



Univerza v Mariboru

Višja matematika v fiziki

Avtorji:

dr. Milan Ambrožič

dr. Robert Repnik

dr. Mitja Slavinec



Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

© **Univerzitetna založba Univerze v Mariboru**

Vse pravice pridržane. Brez pisnega dovoljenja založnika je prepovedano reproduciranje, distribuiranje, predelava ali druga uporaba tega dela ali njegovih delov v kakršnemkoli obsegu ali postopku, vključno s fotokopiranjem, tiskanjem ali shranjevanjem v elektronski obliki.

Naslov: Višja matematika v fiziki

Avtorji: doc. dr. Milan Ambrožič (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko), doc. dr. Robert Repnik (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko), doc. dr. Mitja Slavinec (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko)

Recenzenta: doc. dr. Milan Svetec (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko), prof. dr. Aleksander Zidanšek (Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko)

CIP - Kataložni zapis o publikaciji

Univerzitetna knjižnica Maribor

51-7:53(075.8)(0.034.2)

AMBROŽIČ, Milan

Višja matematika v fiziki [Elektronski vir] / Milan Ambrožič, Robert Repnik, Mitja Slavinec. - Maribor : Univerzitetna založba Univerze, 2017

Način dostopa (URL): <http://press.um.si/index.php/ump/catalog/book/215>

ISBN 978-961-286-026-4 (pdf)

1. Repnik, Robert 2. Slavinec, Mitja

COBISS.SI-ID [91540225](#)

Založnik:

Univerzitetna založba Univerze v Mariboru
Sloimškov trg 15, 2000 Maribor, Slovenija
tel. +386 2 250 42 42, fax +386 2 252 32 45
<http://press.um.si>, zalozba@um.si

Izdajateljica:

Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko
Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija
tel. +386 2 229 38 44, faks +386 2 251 81 80
<http://www.fnm.um.si>, dekanat.fnm@um.si

Cena: brezplačen izvod

Leto izida: 2017

Odgovorna oseba založnika:

prof. dr. Igor Tičar, rektor (Univerza v Mariboru)

<https://doi.org/10.18690/978-961-286-026-4>

ISBN 978-961-286-026-4

© 2017 Univerzitetna založba Univerze v Mariboru

Dostopno na: <http://press.um.si>.

© **University of Maribor Press**

All rights reserved. No part of this book may be reprinted or reproduced or utilized in any form or by any electronic, mechanical, or other means, now known or hereafter invented, including photocopying and recording, or in any information storage or retrieval system, without permission in writing from the publisher.

Title: Higher mathematics in physics

Authors: assist. prof. dr. Milan Ambrožič (University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics), assist. prof. dr. Robert Repnik (University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics), assist. prof. dr. Mitja Slavinec (University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics)

Review: assist. prof. dr. Milan Svetec (University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics), prof. dr. Aleksander Zidanšek (University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics)

CIP - Kataložni zapis o publikaciji
Univerzitetna knjižnica Maribor

51-7:53(075.8)(0.034.2)

AMBROŽIČ, Milan

Višja matematika v fiziki [Elektronski vir] / Milan Ambrožič, Robert Repnik, Mitja Slavinec. - Maribor : Univerzitetna založba Univerze, 2017

Način dostopa (URL): <http://press.um.si/index.php/ump/catalog/book/215>

ISBN 978-961-286-026-4 (pdf)

1. Repnik, Robert 2. Slavinec, Mitja

COBISS.SI-ID [91540225](#)

First published in 2017 by

University of Maribor Press

Slomškov trg 15, 2000 Maribor, Slovenia

tel. +386 2 250 42 42, fax +386 2 252 32 45

<http://press.um.si>, zalozba@um.si

Co-published by

University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics

Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenia

tel. +386 2 229 38 44, faks +386 2 251 81 80

<http://www.fnm.um.si>, dekanat.fnm@um.si

Price: free copy

For publisher:

prof. dr. Igor Tičar, rector (University of Maribor)

<https://doi.org/10.18690/978-961-286-026-4> ISBN 978-961-286-026-4

© 2017 University of Maribor Press

Available at: <http://press.um.si>.



Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

Višja matematika v fiziki

Avtorji:

dr. Milan Ambrožič

dr. Robert Repnik

dr. Mitja Slavinec

April 2017



University of Maribor Press

Higher Mathematics in Physics

Authors:

dr. Milan Ambrožič
dr. Robert Repnik
dr. Mitja Slavinec

April 2017

Višja matematika v fiziki

MILAN AMBROŽIČ, ROBERT REPNIK & MITJA SLAVINEC¹

Povzetek V fiziki se da vse zakone in izreke, povezane s fizikalnimi količinami, ki so odvisne od kraja in časa, zapisati z diferencialnimi enačbami. Le-te so lahko navadne ali parcialne, skalarne ali vektorske, velikokrat pa gre celo za sistem več ali mnogo sklopljenih diferencialnih enačb, odvisno od dimenzije in kompleksnosti fizikalnega problema. Medtem ko so diferencialne enačbe lokalna oblika zapisa fizikalnih zakonov, zajemajo integralske enačbe cel prostor ali čas ali pa določeno prostorsko in časovno območje. Značilen zgled zapisa enačb v obeh oblikah so Maxwelllove enačbe v elektromagnetizmu ali pa variacijski račun, povezan z minimizacijo proste energije. S postavitvijo in reševanjem (analitičnim ali numeričnim) teh enačb lahko zajamemo vsa področja fizike, od mehanike in gibanja točkastih teles, kjer posebna fizikalna veja analitična mehanika vpelje koncepte posplošenih koordinat in impulzov, Lagrangiana in Hamiltoniana, do obravnave skalarnih in vektorskih polj v elektromagnetizmu in valovni optiki, kvantni fiziki, termodinamiki, fiziki tekočin, teoriji verjetnosti itd.

