 2:(u($2,$1,$3)) w l
gnuplot> plot "<awk 'NF<3{n++}n==200' d.dat" u 2:(u($2,$1,$3)) w l
gnuplot> plot "<awk 'NF<3{n++}n==600' d.dat" u 2:(u($2,$1,$3)) w l
gnuplot> plot "<awk 'NF<3{n++}n==780' d.dat" u 2:(u($2,$1,$3)) w l
```

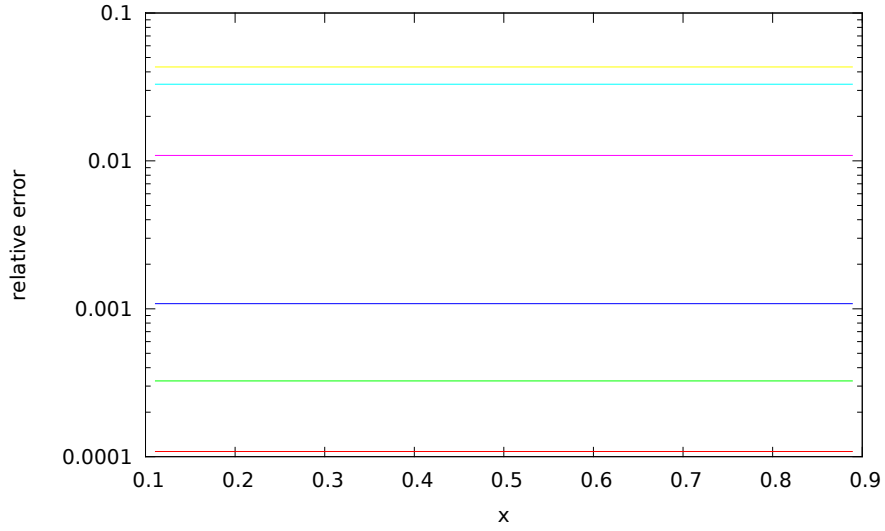
Τα αποτελέσματα μπορούμε να τα δούμε στο σχήμα 9.3.

9.6 Διάχυση Πάνω στον Κύκλο.

Για να μελετήσουμε τον πυρήνα/διαδότη $K(x, x_0; t)$ στο πρόβλημα της διάχυσης ή των τυχαίων διαδρομών, πρέπει να επιβάλλουμε τη συνθήκη κανονικοποίησης (9.4) για κάθε χρονική στιγμή. Στην περίπτωση της $u(x,t)$ ορισμένης για $x \in [0,1]$ η σχέση γίνεται

$$\int_0^1 u(x,t)\,dx = 1\,, \tag{9.29}$$

η οποία για να ισχύει για κάθε χρονική στιγμή είναι αναγκαίο το δεξί μέλος της (9.15) να είναι 0. Ένας τρόπος να επιβάλλουμε αυτή τη συνθήκη είναι να θεωρήσουμε το πρόβλημα της διάχυσης πάνω στον κύκλο. Αν παραμετροποιήσουμε τα σημεία του κύκλου με τη μεταβλητή



Σχήμα 9.3: Η απόλυτη τιμή του σχετικού σφάλματος του αριθμητικού υπολογισμού για `Nx=10, Nt=800, tf= 2` για διαφορετικές σταθερές τιμές του χρόνου t_j. Εδώ $j = 3, 7, 21, 201, 601, 781$ και το σχετικό σφάλμα αυξάνει με το j.

$x \in [0,1]$ τότε τα σημεία $x = 0$ και $x = 1$ ταυτίζονται και έχουμε

$$u(0,t) = u(1,t)\,, \qquad \frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial u(1,t)}{\partial x}\,. \tag{9.30}$$

Η δεύτερη από τις παραπάνω σχέσεις μηδενίζει το δεξί μέλος της (9.15) με αποτέλεσμα αν θέσουμε $\int_0^1 u(x,0)\,dx = 1$, τότε να έχουμε $\int_0^1 u(x,t)\,dx = 1$, $\forall t > 0$.

Με τις παραπάνω παραδοχές, η διακριτοποίηση της διαφορικής εξίσωσης γίνεται ακριβώς όπως και στο πρόβλημα της απαγωγής της θερμότητας. Αντί τώρα να κρατάμε τις τιμές $u(0,t) = u(1,t) = 0$ σταθερές, θα εφαρμόσουμε την εξίσωση δυναμικής εξέλιξης (9.26) και για τα σημεία x_1, x_{N_x} αφού πάνω στον κύκλο αυτά τα σημεία δεν ξεχωρίζουν από τα υπόλοιπα. Για να λάβουμε υπόψη την κυκλική τοπολογία αρκεί να πάρουμε

$$u_{1,j+1} = u_{1,j} + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(u_{2,j} - 2u_{1,j} + u_{N_x,j}\right)\,, \tag{9.31}$$

και

$$u_{N_x,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(u_{1,j} - 2u_{N_x,j} + u_{N_x-1,j}\right)\,, \tag{9.32}$$

αφού ο γείτονας εκ "δεξιών" του σημείου x_{N_x} είναι το σημείο x_1 και ο γείτονας εξ "αριστερών" του σημείου x_1 είναι το σημείο x_{N_x}. Για

τα υπόλοιπα σημεία $i = 2, \ldots, N_x - 1$ η σχέση (9.26) εφαρμόζεται κανονικά.

Το πρόγραμμα που κωδικοποιεί το παραπάνω πρόβλημα δίνεται παρακάτω και βρίσκεται στο αρχείο `diffusionS1.f`. Η επιβολή των συνοριακών συνθηκών (9.30) γίνεται στις γραμμές

