

Skripta za Matematično–fizikalni seminar za VSŠ

Borut Paul Kerševan

Dostopno na <http://www-f9.ijs.si/~kersevan/>

COBISS ID: [COBISS.SI-ID 242203392]

ISBN: 978-961-92548-2-0

Naslov: “Skripta za Matematično–fizikalni seminar za VSŠ”

Avtor: Borut Paul Kerševan,
Fakulteta za matematiko in fiziko,
1000 Ljubljana

Izdaja: Učno gradivo na spletu: <http://www-f9.ijs.si/~kersevan/>

Izdano v samozaložbi, Ljubljana 2008

COBISS ID: [COBISS.SI-ID 242203392]

ISBN: 978-961-92548-2-0

1. naloga: Iskanje funkcijskih ekstremov

Tako kot pri vseh numeričnih metodah kompleksnost metode iskanja ekstremov narašča z dimenzijo prostora v katerem je funkcija definirana. Najbolj robustne in zanesljive metode so tako razvite za iskanje ekstremov v eni dimenziji. V splošnem pa ne smemo pozabiti na dejstvo, da *ne obstaja* metoda, ki bi avtomatsko našla *globalni* ekstrem (minimum ali maksimum), vsaka metoda se bo slej ko prej ustavila v nekem lokalnem ekstremu. Ali je le-ta globalen in/ali edini pa je potrebno proučiti naknadno (s poskušanjem ipd.).

Iskanje minimov ali maksimov funkcije lahko poenotimo z metodami iskanja minimov, saj za maksime lahko vedno definiramo $f \rightarrow -f$.

V eni dimenziji je najpreprostejša (in najrobustnejša) metoda *zlatega reza*. Najprej poiščemo tri točke ($a < b < c$), za katere velja $f(b) < f(a)$ in $f(b) < f(c)$; točka b je torej groba ocena minima. Poskusno točko x izberemo z kriterijem zlatega reza:

- Točko x iščemo v večjem od obeh intervalov $[a, b]$ in $[b, c]$.
- Točko x nato izberemo v danem intervalu tako, da je za *zlato rez*:

$$\bar{W} = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} = 0.38197$$

zamaknjena on spodnjega roba intervala, recimo, če je $[b, c]$ daljši interval:

$$x = b + \bar{W} \cdot (c - b)$$

Nato trojico točk transformiramo glede na vrednost $f(x)$, recimo da je spet $x \in [b, c]$:

- Če je $f(b) < f(x)$, postane novi triplet (a, b, x) .
- V nasprotnem primeru, $f(b) > f(x)$, postane novi triplet (b, x, c) .

Metodo nato ponavljamo do želene natančnosti, pri čemer moramo paziti, da je dosegljiva natančnost le *koren iz numerične natančnosti računskih operacij!* (npr 10^{-8} za dvojno natančnost (double precision)).

Hitrejša, a nekoliko labilnejša metoda, je iskanje minimov z prilagajanjem parabole na tri začetne točke in oceno novega minima iz minima prilagojene parabole:

$$x = b - \frac{1}{2} \frac{(b-a)^2[f(b)-f(c)] - (b-c)^2[f(b)-f(a)]}{(b-a)[f(b)-f(c)] - (b-c)[f(b)-f(a)]},$$

ki pa odpove(duje) ko so izbrane tri točke (skoraj) kolinearne. Smiselna je torej ustrezna kombinacija obeh metod, poznana kot *Brentova metoda*.

V primeru, ko je poznana analitična oblika odvoda iskane funkcije, si seveda lahko pomagamo z numeričnim iskanjem ničle v odvodu (npr z metodo bisekcije).

V več dimenzijah je problem ustrezno težji, najrobustnejša in precej učinkovita je t.i. *Downhill simplex* metoda, ki jo bralec z lahkoto najde v literaturi in na spletu.

Naloga:

- Z metodo zlatega reza in parabolično ter Brentovo metodo poišči ničle nekaj polinomov različnih redov (recimo do tretjega reda) in primerjaj hitrost (št. korakov) in natančnost z točnimi vrednostmi.
- Z zgornjimi metodami poišči maksimum x^2e^{-x} in zopet primerjaj njihovo uspešnost.
- Z Downhill simplex metodo poišči maksimum dvo dimenzionalne Gaussove porazdelitve ter dvojne 2D Gaussove porazdelitve (kamelja grba).