Ključne besede: • navadne diferencialne enačbe • parcialne diferencialne enačbe • variacijski račun • Euler-Lagrangeove enačbe • verjetnost

NASLOV AVTORJEV: dr. Milan Ambrožič, docent, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija, e-pošta: milan.ambrozic@um.si. dr. Robert Repnik, docent, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija, e-pošta: robert.repnik@um.si. dr. Mitja Slavinec, docent, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija, e-pošta: mitja.slavinec@um.si.

<https://doi.org/10.18690/978-961-286-026-4> ISBN 978-961-286-026-4

© 2017 Univerzitetna založba Univerze v Mariboru

Dostopno na: <http://press.um.si>.

Higher Mathematics in Physics

MILAN AMBROŽIČ, ROBERT REPNIK & MITJA SLAVINEC²

Abstract In physics all the laws and theorems connected with the physical quantities which vary in space and time, can be written with differential equations. These can be ordinary or partial, scalar or vector, but in several cases there is a system of a few or many coupled differential equations, depending on the dimension and complexity of the physical problem. While the differential equations are the local form of writing physical laws, the integral equations contain the whole space or time, or a definite space and time area. A typical example of writing equations in both forms is a set of Maxwell equations in electromagnetism or variational calculus connected with the minimization of the free energy. By setting and solving (analytically or numerically) these equations we can capture all the areas of physics, from mechanics and movement of point-like bodies, where the special physical branch called analytical mechanics introduces the concepts of generalized coordinates and impulses, Lagrangian and Hamiltonian, up to treatment of scalar and vector fields in electromagnetism and wave optics, quantum physics, thermodynamics, physics of fluids, probability theory etc.

Keywords: • ordinary differential equations • partial differential equations • variational calculus • Euler-Lagrange equations • probability

CORRESPONDENCE ADDRESS: Milan Ambrožič, Ph.D., Assistant Professor, University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenia, e-mail: milan.ambrozic@um.si, Robert Repnik, Ph.D., Assistant Professor, University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenia, e-mail: robert.repnik@um.si, Mitja Slavinec, Ph.D., Assistant Professor, University of Maribor, Faculty of Natural Sciences and Mathematics, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenia, e-mail: mitja.slavinec@um.si

<https://doi.org/10.18690/978-961-286-026-4> ISBN 978-961-286-026-4

© 2017 University of Maribor Press

Available at: <http://press.um.si>.

Kazalo

Predgovor.....	1
DODATNA MATEMATIČNA ORODJA.....	3
Diracova delta funkcija.....	3
♥ Računski zgled 1.1.....	4
♥ Računski zgled 1.2.....	4
♥ Računski zgled 1.3.....	5
♥ Računski zgled 1.4.....	5
♥ Računski zgled 1.5.....	6
♥ Računski zgled 1.6.....	7
♥ Računski zgled 1.7.....	8
♥ Računski zgled 1.8.....	9
Linearna interpolacija.....	9
♥ Računski zgled 1.9.....	11
Linearizacija funkcij in linearna regresija.....	12
♥ Računski zgled 1.10.....	13
♥ Računski zgled 1.11.....	13
♥ Računski zgled 1.12.....	14
Konvolucija funkcij.....	14
♥ Računski zgled 1.13.....	14
♥ Računski zgled 1.14.....	15
Funkcije več spremenljivk.....	16
♥ Računski zgled 1.15.....	16
♥ Računski zgled 1.16.....	17
♥ Računski zgled 1.17.....	18
♥ Računski zgled 1.18.....	20
♥ Računski zgled 1.19.....	21
Fourierova in Laplaceova transformacija.....	23
♥ Računski zgled 1.20.....	25
NAVADNE DIFERENCIALNE ENAČBE (NDE).....	26
NDE z ločljivima spremenljivkama.....	26
♥ Računski zgled 2.1.....	26
♥ Računski zgled 2.2.....	27
♥ Računski zgled 2.3.....	31
♥ Računski zgled 2.4.....	33
Linearna NDE s konstantnimi koeficienti.....	37
♥ Računski zgled 2.5.....	37
♥ Računski zgled 2.6.....	38
♥ Računski zgled 2.7.....	38
♥ Računski zgled 2.8.....	39
Eulerjeva diferencialna enačba.....	40

♥ Računski zgled 2.9	41
Splošnejši zgledi NDE.....	41
♥ Računski zgled 2.10	41
♥ Računski zgled 2.11	43
♥ Računski zgled 2.12	44
♥ Računski zgled 2.13	45
♥ Računski zgled 2.14	46
♥ Računski zgled 2.15	48
PARCIALNE DIFERENCIALNE ENAČBE (PDE).....	49
♥ Računski zgled 3.1	49
♥ Računski zgled 3.2	50
♥ Računski zgled 3.3	51
♥ Računski zgled 3.4	52
♥ Računski zgled 3.5	53
♥ Računski zgled 3.6	60
♥ Računski zgled 3.7	61
♥ Računski zgled 3.8	62
♥ Računski zgled 3.9	65
♥ Računski zgled 3.10	66
♥ Računski zgled 3.11	67
♥ Računski zgled 3.12	68
♥ Računski zgled 3.13	69
♥ Računski zgled 3.14	69
♥ Računski zgled 3.15	70
♥ Računski zgled 3.16	71
♥ Računski zgled 3.17	73
♥ Računski zgled 3.18	76
♥ Računski zgled 3.19	77
♥ Računski zgled 3.20	80
SKLOPLJENI SISTEM DIFERENCIALNIH ENAČB.....	83
♥ Računski zgled 4.1	83
♥ Računski zgled 4.2	84
♥ Računski zgled 4.3	85
♥ Računski zgled 4.4	88
♥ Računski zgled 4.5	90
♥ Računski zgled 4.6	91
♥ Računski zgled 4.7	94
♥ Računski zgled 4.8	95
♥ Računski zgled 4.9	97
VARIACIJSKI RAČUN	101
Variacijski račun v splošnem	101
♥ Računski zgled 5.1	103
♥ Računski zgled 5.2	104
♥ Računski zgled 5.3	106
♥ Računski zgled 5.4	109
♥ Računski zgled 5.5	112