```
nnr = i+1
if(nnr .gt. Nx) nnr = 1
nnl = i-1
if(nnl .lt. 1 ) nnl = Nx
d2udx2(i) = courant*(u(nnr)-2.0D0*u(i)+u(nnl))
```

Οι αρχικές συνθήκες τη χρονική στιγμή $t = 0$ επιλέγονται έτσι ώστε να είναι το σωμάτιο στη θέση $x_{N_x/2}$. Σε κάθε χρονική στιγμή γίνονται μετρήσεις με σκοπό να επαληθευτούν οι εξισώσεις (9.4) , (9.9) και το γεγονός ότι $\lim_{t\to+\infty} u(x,t) =$ σταθ.

Η μεταβλητή `prob` $= \sum_{i=1}^{N_x} u_{i,j}$ και ελέγχεται αν διατηρεί την αρχική της τιμή που είναι ίση με 1.

Η μεταβλητή `r2` $= \sum_{i=1}^{N_x} (x_i - x_{N_x/2})^2 u_{i,j}$ είναι η διακριτή εκτίμηση της μέσης τιμής του τετραγώνου της απόστασης από την αρχική θέση η οποία για αρκετά μικρούς χρόνους θα πρέπει να ακολουθεί το νόμο που δίνει η εξίσωση (9.9) .

Οι παραπάνω μεταβλητές αποθηκεύονται στο αρχείο `e.dat` μαζί με τις τιμές $u_{N_x/2,j}$, $u_{N_x/4,j}$ και $u_{1,j}$. Η τελευταίες ελέγχονται αν μετά από αρκετά μεγάλο χρόνο αποκτούν *την ίδια* σταθερή τιμή, σύμφωνα με το αναμενόμενο αποτέλεσμα $\lim_{t\to+\infty} u(x,t) =$ σταθ.

Όλος ο πηγαίος κώδικας είναι:

```
C ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
C 1-dimensional Diffusion Equation with
C periodic boundary conditions u(0,t)=u(1,t)
C 0<= x <= 1 and 0<= t <= tf
C
C We set initial condition u(x,t=0) that satisfies
C the given boundary conditions.
C Nx is the number of points in spatial lattice:
C x = 0 + (j-1)*dx, j=1,...,Nx and dx = (1-0)/(Nx-1)
C Nt is the number of points in temporal lattice:
C t = 0 + (j-1)*dt, j=1,...,Nt and dt = (tf-0)/(Nt-1)
C
C u(x,0) = \delta_{x,0.5}
C
```