2. naloga: Izračun Gaussovega integrala

Gaussovo verjetnostno porazdelitev

$$w(x_0, \sigma, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

srečamo v verjetnostnem računu in statistiki zelo pogosto. Običajno potrebujemo verjetnost nad intervalom, ki se izraža z Gaussovimi integralom. Uporabili bomo definicijo iz Abramowitza

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2) dt.$$

Pri ročnem delu si seveda pomagamo s tablicami, za računalnik pa si je treba pripraviti podprogram. Pregledali bomo naslednje možnosti:

1. potenčna vrsta

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{z^{2n+1}}{n!(2n+1)}, \quad \operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z);$$

2. asimptotska vrsta

$$z\sqrt{\pi} \exp(z^2) \operatorname{erfc}(z) \longrightarrow 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(2m-1)!!}{(-2z^2)^m};$$

3. racionalna aproksimacija ($z > 0$)

$$\operatorname{erf}(z) = 1 - (at + bt^2 + ct^3 + dt^4 + et^5) \exp(-z^2) + \varepsilon(z),$$

$$t = \frac{1}{1 + pz}, \quad \varepsilon(z) < 1.5 \cdot 10^{-7},$$

$$\begin{aligned} p &= .32759 \ 11, & a &= .25482 \ 9592, & b &= -.28449 \ 6736, \\ c &= 1.42141 \ 3741, & d &= -1.45315 \ 2027, & e &= 1.06140 \ 5429. \end{aligned}$$

Naloga: Primerjaj metode po uporabnosti! Če je mogoče, primerjaj tudi potrebne čase! Opazuj konvergenco asimptotske vrste!

Napravi primerjalno tablico $\operatorname{erf}(x)$, $x = 0(0.2)3$ in $\operatorname{erfc}(x)$, $x = 3(0.5)8$ in pripravi podprogram za izračun erf za poljubne vrednosti (lahko kombiniraš različne metode)!

Ali je numerična integracija primerljiva izbrano metodo? Ugotovi, kolikšen interval bi moral uporabiti pri Simpsonovi integraciji!

Dodatna naloga: Sestavi algoritem za funkcijo, inverzno k $\operatorname{erf}(z)$! Če imamo učinkovit algoritem za računanje monotone funkcije, je mogoče obratno funkcijo poiskati z bisekcijo ali podobnim postopkom.

3. naloga: Grafična predstavitev skalarnih in vektorskih funkcij

Z grafično upodobitvijo – grafom – funkcije ene neodvisne spremenljivke $y = f(x)$ običajno ni posebnih težav, razen tistih seveda, ki se utegnejo pojaviti ob računanju funkcijskih vrednosti. Ko smo izbrali primerno merilo na obeh oseh, tako da so v sliko vključena in dovolj jasno prikazana zanimiva področja funkcije, je treba presoditi še, kako na gosto bomo morali funkcijo izračunati. Pohlevne in zamudne funkcije računamo redkeje, točke pa povežemo z daljicami, ki "vodijo oko", da se v razmikih med zaporednimi točkami ne izgubimo. Le izjemoma skušamo zelo redke funkcijske točke povezati z interpolacijo višjega reda.

Večjo izbiro grafičnih sredstev in prijemov uporabljamo pri funkciji dveh spremenljivk, $z = z(x, y)$, saj moramo na dvodimenzionalnem papirju predstaviti tri dimenzije. Spremenljivki x in y sta lahko enakovredni, pogosto pa je ena zvezen parameter družine, n.pr. $z = z(x; y)$. V tem primeru izberemo običajen graf z osema z in x , v katerega narišemo nekaj zveznih funkcij za primerne in nepregoste vrednosti parametra y . Če je z pohlevna funkcija obeh spremenljivk, lahko zaporedne grafe družine "perspektivno" premaknemo in pririšemo tretjo os. Kadar hočemo poudariti enakovrednost obeh neodvisnih spremenljivk, lahko točke take sestavljene slike povežemo tudi v smeri y , da dobimo nekakšno mrežo, ki ponazarja zvezno ploskev $z(x, y)$. Pri količkaj razgibanih funkcijah pa obstaja nevarnost, da bo slika s tem postala nepregledna. Moderni risarski programi zmorejo prikazati tako ploskev kot objekt, se pravi z realističnim zveznim senčenjem in izračunom zakrivanja.

Za matematično izobraženega bralca je lažje berljiva slika, v kateri uporabimo ravnino papirja kot ravnino x, y , vrednosti funkcije pa predstavimo z drugačnimi sredstvi, na primer z barvo, gostoto senčenja ali šrafure, ali pa najtočneje z izohipsami. Najokornejša in najmanj zahtevna varianta te tehnike izvira iz časov, ko so znali tiskalniki tiskati le alfanumerične znake: vrednosti funkcije, ki jih naračunamo v ne pregosti mreži (n.pr. 30×30), razdelimo v deset slojev, in na ustreznem mestu v tabeli odtisnemo številko sloja. Z grafičnim tiskalnikom ali zaslonom lahko odtisnemo ustrezen ton sivine: seveda s tem nismo omejeni na deset slojev. Prikaz s stopnjami sivine je posebej primeren za porazdelitve, saj želimo prikazati gostoto neke fizikalne količine, n.pr. verjetnosti. Če računanje funkcije ni časovno potratno in si lahko privoščimo gosto mrežo točk, lahko sloje prikažemo izmenoma v beli in črni barvi. Meje med njimi potem ustrezajo izohipsam funkcije $z(x, y)$.