♥ Računski zgled 5.6.....	114
♥ Računski zgled 5.7.....	116
Lagrangian.....	117
♥ Računski zgled 5.8.....	118
♥ Računski zgled 5.9.....	119
♥ Računski zgled 5.10.....	120
♥ Računski zgled 5.11.....	122
♥ Računski zgled 5.12.....	123
Hamiltonian in energija.....	125
♥ Računski zgled 5.8 → 5.13.....	126
♥ Računski zgled 5.9 → 5.14.....	126
♥ Računski zgled 5.10 → 5.15.....	128
♥ Računski zgled 5.11 → 5.16.....	129
♥ Računski zgled 5.12 → 5.17.....	129
VERJETNOST.....	133
Naključna spremenljivka z diskretnim spektrom.....	133
♥ Računski zgled 6.1.....	133
♥ Računski zgled 6.2.....	134
♥ Računski zgled 6.3.....	134
♥ Računski zgled 6.4.....	134
♥ Računski zgled 6.5.....	135
Naključna spremenljivka z zveznim spektrom.....	137
♥ Računski zgled 6.6.....	137
♥ Računski zgled 6.7.....	137
♥ Računski zgled 6.8.....	140
♥ Računski zgled 6.9.....	141
♥ Računski zgled 6.10.....	142
♥ Računski zgled 6.11.....	144
MONTE CARLO SIMULACIJE.....	147
♥ Računski zgled 7.1.....	147
♥ Računski zgled 7.2.....	148
♥ Računski zgled 7.3.....	151
♥ Računski zgled 7.4.....	153
♥ Računski zgled 7.5.....	154
♥ Računski zgled 7.6.....	154
♥ Računski zgled 7.7.....	159
♥ Računski zgled 7.8.....	161
♥ Računski zgled 7.9.....	162
♥ Računski zgled 7.10.....	164
LITERATURA.....	171

Predgovor

MILAN AMBROŽIČ, ROBERT REPNIK & MITJA SLAVINEC³

Glavni cilj tega dela je razumevanje in reševanje diferencialnih enačb, ki pomenijo matematični jezik teoretične in aplikativne fizike. Prvi in za neizkušene morda najtežji korak pri dani fizikalni nalogi je pravilna postavitev diferencialne enačbe. Kot se je v eni od svojih knjig slikovito izrazil sedaj že pokojni slovenski matematik France Križanič, je diferencialna enačba uganka za neznano funkcijo. Še težja uganka utegne biti variacijski račun, ki pa nas spet povede do nastavitve in reševanja navadne ali parcialne diferencialne enačbe. Uporaba Lagrangiana in Hamiltoniana, ki je tudi matematično povezana z variacijskim računom, pa je koristna npr. pri geometrijsko bolj zapletenih problemih v mehaniki in drugih fizikalnih vejah. Najprej pa bomo bežno obdelali nekaj splošnejših matematičnih orodij, na primer, uporabo Diracove funkcije delta. Nazadnje se bomo nekoliko ukvarjali z verjetnostnim računom in simulacijami Monte Carlo.

NASLOV AVTORJEV: dr. Milan Ambrožič, docent, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija, e-pošta: milan.ambrozic@um.si. dr. Robert Repnik, docent, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija, e-pošta: robert.repnik@um.si. dr. Mitja Slavinec, docent, Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija, e-pošta: mitja.slavinec@um.si.

<https://doi.org/10.18690/978-961-286-026-4> ISBN 978-961-286-026-4

© 2017 Univerzitetna založba Univerze v Mariboru

Dostopno na: <http://press.um.si>.

DODATNA MATEMATIČNA ORODJA

V tem poglavju bomo na kratko opisali nekaj matematičnih orodij, pomembnih pri teoretični fiziki, pri teoretični analizi eksperimentalnih rezultatov in numeričnih simulacij in pri reševanju konkretnih matematično-fizikalnih problemov [1–6].

Diracova delta funkcija

Glavna lastnost Diracove delta funkcije $\delta(x)$ v eni dimenziji (1D) je [1–8]:

$$\int_{x_0-a}^{x_0+a} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0) \quad (1.1)$$

Pri tem je funkcija f pod integralom poljubna funkcija (da le ni nenavadno »divja«), a pa poljubno pozitivno število, lahko še tako majhno. Ker je interval okrog točke x_0 poljubno majhen, mora biti delta funkcija pri $x \neq x_0$ enaka nič, saj integracijsko območje zunaj majhnega intervala ne sme prispevati h končni vrednosti $f(x_0)$ na desni strani enačbe (1.1). Ker smo argument funkcije pisali kot $x - x_0$, mora torej veljati $\delta(x) = 0$ za $x \neq 0$. Hkrati pa mora veljati $\delta(0) = \infty$. Nič se ne spremeni, če v enačbi (1.1) razširimo integracijski interval na celo realno os. Iz definicije (1.1) izhaja še nekaj lastnosti delta funkcije:

$$\int_{x_0-a}^{x_0+a} \delta(x-x_0)dx = 1 \quad (1.2 \text{ a})$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (1.2 \text{ b})$$

$$\delta[(x-x_1)(x-x_2)] = \frac{\delta(x-x_1) + \delta(x-x_2)}{|x_1-x_2|} \quad (1.2 \text{ c})$$