```
C CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      program diffusion_1d
      implicit none
      integer P            ! Max no of points
      real*8  PI
      parameter (P=100000,PI=3.1415926535897932D0)
      real*8 u(P), d2udx2(P)
      real*8 t,x,dx,dt,tf,courant,prob,r2,x0
      integer Nx,Nt,i,j,nnl,nnr
C --- Input:
      print *, '# Enter: Nx, Nt, tf: (P= ',P,' Nx must be < P)'
      read(5,*) Nx,Nt,tf
      if(Nx .ge. P) stop 'Nx >= P'
      if(Nx .le. 3) stop 'Nx <= 3'
      if(Nt .le. 2) stop 'Nt <= 2'
C --- Initialize:
      dx      = 1.0D0/(Nx-1)
      dt      = tf   /(Nt-1)
      courant = dt/dx**2
     print * ,'# 1d Diffusion Equation on S1: 0<=x<=1, 0<=t<=tf'
      print * ,'# dx= ',dx,' dt= ',dt,' tf= ', tf
      print * ,'# Nx= ',Nx,' Nt= ',Nt
      print * ,'# Courant Number= ',courant
      if(courant .gt. 0.5D0) print *,'# WARNING: courant > 0.5'
      open(unit=11,file='d.dat') ! data file
      open(unit=12,file='e.dat') ! data file
C --- Initial condition at t=0 -----------------------------
      do i= 1, Nx
       x      = (i-1)*dx
       u(i)   = 0.0D0
      enddo
      u(Nx/2) = 1.0D0
      do i= 1,Nx
       x      = (i-1)*dx
       write(11,*) 0.0D0, x, u(i)
      enddo
      write(11,*)' '

C ------------------------------------------------------------
```

```
C --- Calculate time evolution:
      do j=2,Nt
       t = (j-1)*dt
C ----- second derivative:
       do i=1,Nx
        nnr = i+1
        if(nnr .gt. Nx) nnr = 1
        nnl = i-1
        if(nnl .lt. 1 ) nnl = Nx
        d2udx2(i) = courant*(u(nnr)-2.0D0*u(i)+u(nnl))
       enddo
C ----- update:
       prob = 0.0D0
       r2   = 0.0D0
       x0   = ((Nx/2)-1)*dx !original position
       do i=1,Nx
        x    =  (i-1)*dx
        u(i) = u(i) + d2udx2(i)
        prob = prob + u(i)
        r2   = r2   + u(i)*(x-x0)*(x-x0)
       enddo
       do i=1,Nx
        x =  (i-1)*dx
        write(11,*) t, x, u(i)
       enddo
       write(11,*)' '
       write(12,*) 'pu ',t, prob,r2,u(Nx/2),u(Nx/4),u(1)
      enddo ! do j=2,Nt