Prikaz funkcije s pravimi izohipsami je bržkone najpopolnejši, saj omogoča precej natančno odčitavanje funkcijskih vrednosti, obenem pa podaja globalno sliko. Konstrukcija izohips je programsko dokaj zahtevna, terja pa razmeroma redko mrežo, zato uporabljamo to tehniko pri funkcijah, katerih računanje je zamudno.

Podobno kot lahko prikažemo skalarno polje U z ekvipotencialnimi ploskvami $U = konst.$, upodobimo vektorsko polje s silnicami. To so rešitve sistema diferencialnih enačb

$$\frac{dx}{E_x} = \frac{dy}{E_y} = \frac{dz}{E_z}, \quad (1)$$

torej krivulje, ki imajo v vsaki točki za tangente vektorje polja. Običajno želimo tudi, da silnice s svojo gostoto prikazujejo jakost polja, da so gostejše v močnejšem polju. Enačbe (1) tega same

ne zagotavljajo, treba je poskrbeti za pravilno izbiro začetnih točk. Slika torej ni enolična, kar je drugače kot v primeru skalarne polja, kjer je slika popolnoma določena z izborom vrednosti potenciala, ki jim ustrezajo narisane ekvipotencialne ploskve.

Zelo lepo pa je mogoče rešiti ravninski problem.

- Potencialna polja lahko izrazimo kot $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$. S pomočjo Cauchy-Riemannovih enačb zamenjamo potencial φ s konjugiranim potencialom ψ , pa se sistem (1) integrira v

$$\psi = konst.. \quad (2)$$

- Solenoidalna polja lahko izrazimo kot $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Za polje v ravnini x - y velja $\mathbf{A} = (0, 0, A_z)$. S substitucijo

$$B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y}, \quad B_y = -\frac{\partial A_z}{\partial x},$$

lahko sistem (1) spet zintegriramo v

$$A_z = konst.. \quad (3)$$

V enačbah (2, 3) dobimo z izbiro konstante v enakih razmikih silnice že razmeščene tako, kot ustreza gostoti polja.

Naloga: Izberi primeren prikaz za

1. Planckov zakon za sevanje črnega telesa

$$\frac{dj}{d\nu} = \frac{2\pi}{c^2} \frac{h\nu^3}{\exp(h\nu/kT) - 1}$$

kot funkcijo frekvence in temperature;

2. resonančno krivuljo

$$I = \frac{1}{\sqrt{(1 - \Omega^2)^2 + 2\alpha^2\Omega^2}}$$

kot funkcijo brezdimenzijske frekvence $\Omega = \omega/\omega_0$ in relativnega dušenja $\alpha = \beta/\omega_0$.

3. Skiciraj Debyevo funkcijo, ki podaja specifično toploto preprostih trdnin

$$D(x) = 12x^3 \int_0^{1/x} \frac{u^3 du}{e^u - 1} - \frac{3}{x [\exp(1/x) - 1]},$$

kjer je $x = T/\Theta$ razmerje temperature in Debyeve temperature; tedaj je $c_V = \frac{3R}{M} D\left(\frac{T}{\Theta}\right)$. Preskusi, kolikšen korak je potreben pri integraciji. Za zelo majhne in zelo velike vrednosti x je bolj izdelati analitične aproksimacije.

4. Nariši silnice magnetnega polja v okolici dveh, treh ali več dolgih vzporednih vodnikov, po katerih tečejo električni tokovi v isti (nasprotni) smeri. V mreži točk, ki naj sega približno za dva razmika med žicami v vsako stran, določi vektorski potencial. Razpon dobljenih vrednosti razdeli tako, da bo na sliki 5-8 silnic.

4. naloga: Monte Carlo integracija

Pri integraciji v več dimenzijah postanejo običajne integracijske metode zapletene ter pogosto računsko zelo počasne. Tu priskoči na pomoč statistika. Izhajamo lahko iz izreka o povprečni vrednosti (zapisan v eni dimenziji, velja v poljubno dimenzijah):

$$\int_a^b f(x) w(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \bar{f} \quad (1)$$

kjer je $w(x)$ verjetnostna porazdelitev normirana na intervalu (a, b) in so x_i naključno izbrane vrednosti iz te porazdelitve v intervalu (a, b) . Izrek velja točno v limiti ko gre število meritev $N \rightarrow \infty$. Varianca (kvadrat 'napake') tako določenega povprečja je podan s formulo:

$$\sigma^2 f = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^2(x_i) - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)\right)^2}{N-1} = \frac{\overline{f^2} - \bar{f}^2}{N-1} \quad (2)$$

in pada približno s številom meritev N .