Enačbo (1.2 a) dobimo, če v (1.1) vstavimo $f(x) = 1$. Do enačbe (1.2 b) pridemo z uvedbo nove integracijske spremenljivke, npr. $u = ax$ za $a > 0$. Enačba pove tudi, da delta funkcijo vzamemo kot sodo funkcijo; od tod imamo absolutno vrednost parametra a na desni strani enačbe. Pri enačbi (1.2 c) predpostavimo različni vrednosti x_1 in x_2 ; enačba velja preprosto zato, ker lahko okoli vsake točke x_i izberemo dovolj majhen interval, da ne vsebuje druge točke. Enačbo (1.2 b) posplošimo še tako, da namesto linearne funkcije ax v argumentu na levi strani vzamemo poljubno monotono naraščajočo ali pa monotono padajočo funkcijo, ki ima enostavno ničlo, npr. pri $x = x_0$:

$$\delta(g(x)) = \frac{1}{|g'(x_0)|} \delta(x-x_0) \quad (1.2 \text{ č})$$

Zadnja enačba velja zato, ker lahko v majhni okolici $x = x_0$ funkcijo $g(x)$ aproksimiramo z linearno funkcijo: $g(x) \approx g'(x)(x - x_0)$. Enostavna ničla pomeni, da je tam prvi odvod funkcije različen od nič. Če pa funkcija $g(x)$ ni monotona, ima pa same enostavne ničle x_i , $i = 1$ do N , lahko enačbo (1.2 č) posplošimo:

$$\delta(g(x)) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{|g'(x_i)|} \delta(x - x_i) \quad (1.2 d)$$

V treh dimenzijah (3D) definiramo delta funkcijo kot produkt treh 1D delta funkcij. Če vzamemo krajevna vektorja $\mathbf{r} = (x, y, z)$ in $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$, potem je $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0) \cdot \delta(y - y_0) \cdot \delta(z - z_0)$.

♥ Računski zgled 1.1

Vzemimo potenčno funkcijo $f(x) = Ax^n$, n pa naravno število. Izračunajte naslednji integral:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x^2 - b^2) dx$$

Argument delta funkcije razstavimo in v skladu z enačbo (1.2 c) integral razcepimo na vsoto dveh integralov:

$$I = \frac{A}{2b} \left[\int_{-b-\varepsilon}^{-b+\varepsilon} x^n \delta(x+b) dx + \int_{b-\varepsilon}^{b+\varepsilon} x^n \delta(x-b) dx \right]$$

Mislimo si, da je število ε , ki podaja interval okrog obeh ničel polinoma $x^2 - b^2$, majhen. Bodimo pozorni na to, da enačba (1.2 c) vsebuje vse člene z delta funkcijo samo, če začetni integracijski interval zajema vse ničle polinoma kot argumenta delta funkcije. V našem primeru to velja, ker gre x od $-\infty$ do ∞ . Končajmo račun:

$$I = \frac{A}{2b} \left[(-b)^n + b^n \right]$$

Za sodi n sta oba člena pozitivna, za lihi n pa nasprotno enaka, zato velja: $I = 0$ za lihi n in $I = Ab^{n-1}$ za sodi n . ♠

♥ Računski zgled 1.2

Izračunajte naslednji integral:

$$I = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} A \exp(kx) \delta(B \sin(kx)) dx$$

Pri tem naj bo ε majhno število, tako da je sinusna funkcija na intervalu $(-\varepsilon, \varepsilon)$ monotonno naraščajoča. Predpostavimo pozitivne parametre A , B in k .

Tudi če sinusna funkcija ni povsod monotona, lahko uporabimo enačbo (1.2 č) na dovolj majhnem intervalu, kjer je funkcija monotona in ima enostavno ničlo. Sinusna funkcija ima res ničlo pri $x = 0$, njen odvod pa je kosinusna funkcija, ki je tam različna od nič. Zato velja:

$$I = \frac{1}{Bk \cos(k \cdot 0)} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} A \exp(kx) \delta(x) dx = \frac{A \exp(k \cdot 0)}{Bk} = \frac{A}{Bk} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 1.3

Izračunajte naslednji prostorninski integral s 3D »gaussovko«:

$$I = \int A \exp(-k_1 x^2 - k_2 y^2 - k_3 z^2) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) dV$$

Integriranje gre po vsem prostoru, $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$.

3D delta funkcijo razcepimo na produkt treh 1D delta funkcij, trojni integral pa na produkt treh neodvisnih integralov:

$$I = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-k_1 x^2) \delta(x - x_0) dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-k_2 y^2) \delta(y - y_0) dy \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-k_3 z^2) \delta(z - z_0) dz$$

$$I = A \exp(-k_1 x_0^2 - k_2 y_0^2 - k_3 z_0^2) \spadesuit$$

♥ Računski zgled 1.4

Izračunajte naslednji prostorninski integral s 3D »gaussovko« in s sferično simetrijo:

$$I = \int A \exp(-kr^2) \delta(4\pi r^2(r - r_0)) dV$$

Integriranje gre skoraj po vsem prostoru, iz integracijskega območja pa je izrezana samo majhna kroglica s polmerom $0 < \varepsilon < r_0$. Bodite pozorni na argument delta funkcije: $4\pi r^2(r - r_0)$. Čeprav je integral prostorninski, je ta delta funkcija 1D, saj je odvisna samo od polmera r .

Nalogo rešimo s sferičnimi koordinatami. Zaradi sferične simetrije nam da integriranje po obeh sferičnih kotih samo faktor 4π . Potem moramo izračunati tale 1D integral:

$$I = 4\pi A \cdot \int_{\varepsilon}^{\infty} \exp(-kr^2) \delta(4\pi r^2(r - r_0)) r^2 dr$$

Zaradi prostorninskega elementa $dV = 4\pi r^2 dr$ smo v integralu dodali faktor r^2 . Pravilno moramo interpretirati še delta funkcijo z malce nenavadnim argumentom. Faktor 4π ne povzroča težav, saj ga lahko pišemo pred delta funkcijo kot delitelj po pravilu (1.2 b). Bolj problematičen je v splošnem faktor r^2 pred oklepajem $(r - r_0)$. Zaradi njega ima funkcija $g(r) = r^2(r - r_0)$ ničlo tudi pri $r = 0$, in sicer ta ničla ni enostavna, temveč dvojna. Vendar pa smo v naši nalogi to ničlo izključili iz integracijskega območja zaradi $\varepsilon > 0$. Ničla $r = r_0$ pa je enostavna in tam velja $g'(r_0) = r_0^2$. Končajmo nalogo:

$$I = 4\pi A \cdot \int_{\varepsilon}^{\infty} \exp(-kr^2) \frac{1}{4\pi r_0^2} \delta(r - r_0) r^2 dr = A \exp(-kr_0^2)$$