      close(11)
      end
```

9.7 Ανάλυση

Το πρόγραμμα αποθηκεύει στο αρχείο `e.dat` για κάθε χρονική στιγμη τις ποσότητες

$$U_j = \sum_{i=1}^{N_x} u_{i,j} \tag{9.33}$$

που είναι ο διακριτός εκτιμητής της (9.29) και περιμένουμε να παίρνουμε $U_j = 1$ για κάθε τιμή του j,

$$\langle r^2 \rangle_j = \sum_{i=1}^{N_x} u_{i,j} (x_i - x_{N_x/2})^2 \tag{9.34}$$

που είναι ο διακριτός εκτιμητής της (9.9) και περιμένουμε για μικρούς χρόνους να ισχύει

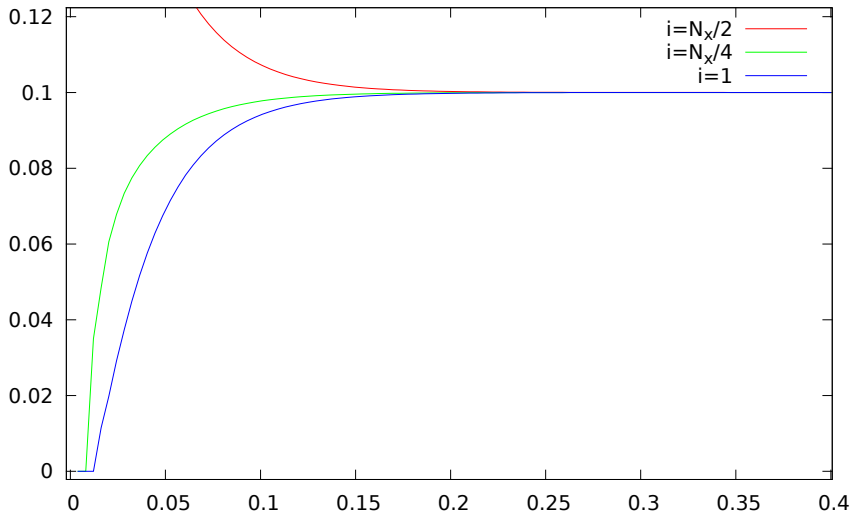
$$\langle r^2 \rangle_j \sim 2 t_j \,, \tag{9.35}$$

καθώς και τις τιμές $u_{N_x/2,j}$, $u_{N_x/4,j}$, $u_{1,j}$.

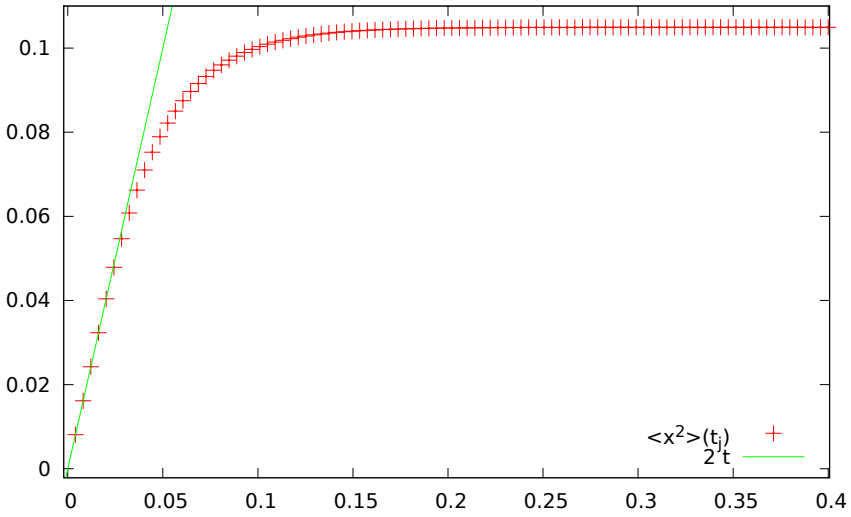
Οι τιμές t_j, U_j, $\langle r^2 \rangle_j$, $u_{N_x/2,j}$, $u_{N_x/4,j}$, $u_{1,j}$ βρίκονται αντίστοιχα στις στήλες 2, 3, 4, 5, 6 και 7 του αρχείου `e.dat`. Ξεκινάμε το `gnuplot` και μέσα από αυτό δίνουμε τις εντολές

```
gnuplot> !f77 diffusionS1.f -o d
gnuplot> ! echo "10 100 0.4" | ./d
```

που ορίζουν τις τιμές $N_x = 10$, $N_t = 100$, $t_f = 0.4$, $\Delta x \approx 0.111$, $\Delta t \approx 4.0404$, $\Delta t / \Delta x^2 \approx 0.327$. Με τις εντολές



Σχήμα 9.4: Οι συναρτήσεις $u_{N_x/2,j}$, $u_{N_x/4,j}$, $u_{1,j}$ σα συνάρτηση του t_j για $N_x = 10$, $N_t = 100$, $t_f = 0.4$. Για μεγάλο χρόνο τείνουν προς μια σταθερή τιμή που αντιστοιχεί στην ομοιόμορφη διάχυση.



Σχήμα 9.5: Η μέση τιμή $\langle r^2 \rangle_j$ σα συνάρτηση του t_j για $N_x = 10$, $N_t = 100$, $t_f = 0.4$. Για μικρές τιμές του t_j ισχύει $\langle r^2 \rangle_j \approx 2t_j$ το οποίο συγκρίνεται με την ευθεία $2t$.