Najlažji primer je izračun ploščin in volumnov s pomočjo MC integracije. Vzemimo ploskovni primer: Na kvadratni podlagi s stranico a je lik s površino S . Verjetnostna porazdelitev točk naj bo enakomerna po površini kvadrata. Verjetnost, da točka pade v lik je kar enaka razmerju ploščin $p = S/a^2$. Funkcija f opisuje ploskev z pogojem $f = 1$, če je točka v liku in $f = 0$ drugače. Integral v izreku nam res da:

$$\int_{a^2} f(x) w(x) dx = \frac{1}{a^2} \int_S 1 dx = \frac{S}{a^2} = p \quad (3)$$

in varianca postane

$$\sigma^2 f = \frac{p(1-p)}{N-1}, \quad (4)$$

kar ustreza binomski napaki pri velikih N kot pričakovano.

Pomembno je opažanje, da v primeru, ko območje integracije (verjetnostno porazdelitev) stisnemo na površino lika S , postane varianca enaka nič ($p=1$)! To ugotovitev lahko tudi splošimo v primeru integracije poljubnih funkcij. Če bi radi izračunali integral funkcije $g(x)$ v intervalu (a, b) , uporabimo izrek o povprečni vrednosti takole:

$$\int_a^b g(x) dx = \int_a^b f(x) w(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \bar{f}, \quad (5)$$

pri čemer je $f(x) = g(x)/w(x)$. V idealnem primeru bi si torej lahko izbrali $w(x)=g(x)$, kar bi dalo $f(x)=1$ po celem intervalu in potemtaka varianco rezultata enako nič. V realnih primerih pa si lahko izberemo vsaj funkcijo, ki približno opisuje $g(x)$. Pristop se imenuje 'importance sampling' (prednostno vzorčenje).

Točke x_i je v tem primeru potrebno generirati po verjetnostni porazdelitvi $w(x)$. Za izračun algoritma je osnova naslednja formula:

$$\int_a^x w(t) dt = \rho \cdot \int_a^b w(t) dt, \quad (6)$$

ki jo je potrebno rešiti in iz nje izraziti spremenljivko x . Za nekatere porazdelitve je izračun preprost, npr $w(x) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{x}{\tau}}$ nam da kar:

$$x = -\tau \ln(\rho - 1). \quad (7)$$

Naloge:

- S pomočjo MC integracije izračunaj ploščino kroga in volumen sfere ter opazuj padanje napake s številom izbranih točk. Primerjaj natančnost in hitrost metode z računanjem ploščine s pomočjo točk na enakomerni mreži!
- Izračunaj integral eksponentne porazdelitve s pomočjo trapezne formule, navadne MC integracije ter prednostnega vzorčenja, pri čemer parameter τ za prednostno vzorčenje spreminjaj od prave vrednosti postopoma daleč stran. Primerjaj čase integracij in računske napake!

5. naloga: Fourierova analiza

Pri numeričnem izračunavanju Fourierove transformacije

$$H(f) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) \exp(2\pi i f t) dt \quad (1)$$

$$h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} H(f) \exp(-2\pi i f t) df \quad (2)$$

je funkcija $h(t)$ običajno predstavljena s tablico diskretnih vrednosti

$$h_k = h(t_k), \quad t_k = k\Delta, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (3)$$

Pravimo, da smo funkcijo vzorčili z vzorčno gostoto $1/\Delta$. Za tako definiran vzorec obstaja naravna meja frekvenčnega spektra, ki se imenuje *Nyquistova frekvenca*, $f_c = 1/(2\Delta)$: harmonični val s to frekvenco ima v naši vzorčni gostoti ravno dva vzorca v periodi. Če ima funkcija $h(t)$ frekvenčni spekter omejen na interval $[-f_c, f_c]$, potem ji z vzorčenjem nismo odvzeli nič informacije: kadar pa se spekter razteza izven intervala, pride do *potujitve (aliasing)*, ko se zunanji del spektra preslika v interval.

Frekvenčni spekter vzorčene funkcije (3) spet računamo samo v N točkah, če hočemo, da se ohrani količina informacije. Vpeljemo vsoto

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} h_k \exp(2\pi i k n / N), \quad n = -N/2, \dots, N/2, \quad (4)$$

ki jo imenujemo diskretna Fourierova transformacija, in je povezana s funkcijo v (1) takole:

$$H(n/(N\Delta)) \approx \Delta \cdot H_n.$$

Zaradi potujitve, po kateri je $H_{-n} = H_{N-n}$, lahko mirno pustimo indeks n v enačbi (4) teči tudi od 0 do N . Spodnja polovica tako definirane spektra ustreza pozitivnim frekvencam med 0 in f_c , gornja pa negativnim od $-f_c$ do 0.

Z diskretno obratno transformacijo lahko rekonstruiramo h_k iz H_n

$$h_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} H_n \exp(-2\pi i k n / N). \quad (5)$$

Količine h in H so v splošnem kompleksne, simetrija v enih povzroči tudi simetrijo v drugih. Za realne h so H paroma konjugirani, $H(-f) = H(f)^*$.