Pri vstavitvi $r = r_0$ sta se namreč krajšala faktorja r_0^2 . ♠

♥ Računski zgled 1.5

Vzemimo naslednjo funkcijo, odvisno od parametra $\varepsilon > 0$:

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$$

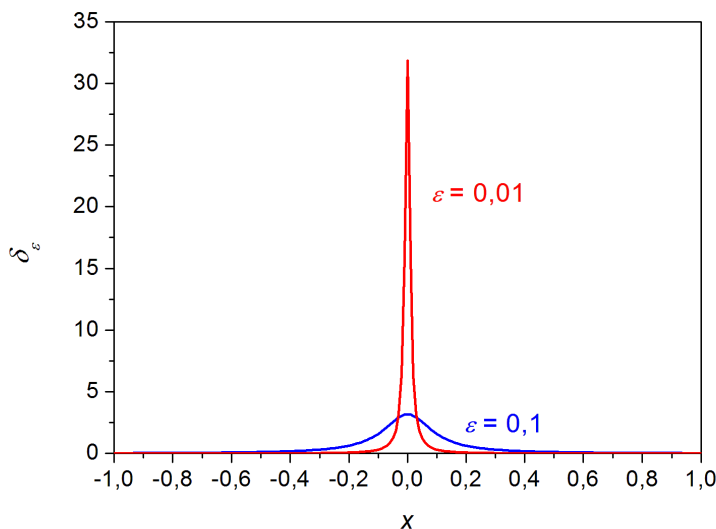
Dokažite, da se v limiti $\varepsilon \rightarrow 0$ vede kot delta funkcija.

Funkcija za dve različni vrednosti ε je prikazana na sliki 1. V limiti $\varepsilon \rightarrow 0$ res velja: $\delta_\varepsilon(0) = \infty$, za druge vrednosti x pa je funkcija enaka nič [7]. Preverimo integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \frac{1}{\pi} \arctan \frac{x}{\varepsilon} \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1$$

To je že čisto dovolj, da vemo, da je $\delta_\varepsilon(x)$ v limiti $\varepsilon \rightarrow 0$ res delta funkcija. Vendar za vajo vseeno izračunajmo naslednji integral z dovolj pohlevno funkcijo (pohlevno vsaj v primerjavi z delta funkcijo, kar pa sploh ni kaka posebna zahteva):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-a}^a f(x) \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx$$



Slika 1: Graf funkcije δ_ε

Tu smo lahko namesto ∞ pri mejah integrala vzeli zelo majhno število a in ne bomo posebej poudarjali, da tudi a lahko v limiti pošljemo praktično proti nič. To je zato, ker je delta funkcija izven intervala $(-a, a)$ tako in tako enaka nič in ne prispeva k integralu. Ker pa se »pohlevna« funkcija $f(x)$ v zelo majhnem intervalu »skoraj« nič ne spreminja, lahko vzamemo kar konstantno vrednost $f(0)$ in jo izpostavimo:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = f(0) \cdot \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-a}^a \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx$$

Integral delta funkcije pa je 1, ne glede na velikost intervala $(-a, a)$. Dokazali smo, da naša funkcija ustreza osnovni definiciji delta funkcije (1.1). Pravzaprav smo v tem zgledu implicitno pokazali še nekaj splošnejšega, neodvisno od oblike funkcije, ki naj bi predstavljala delta funkcijo: če ima neka matematična funkcija te tri lastnosti: 1) $f(x) = 0$ za $x \neq 0$, 2) $f(0) = \infty$, 3) njen integral je enak 1 za poljuben interval, ki vsebuje točko $x = 0$, potem je ta funkcija delta funkcija, ki ustreza definiciji (1.1). Z zgledom pa smo nakazali tudi, da lahko delta funkcijo predstavlja kaka navadna, dobro definirana matematična funkcija, če vzamemo ustrezno limito enega od njenih parametrov. Drugi očitni zgled pri roki je normalizirana Gaussova funkcija. Če vzamemo limito, ko gre standardna deviacija Gaussove funkcije proti vrednosti nič, se vrh funkcije vse bolj viša, njene vrednosti pri $x \neq 0$ pa so vse manjše, tako da Gaussova funkcija dobi lastnosti delta funkcije.

V teoriji je zelo pomembna tudi razširitev zgoraj zapisane predstavnice delta funkcije v kompleksno obliko. Najprej opazimo, da jo lahko zapišemo kot realni del neke kompleksne funkcije:

$$\delta_{\varepsilon}(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\pi} \cdot \frac{i}{x + i\varepsilon} \right]$$

Hkrati se lahko hitro prepričamo, da velja tale enakost, saj integral na desni strani enačbe zlahka izračunamo:

$$\frac{i}{x + i\varepsilon} = \int_0^{\infty} \exp[ik(x + i\varepsilon)] dk$$

Da je vrednost integriranega izraza na zgornji meji $k \rightarrow \infty$ enaka nič, zagotavlja realni faktor $\exp(-k\varepsilon)$, samo da je ε pozitiven, pa če je še tako majhen. Razširimo integral na spodnjo mejo $-\infty$, pa lahko zapišemo vse skupaj:

$$\delta_{\varepsilon}(x) = \operatorname{Re} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ikx - \varepsilon|k|] dk \right]$$

Zaradi spodnje meje smo morali vzeti v drugem členu v eksponentu absolutno vrednost k . Nazadnje se izkaže, da sploh ne potrebujemo oznake Re pred integralom, ker dobimo pri integriranju samo realno komponento. To lahko bralec najlaže preveri, če integracijsko območje razdeli na dva poltraka: $k \leq 0$ in $k \geq 0$, saj moramo pri vsakem poltraku člen z absolutno vrednostjo k v eksponentu zapisati drugače. Zaključimo zgodbo in zapišemo pomembno različico delta funkcije, ki jo veliko uporabljamo npr. v kvantni mehaniki:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ikx - \varepsilon|k|] dk \right] \spadesuit$$

♥ Računski zgled 1.6

Uporabite enačbo (1.2 d) za posplošitev enačbe (1.2 c) na več enostavnih faktorjev na levi strani:

$$\delta[(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_N)] = \sum_{i=1}^N A_i \delta(x-x_i)$$

Izračunajte koeficiente A_i . Posebej zapišite izraz za $N=3$. Ničle x_i so vse različne.