```
gnuplot> plot   "e.dat" u 2:5 w l
gnuplot> replot "e.dat" u 2:6 w l
gnuplot> replot "e.dat" u 2:7 w l
```

φτιάχνουμε το σχήμα 9.4 από όπου βλέπουμε την ομοιόμορφη κατανομή της διάχυσης για αρκετά μεγάλους χρόνους.

Η σχέση $U_j = 1$ επιβεβαιώνεται με απλό κοίταγμα στο αρχείο `e.dat`.

Η ασυμπτωτική σχέση $\langle r^2 \rangle_j \sim 2t_j$ επιβεβαιώνεται με τις εντολές

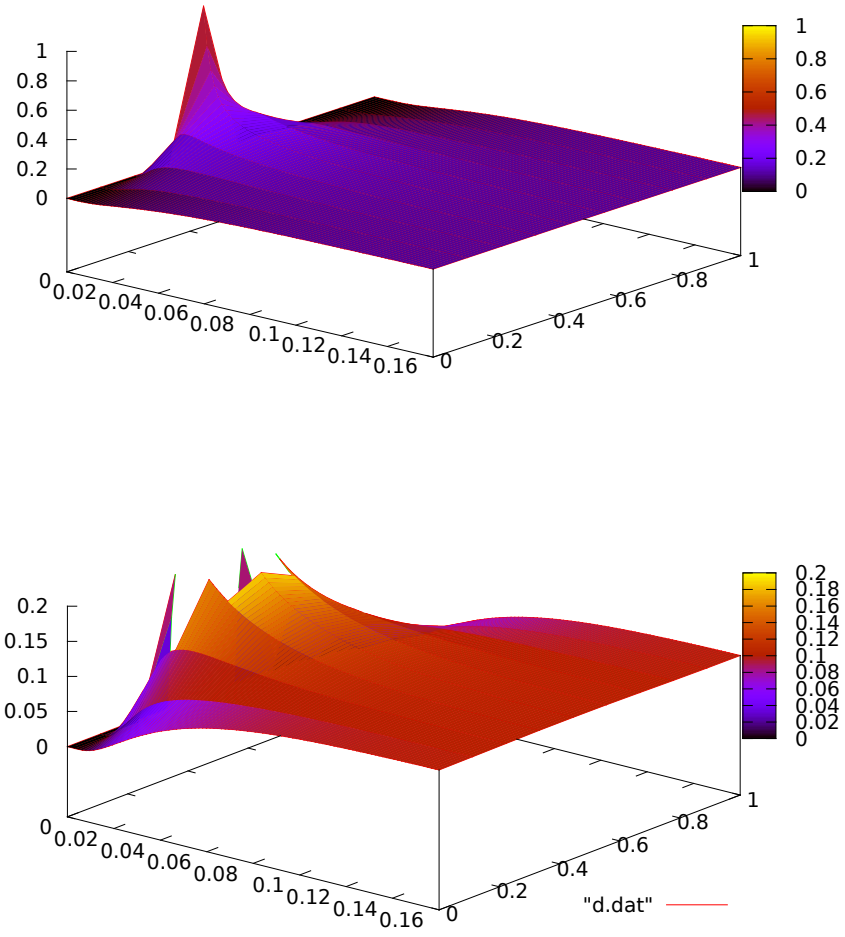
```
gnuplot> plot [:][:0.11] "e.dat" u 2:4,2*x
```

που μας δίνει το σχήμα 9.5.

Τέλος κάνουμε μια επισκόπηση της συνάρτησης $u(x,t)$ με τις εντολές

```
gnuplot> ! echo "10 100 0.16" | ./d
gnuplot> set pm3d
gnuplot> splot [0:0.16][0:1][0: 1] "d.dat" w l
gnuplot> splot [0:0.16][0:1][0:.2] "d.dat" w l
```

και το αποτέλεσμα φαίνεται στο σχήμα 9.6.



Σχήμα 9.6: Η συνάρτηση $u(x,t)$ για $N_x = 10$, $N_t = 100$, $t_f = 0.16$. Στο δεύτερο σχήμα αλλάζουμε μόνο την κλίμακα του άξονα z ώστε να φανούν οι λεπτομέρειες της διάχυσης μακρυά από το σημείο $x_0 \equiv x_{N_x/2} = x_5$.