Naloga:

1. Izračunaj Fourierov obrat nekaj enostavnih vzorcev, npr. raznih mešanic izbranih frekvenc. Primerjaj rezultate, ko je vzorec v intervalu periodičen (izbrane frekvence so mnogokratniki osnovne frekvence), z rezultati, ko vzorec ni periodičen. Opazuj pojav potujitve na vzorcu, ki vsebuje frekvence nad Nyquistovo frekvenco. Napravi še obratno transformacijo (5) in preveri natančnost metode.

2. Izračunaj še Fourierov obrat Feigenbaumovih zaporedij. Ta so podana z rekurzivno zvezo

$$y_{n+1} = a y_n(1 - y_n),$$

katere limitni cikli so zelo pestro odvisni od vrednosti parametra a . Za vrednosti $a < 3$ zaporedje konvergira, za $3 < a < 3.57$ dobimo vrsto bifurkacij, ki se končajo v kaotičnem gibanju. To traja vse do meje stabilnosti $a = 4$, prekinjajo pa ga otoki "čudnih" ciklov z vsakokratnimi bifurkacijskimi sekvencami.

Pri izbranem a in začetni vrednosti za y najprej določeno število členov zaporedja zavržemo, ker so iz "prehodnega obdobja", nato pa jih primerno število (potenco števila 2) zberemo in napravimo obrat (4).

Priporočljivo je izbrati $N = 128$ ali 256 , za a pa so zanimive vrednosti 3.702, 3.74, 3.961, 3.9778 in njihova okolica. Prikaži realno in imaginarno komponento ter absolutno vrednost H_n .

6. naloga: Lastne vrednosti simetričnega tenzorja

Simetrični tenzor \underline{A} ranga j ima lastne vrednosti a_i in njim ustrezne lastne vektorje \mathbf{x}_i , določene z

$$\underline{A} \mathbf{x}_i = a_i \mathbf{x}_i, \quad i = 1, \dots, j.$$

Lastne vrednosti lahko poiščemo iz sekularne enačbe, ki ustreza matriki

$$\underline{A} - a \cdot \underline{I}.$$

Za velike matrike je taka prevedba na algebrajsko enačbo nepraktična in tudi sicer neuporabna, ker so koreni enačbe preobčutljivi na napake koeficientov. V takem primeru računamo raje neposredno

$$\text{Det}(\underline{A} - a \cdot \underline{I}) = 0.$$

Izberemo metodo za hitro računanje determinant in določimo ničle te enačbe z bisekcijo ali kako podobno metodo.

Največjo lastno vrednost dobimo lahko tudi s potenčno metodo: s poljubnim začetnim približkom $\mathbf{x}^{(0)}$ za lastni vektor vstopimo v iteracijo

$$\mathbf{y}^{(i+1)} = \underline{A} \mathbf{x}^{(i)}, \quad \mathbf{x}^{(i)} = a \mathbf{y}^{(i)},$$

kjer je a normalizacijska konstanta, s katero renormaliziramo vektorje $\mathbf{x}^{(i)}$ na stalno velikost. Ko se začne v postopku vektor \mathbf{x} ponavljati, je a dober približek za lastno vrednost, \mathbf{x} pa za ustrezní lastni vektor. Podobno lahko poiščemo tudi najmanjšo lastno vrednost, ki je enaka največji lastni vrednosti \underline{A}^{-1} . (Ko v matriki ranga 4 določimo največjo in najmanjšo lastno vrednost, nam za drugi dve preostane le še kvadratna enačba.)

Naloga: določi lastna nihanja in lastne frekvence sistema, ki ga sestavljajo tri uteži z masami m_1, m_2, m_3 , ki so zaporedno pripete s štirimi vzmetmi s konstantami k_1, k_2, k_3, k_4 , med dve nepremični steni in med seboj. Če so konstante vzmeti in mase uteži izbrane tako, da ima sistem kako simetrijo, npr. $k_1 = k_4, k_2 = k_3, m_1 = m_3$ lahko nekatere lastne načine uganeš. Poišči tudi lastna nihanja sistemov, ki niso simetrični!