Koeficienti A_i na desni strani enačbe so obratne absolutne vrednosti ustreznih odvodov funkcije $g = (x-x_1)\dots(x-x_N)$ v argumentu delta funkcije. Zato izrazimo najprej v splošnem odvod funkcije, ki ga zaradi praktičnosti pustimo v obliki vsote produktov:

$$\frac{dg}{dx} = (x-x_2)\dots(x-x_N) + (x-x_1)(x-x_3)\dots(x-x_N) + \dots + (x-x_1)\dots(x-x_{N-1})$$

V vsakem členu manjka drugi faktor, npr. v i -tem členu manjka oklepaj $(x-x_i)$. Ta oklepaj je pri odvodu »izginil«, ker smo ravno ta faktor odvajali. Če pa zdaj v to vsoto produktov vstavimo x_i , so enaki nič vsi členi razen i -tega:

$$\frac{dg}{dx}(x_i) = (x_i-x_1)(x_i-x_2)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_N)$$

V A_i moramo vzeti absolutno vrednost tega:

$$A_i = \frac{1}{|(x_i-x_1)(x_i-x_2)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_N)|}$$

V primeru $N=3$ velja:

$$\delta[(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)] = \sum_{i=1}^3 A_i \delta(x-x_i)$$

$$A_1 = \frac{1}{|(x_1-x_2)(x_1-x_3)|}, \quad A_2 = \frac{1}{|(x_2-x_1)(x_2-x_3)|}, \quad A_3 = \frac{1}{|(x_3-x_1)(x_3-x_2)|}$$

♠

♥ Računski zgled 1.7

Heavisideova funkcija $H(x)$ je stopničasta funkcija, nezvezna pri $x=0$. Zanja velja: $H(x)=0$ za $x<0$ in $H(x)=1$ za $x>0$. Dokažite, da je njen odvod delta funkcija.

Označimo $\delta(x) = dH(x)/dx$, čeprav še ne vemo, ali je to res delta funkcija. Ker je razen pri $x=0$ funkcija $H(x)$ konstantna, je njen odvod: $\delta(x)=0$ pri $x \neq 0$. Pri $x=0$ pa definiramo odvod kot limito:

$$\delta(0) = \frac{dH}{dx}(0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{H(h/2) - H(-h/2)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1-0}{h} = \infty$$

Dva pogoja za delta funkcijo sta torej izpolnjena, preveriti moramo le še integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dH}{dx} dx = H(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1 - 0 = 1$$

Seveda bi enak rezultat dobili, če bi integrirali le od $-\varepsilon$ do ε za poljubno majhen ε . Omenimo še, da bi približek Heavisideove funkcije po analogiji z zgledom 1.5 najprej definirali kot zvezno, odsekoma linearno funkcijo s parametrom ε : $H_\varepsilon(x) = 0$ za $x \leq -\varepsilon$, $H_\varepsilon(x) = kx + 1/2$ za $-\varepsilon \leq x \leq \varepsilon$, $H_\varepsilon(x) = 1$ za $x \geq \varepsilon$. Da se vse ujema, mora biti $k = 1/(2\varepsilon)$. Prava Heavisideova funkcija je potem H_ε v limiti $\varepsilon \rightarrow 0$. Skladno s tem je odvod $dH_\varepsilon(x)/dx$ približek delta funkcije: $\delta_\varepsilon(x) = 0$ za $x \leq -\varepsilon$, $\delta_\varepsilon(x) = k$ za $-\varepsilon \leq x \leq \varepsilon$, $\delta_\varepsilon(x) = 0$ za $x \geq \varepsilon$. ♠

♥ Računski zgled 1.8

Zapišite prostorninsko gostoto električnega naboja v primeru točkastega naboja z delta funkcijo. Podobno naredite za električni dipol in za površinsko porazdeljen naboj.

Naj se točkasti naboj e nahaja pri $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$. Tedaj je gostota naboja [8]:

$$\rho(\vec{r}) = e\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Pri dipolu naj bo pozitiven naboj e pri $\mathbf{r}_0 + \mathbf{a}/2$, negativni $-e$ pa pri $\mathbf{r}_0 - \mathbf{a}/2$. Gostota naboja je:

$$\rho(\vec{r}) = e\delta(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{a}/2) - e\delta(\vec{r} - \vec{r}_0 + \vec{a}/2)$$

Enačbo ploskve v prostoru, na kateri se nahaja površinski naboj, zapišemo v parametrični obliki $\mathbf{r}(u, v)$. To pomeni, da vse tri komponente krajevnega vektorja vsake točke na ploskvi lahko zapišemo z neodvisnima spremenljivkama u in v : $x = x(u, v)$, $y = y(u, v)$, $z = z(u, v)$. Prostorninsko gostoto naboja izrazimo sedaj s površinsko gostoto (ki se v splošnem lahko spreminja po ploskvi) in z 1D delta funkcijo:

$$\rho(\vec{r}) = \sigma(\vec{r}(u, v))\delta(r_\perp)$$

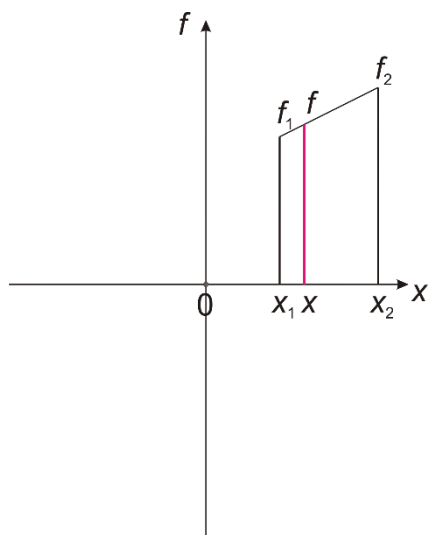
Pri tem je $\sigma = de/dS$, r_\perp pa je najkrajša (»pravokotna«) razdalja med točko in ploskvijo. Za točke, ki so zelo blizu ploskve (in edino te se pomembne v delta funkciji) lahko najkrajšo razdaljo točke od ploskve poiščemo tako, da točka leži na ustrezni normali na ploskev. Smer normale na ploskev v dani točki ploskve pa dobimo z naslednjim vektorskim produktom: $\partial\mathbf{r}/\partial u \times \partial\mathbf{r}/\partial v$. Če je ploskev ravnina $z = 0$, potem je zapis gostote naboja preprost, ker lahko uporabimo kar kartezične koordinate:

$$\rho(x, y, z) = \sigma(x, y)\delta(z)$$

♠

Linearna interpolacija

Linearno interpolacijo uporabljamo npr. pri analizi eksperimentalnih podatkov ali pa tistih iz numeričnih simulacij, kjer imamo diskretne mreže in imamo vrednosti iskane funkcije samo v diskretnih točkah [9–10]. Obakrat gre za to, da ocenimo vrednost skalarne funkcije v neki »vmesni« točki, za katero nimamo neposrednega podatka. V poštev pridejo problemi v eni, dveh ali pa treh dimenzijah, če nas zanima npr. skalarno polje. Lahko gre seveda tudi za funkcijo drugih neodvisnih spremenljivk, vendar bodimo konkretni in za neodvisne spremenljivke vzemimo kar kartezične koordinate. Bistvo linearne interpolacije pri drugih neodvisnih spremenljivkah je namreč isto. Gremo po vrsti in obravnavajmo najprej 1D problem (slika 2).



Slika 2: Linearna interpolacija za 1D funkcijo $f(x)$

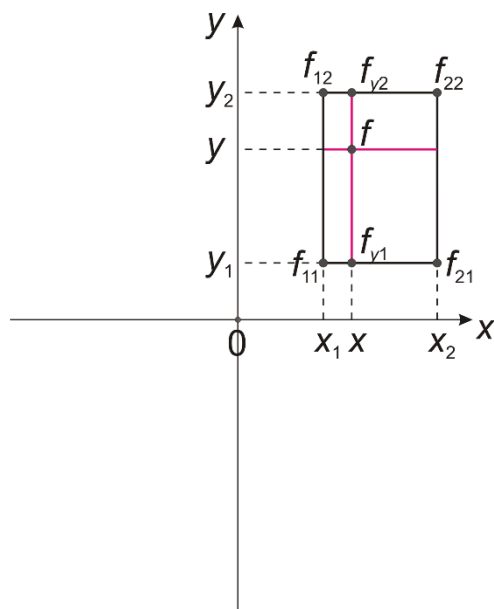
Poznamo vrednosti funkcije: $f(x_1) = f_1$ in $f(x_2) = f_2$. Zanima nas vrednost $f(x)$ pri $x_1 < x < x_2$. Iz pogoja za koeficient premice: $k = (f - f_1)/(x - x_1) = (f_2 - f_1)/(x_2 - x_1)$ dobimo:

$$f = \frac{f_1 \cdot (x_2 - x) + f_2 \cdot (x - x_1)}{x_2 - x_1} \quad (1.3 \text{ a})$$

Včasih pa nas zanima obratno: pri katerem x je vrednost funkcije enaka f , če poznamo $f(x_1) = f_1$ in $f(x_2) = f_2$? Tedaj samo izrazimo x iz enačbe (1.3 a) ali pa preprosto zamenjamo vlogi neodvisne in odvisne spremenljivke:

$$x = \frac{x_1 \cdot (f_2 - f) + x_2 \cdot (f - f_1)}{f_2 - f_1} \quad (1.3 \text{ b})$$

Obravnavajmo 2D problem. Poznamo vrednosti funkcije $f(x, y)$ v ogliščih pravokotnika na sliki 3: $f(x_1, y_1) = f_{11}$, $f(x_2, y_1) = f_{21}$, $f(x_1, y_2) = f_{12}$, $f(x_2, y_2) = f_{22}$. Zanima nas vrednost f v poljubni točki v notranjosti pravokotnika.



Slika 3: Linearna interpolacija za 2D funkcijo $f(x, y)$

V tem primeru lahko naredimo 1D linearno interpolacijo v dveh korakih. Najprej v točkah $T_1(x, y_1)$ in $T_2(x, y_2)$ na »vodoravnih« stranicah pravokotnika naredimo interpolacijo glede na spremenljivko x po enačbi (1.3 a) in ti dve vrednosti označimo kar z f_{y_1} in f_{y_2} :

$$f_{y_1} = \frac{f_{11} \cdot (x_2 - x) + f_{21} \cdot (x - x_1)}{x_2 - x_1}$$

$$f_{y_2} = \frac{f_{12} \cdot (x_2 - x) + f_{22} \cdot (x - x_1)}{x_2 - x_1}$$

Potem pa uporabimo vrednosti f_1 in f_2 za interpolacijo po spremenljivki y :

$$f = \frac{f_{y_1} \cdot (y_2 - y) + f_{y_2} \cdot (y - y_1)}{y_2 - y_1}$$

Ko zložimo vse skupaj, je rezultat:

$$f = \frac{f_{11} \cdot (x_2 - x)(y_2 - y) + f_{21} \cdot (x - x_1)(y_2 - y) + f_{12} \cdot (x_2 - x)(y - y_1) + f_{22} \cdot (x - x_1)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \quad (1.4)$$

S podobno logiko se lotimo še 3D problema. Poznamo vrednosti funkcije $f(x, y, z)$ v vseh 8 ogliščih kvadra: $f(x_1, y_1, z_1) = f_{111}, f(x_2, y_1, z_1) = f_{211}, \dots, f(x_2, y_2, z_2) = f_{222}$. Vrednosti funkcije v notranjosti kvadra izrazimo takole:

$$f = \frac{1}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)(z_2 - z_1)} \cdot \sum_{i,j,k=1}^2 f_{ijk} g_{ijk}(x, y, z) \quad (1.5)$$