7. naloga: Enačbe hoda

Med najpreprostejše fizikalne modele sodijo enačbe, ki povezujejo vrednosti spremenljivk sistema z njihovimi časovnimi spremembami. Tak primer je enačba za časovno odvisnost temperature majhnega, dobro prevodnega telesa, ko lahko zanemarimo krajevno odvisnost: enačbo hoda dobimo iz energijskega zakona. Vzemimo primer žarilne nitke, ki jo grejemo s tokom (glej knjigo!), le da bomo namesto izmeničnega toka uporabili tokovni sunek iz kondenzatorja:

$$mc \cdot \frac{dT}{dt} = RI_0^2 \cdot \exp\left(-\frac{2t}{RC}\right) - \sigma ST^4.$$

Z vpeljavo brezdimenzijskih spremenljivk dobimo enoparametrično enačbo

$$\frac{du}{dx} = a \cdot \exp(-2x) - u^4. \quad (1)$$

Zanemarili smo sevalni tok, ki ga nitka prejema iz okolice, zato se bo temperatura po dovolj dolgem času poljubno približala absolutni ničli: to pomeni, da rešitve ne kaže vleči predolgo. Da se izognemo tudi preračunavanju začetne temperature, nas bodo zanimali samo zelo močni tokovni sunki, ko lahko začetno notranjo energijo nitke zanemarimo. K enačbi (1) sodi torej začetni pogoj $u(x=0) = 0$.

Preiskali bomo uporabnost različnih metod za reševanje enačbe (1). Sledeč fizikalnemu občutku lahko v najbolj grobi inačici zapišemo

$$u(x+h) = u(x) + h \cdot \left. \frac{du}{dx} \right|_x. \quad (2)$$

Diferencialno enačbo smo prepisali v diferenčno: sistem spremljamo v korakih h . Metoda je vedno stabilna, le groba: za večjo natančnost moramo močno zmanjšati korak. Za red boljše ($\mathcal{O}(h^3)$) je simetrizirana formula

$$u(x+h) = u(x-h) + 2h \cdot \left. \frac{du}{dx} \right|_x, \quad (3)$$

ki pa je praviloma nestabilna. Želeli bi si pravzaprav nekaj takega

$$u(x+h) = u(x) + \frac{h}{2} \cdot \left[\left. \frac{du}{dx} \right|_x + \left. \frac{du}{dx} \right|_{x+h} \right],$$

le da ne poznamo odvoda v končni točki intervala. Pomagamo si lahko z iteracijo.

Namesto intuicije lahko uporabimo tudi matematiko. Za splošno rabo sta izpeljana dva tipa metod: algoritmi *prediktor-korektor* in metode *Runge-Kutta*. Lotimo se jih, če je zahtevana spodobna natančnost (pod 1 %): tedaj tudi ne skoparimo, izberemo večinoma četrti red ($\mathcal{O}(h^5)$).

Naloga: za $a = 10$ preskusi metodi (2) in (3) ter še katero od omenjenih boljših. Kakšen korak je potreben? Izberi metodo (in korak) za izračun družine rešitev pri $a = 2(4)18!$

V premislek: kakšno metodo bi uporabil, če bi posebej natančno želel določiti maksimalne temperature in trenutke, ko nastopijo?

Dodatna naloga: če ne zanemarimo sevalnega toka iz okolice, postane enačba (1) dvoparametrična:

$$\frac{du}{dx} = a \cdot \exp(-2x) - b(u^4 - 1). \quad (4)$$

Poišči še družino rešitev te enačbe pri $a = 5$ in $b = 0(0.5)2!$

8. naloga: Newtonov zakon

Gibanje masne točke v polju sil se opiše z diferencialno enačbo drugega reda

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F,$$

če se omejimo na gibanje vzdolž ene same koordinate x . Enačba je seveda enakovredna sistemu enačb prvega reda

$$m \frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = F.$$

Kadar sila F ni odvisna od hitrosti, obstaja za gornji sistem poleg standardnih metod (Runge-Kutta) tudi posebna trapezna shema, ki je presenetljivo točna in periodično stabilna

$$x(t+h) = x(t) + h u(t + \frac{1}{2}h),$$

$$u(t + \frac{1}{2}h) = u(t - \frac{1}{2}h) + h \frac{F(x(t), t)}{m}.$$

Pomožna spremenljivka u je le slaba aproksimacija za hitrost, še najbližje ji je v vmesnih točkah ($h/2$), zato jo tja tudi pripisujemo. V resnici je u zgolj prva diferenca x .

Sistemu je mogoče še zvišati red od $\mathcal{O}(h^3)$ na $\mathcal{O}(h^5)$, če členu F/m dodamo še $1/12$ njegove druge diference. Shema tedaj ni več eksplisitna, pomagamo si z iteracijo, tako da drugo diferenco najprej ocenimo, nato pa zares izračunamo. Metode bomo primerjali na zgledu matematičnega nihala z enačbo v brezdimenzijski obliki

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sin x = 0,$$

kjer pomeni x zasuk od mirovne lege, z izbiro enote za čas pa smo postavili $\omega = 1$, kar pomeni, da je za majhne amplitude nihajni čas 2π .

Naloga: Gornjo shemo in izboljšano inačico ter metodo Runge-Kutta primerjaj za nihanje z začetnim pogojem $x(0) = 1, v(0) = 0$. Poišči korak, ki zadošča za natančnost na 3 mesta. Primerjaj tudi periodično stabilnost shem: pusti, naj teče račun čez 10 ali 20 nihajev in ugotovi, koliko se amplitude nihajev sistematično kvarijo. Pomagaš si lahko tudi tako, da občasno izračunaš energijo $E = 1 - \cos x + \frac{1}{2}(dx/dt)^2$.

Opozorilo: Obe shemi bosta tekli z dosegljivo natančnostjo, če poskrbiš, da bo tudi začetek računa ($u(h/2)$) izračunan v tolikšnem redu, kot ga doseže metoda. Z analitično rešitvijo dobimo za nihajni čas $4K(\sin \frac{1}{2}x(0))$, kjer je $K(u)$ popolni eliptični integral prve vrste: $K(\sin 0.5) = 1.6750$.

Dodatna naloga: Razišči še resonančno krivuljo dušenega matematičnega nihala

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \beta \frac{dx}{dt} + \sin x = v \sin \omega_0 t,$$

kjer je β koeficient dušenja, v in ω_0 pa amplituda in frekvenca vzbujanja. Diferenčna shema za u je sedaj implicitna; pomagaj si z iteracijo.

9. naloga: Robni problem lastnih vrednosti

Za majhna prečna nihanja prosto viseče težke vrvi smo izpeljali enačbo

$$\frac{d}{dy} \left(y \frac{dz}{dy} \right) + \frac{\omega^2}{g} z = 0,$$

kjer pomeni z amplitudo in y koordinato vzdolž vrvi, šteto od prostega konca navzgor. Iščemo lastne frekvence ω , g pa je pospešek prostega pada. Robna pogoja zahtevata

$$z(0) \text{ omejena}, \quad z(l) = 0.$$

Za analitično reševanje ta pogoj zadošča, ker je enačba pri $y = 0$ singularna. (Rešitve so $J_0(j_{0s}\sqrt{y/l})$, kjer je j_{0s} s -ta ničla funkcije J_0 ; $\omega = \frac{1}{2}\sqrt{g/l} j_{0s}$.)

Pri numeričnem reševanju razdelimo definicijsko območje na N enakih intervalov $h = l/N$. V delilnih točkah zapišemo diferenčne aproksimacije:

$$i \cdot (z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1}) + \frac{1}{2}(z_{i+1} - z_{i-1}) + hpz_i = 0,$$

$$i = 1, 2, \dots, N-1, \quad z_N = 0.$$

Lastna vrednost $h \cdot p = l/N \cdot \omega^2/g$ je tista, pri kateri ima sistem netrivialno rešitev. Manjka nam še ena enačba; vzamemo lahko tisto pri $i = 0$, če uporabimo nesimetrično aproksimacijo za prvi odvod.

Gornji sistem lahko rešimo z diagonalizacijo ali s streljanjem: iščemo vrednost p , pri kateri zadanemo $z = 0$ pri $y = l$, če začnemo pri $y = 0$ s poljubno vrednostjo. Osnovno lastno frekvenco pa lahko določimo tudi s potenčno metodo (iteracijo).

Za gornji primer obstaja še zanimiva varianta: z uvedbo nove spremenljivke izločimo lastno vrednost:

$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{du}{dx} \right) + u = 0, \quad u(0) = - \left(\frac{du}{dx} \right) (0) = 1 \tag{1}$$

ter rešujemo od $x = 0$ s poljubno začetno vrednostjo ($u = 1$) ter odvodom $du/dx = -u = -1$. Točno določimo vrednosti x , pri katerih rešitev preseka os x : iz njih dobimo lastne vrednosti.

Naloga: Določi najnižje tri lastne frekvence in načine nihanja vrvi s streljanjem in z metodo (1). Primerjaj s poljubno metodo diagonalizacije (kot v nalogi 6).

10. naloga: Začetni problem PDE — diferenčna metoda

Diferenčne metode za aproksimativno reševanje parcialnih diferencialnih enačb so široko uporabne, saj niso omejene na preproste geometrije in linearne robne pogoje. Pri aproksimaciji odvodov s končnimi diferencami se običajno zadovoljimo z najnižjim možnim redom, formule višjega reda so zelo rade nestabilne. Tu bomo delovanje diferenčnih metod preskusili na difuzijski in valovni enačbi.

Temperaturno polje v homogeni neskončni plasti s končno debelino a (enodimenzionalni problem) je podano z enačbo

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{q}{\rho c}, \quad 0 < x < a, \quad D = \frac{\lambda}{\rho c}.$$

z začetno temperaturno sliko $T(x, t = 0) = G(x)$. Difuzijsko enačbo najpreprosteje aproksimiramo z

$$\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{k} = D \cdot \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} + Q, \quad (1)$$

kjer štejemo z indeksom i časovne sloje v razmikih $\Delta t = k$, z indeksom j pa označimo krajevne točke, $0 \leq j \leq N$ v enem sloju. Ob času $t = 0$ je z začetnim pogojem podan prvi sloj, $i = 0$, iz njega izračunamo drugi sloj, in tako naprej. Enačba (1) velja za vse notranje točke, obe robni točki pa določata robna pogoja. Ta eksplicitna shema je preprosto izvedljiva in stabilna za $p = Dk/h^2 \leq 1/2$, ni pa posebno točna, saj je v časovnem odvodu le prvega reda. Nekoliko točnejša postane za $p = 1/6$, vendar napredujemo pri tem koraku zelo počasi, saj predifundira rešitev šele v $6N^2$ korakih od enega konca krajevnega intervala do drugega.

Boljša je *Crank-Nicholsonova shema*, ki je drugega reda v času: časovno diferenco na levi strani enačbe (1) izrazimo z aritmetično sredino krajevnih diferenc v sloju i in sloju $i + 1$. Novih vrednosti v sloju $i + 1$ ne dobimo eksplicitno, pač pa kot rešitve tridiagonalnega sistema enačb. Ker je časovna zahtevnost takega sistema le $\sim N$, se z računom ne zamudimo dosti dlje, stabilnost pa je zagotovljena za poljubno velik korak. Ker rešujemo enačbo s konstantnimi koeficienti, je tudi matrika sistema vedno ista, spreminjajo se le desne strani:

$$(-pu_{j+1} + (2p + 2)u_j - pu_{j-1})_{i+1} = (pu_{j+1} - (2p - 2)u_j + pu_{j-1})_i + 2kQ.$$

Nihanje strune opisuje enačba

$$\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}, \quad 0 < x < a,$$

kjer sta predpisana začetni odmik $z(x, t = 0) = f(x)$ in začetna hitrost $\partial z / \partial t|_{t=0} = g(x)$. Za valovno enačbo obstaja stabilna eksplicitna metoda drugega reda v času. Dobimo jo, če v enačbi (1) zapišemo časovni operator na levi strani kot

$$\frac{(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})}{k^2}.$$

Vrednosti na časovnem sloju $i + 1$ izrazimo s slojema i in $i - 1$. Začetna sloja dobimo iz dveh začetnih pogojev: za funkcijo in za njen časovni odvod. V posebnem primeru, ko so začetne hitrosti povsod enake 0, morata biti sloja $i = 1$ in $i = -1$ enaka in velja

$$u_{2,j} = u_{1,j} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{kc}{h}\right)^2 \cdot (u_{1,j+1} - \dots).$$

Metoda je stabilna za $kc/h \leq 1$, kar pomeni, da zadošča $\sim N$ korakov za pot vala od enega konca intervala do drugega. Večji korak omogočajo implicitne metode, vendar z njimi ne moremo pridobiti dosti.

Naloga: Zasledovali bomo časovni razvoj dveh problemov z robnimi pogoji I. vrste.

1. Poišči temperaturni profil plasti, ki ima v začetku povsod temperaturo okolice, le med $0.2a$ in $0.3a$ je segreta na T_0 . Prav tako se ob $t = 0$ vključi stalno gretje, ki sprošča v plasti med $0.5a$ in $0.75a$ moč z gostoto $0.25T_0\lambda/a^2$. Nariši $T(x, t)$ ob $Dt/a^2 = 0$ (0.3) 3!
2. Poišči obliko strune, ki ima v začetku trikotno obliko z vrhom pri $x = 0.4a$, za čase $\omega_1 t/\pi = 0$ (0.2) 2! Začetna hitrost naj bo povsod 0.

Dodatna naloga: Obravnavaj gibanje verige enakih nihala, od katerih je vsako elastično sklopljeno z enako oddaljenima sosedoma. Če merimo čas v enotah $1/\omega$ in je ω krožna frekvenca posameznega nihala v limiti majhnih odmikov, določa zasuk i -tega nihala

$$\frac{d^2\theta_i}{dt^2} = \alpha (\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}) - \sin \theta_i,$$

kjer je α razmerje sklopitvenega koeficienta ter zmnožka teže in dolžine posameznega nihala. (Krajevni diferenčni operator na desni, s katerim pri parcialnih diferencialnih enačbah nadomestimo diferencialni operator d^2/dx^2 , je tu eksakten opis sistema.) Poskusi z začetnim pogojem

$$\theta_i(0) = 4 \operatorname{arctg} (\pm \exp (\gamma(i - i_0))), \quad \left. \frac{d\theta_i}{dt} \right|_0 = \mp 4 \frac{u\gamma \exp (\gamma(i - i_0))}{1 + \exp (2\gamma(i - i_0))},$$

ki opiše *soliton* s središčem pri nihalu i_0 . Tu je $-1 < u < 1$ normirana hitrost samotnega vala in $\gamma = 1/\sqrt{\alpha(1 - u^2)}$. Različna predznaka ustrezata solitonoma z nasprotnima vijačnostma. Oglej si trk solitonov z enakima (nasprotnima) vijačnostma! Smiselno je izbrati $\alpha \sim 3$.