Pri tem so funkcije g_{ijk} produkti treh enočlenikov:

$$g_{111} = (x_2 - x)(y_2 - y)(z_2 - z)$$

$$g_{211} = (x - x_1)(y_2 - y)(z_2 - z)$$

$$g_{222} = (x - x_1)(y - y_1)(z - z_1)$$

Po tem vzorcu lahko linearno interpolacijo razširimo na funkcije še več spremenljivk, npr. na dinamično fizikalno skalarno polje $f(x, y, z, t)$. Pri vektorskih poljih, kot je npr. 3D polje $\mathbf{f}(x, y, z, t)$, naredimo linearno interpolacijo na enak način, in sicer za vsako komponento polja (f_x, f_y in f_z) posebej.

♥ Računski zgled 1.9

V ogliščih pravokotnika s stranicama $a = 10$ cm in $b = 4$ cm izmerimo naslednje vrednosti električnega potenciala: $\varphi_{11} = \varphi(0, 0) = 10$ V, $\varphi_{21} = \varphi(a, 0) = 12,2$ V, $\varphi_{12} = \varphi(0, b) = 8,5$ V in $\varphi_{22} = \varphi(a, b) = 10,4$ V. Z linearno interpolacijo izračunajte potencial v točki $(a/5, b/3)$.

Zaradi lepšega zapisa smo izbrali koordinatni sistem tako, da velja $x_1 = y_1 = 0$. Uporabimo zgoraj izpeljano enačbo za 2D interpolacijo, le da jo zapišemo s parametroma a in b :

$$\varphi = \frac{\varphi_{11} \cdot \frac{4a}{5} \cdot \frac{2b}{3} + \varphi_{21} \cdot \frac{a}{5} \cdot \frac{2b}{3} + \varphi_{12} \cdot \frac{4a}{5} \cdot \frac{b}{3} + \varphi_{22} \cdot \frac{a}{5} \cdot \frac{b}{3}}{ab}$$

$$\varphi = \frac{8\varphi_{11} + 2\varphi_{21} + 4\varphi_{12} + \varphi_{22}}{15} = 9,92 \text{ V}$$

V vsakem primeru je interpolirana vrednost odvisne spremenljivke v notranjosti pravokotnika med najmanjšo in največjo vrednostjo v ogliščih. ♠

Linearizacija funkcij in linearna regresija

Obravnavajmo najprej linearno funkcijo $y = kx + n$. Pri tem si spremenljivki x in y ter parametra k in n mislimo kot fizikalne količine. Naloga je lahko povezana z eksperimentom: če pričakujemo linearno teoretično zvezo med x in y in če izmerimo »točke«, to je, pare meritev (x_i, y_i) , $i = 1 - N$, poiščemo premico, ki se najbolj prilega točkam v grafu [1, 6, 10]. Zaradi lažjega sklepanja vzemimo, da spremenljivko x merimo zelo natančno, spremenljivka y pa je obremenjena z mersko napako (čeprav je v bistvu vseeno, tudi če sta obe spremenljivki obremenjeni z napako). Zato posamezne točke ne ležijo natančno na premici, kakorkoli jo potegnemo med njimi. Za kvantitativno merilo najboljšega prileganja iskane premice točkam, ki ga seveda z lahkoto programiramo na računalniku, vzamemo, da je vsota kvadratov »navpičnih« razdalj vseh točk od premice minimalna. Temu lahko rečemo y linearna regresija in na kratko označimo z YLR. Zapišimo torej spremenljivko, ki jo minimiziramo:

$$D(k, n) = \sum_{i=1}^N d_i^2 = \sum_{i=1}^N (kx_i + n - y_i)^2$$

Poudarili smo, da je D funkcija parametrov k in n , ki ju lahko poljubno izbiramo, saj ju še ne poznamo. Poznamo le vrednosti x_i in y_i . Tako pridemo do problema iskanja ekstrema: izračunati moramo parametra k in n , da bo imela funkcija $D(k, n)$ ekstrem. Veljati mora torej:

$$\frac{\partial D}{\partial k} = 2 \sum_{i=1}^N x_i (kx_i + n - y_i) = 0$$

$$\frac{\partial D}{\partial n} = 2 \sum_{i=1}^N (kx_i + n - y_i) = 0$$

Dobili smo sistem dveh linearnih enačb za k in n , katerega rešitev je:

$$k = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i y_i - \sum_{i=1}^N x_i \cdot \sum_{i=1}^N y_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \quad (1.6 \text{ a})$$

$$n = \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2 \cdot \sum_{i=1}^N y_i - \sum_{i=1}^N x_i \cdot \sum_{i=1}^N x_i y_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \quad (1.6 \text{ b})$$

Če v obeh enačbah delimo števec in imenovalc z N^2 , lahko parametra elegantno izrazimo s povprečji:

$$k = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (1.6 \text{ a}^*)$$

$$n = \frac{\langle x^2 \rangle \langle y \rangle - \langle x \rangle \langle xy \rangle}{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (1.6 \text{ b}^*)$$

Imenovalc v vseh teh izrazih je vedno pozitiven.

♥ Računski zgled 1.10

Namesto izrazov (1.6) za YLR izpeljite ustrezne izraze za XLR, to je x regresijo, kjer minimiziramo vsoto kvadratov »vodoravnih« razdalj vseh točk od premice.

Rešitev naloge je preprosta. Ni nam treba iti od začetka kot pri YLR, ampak enostavno zamenjamo vlogi spremenljivk x in y . Zapišemo lahko $x = k'y + n'$ in če to primerjamo z enačbo $y = kx + n$, takoj opazimo: $k' = 1/k$, $n' = -n/k$, ali v nasprotni smeri: $k = 1/k'$, $n = -n'/k'$. Za kaj pravzaprav gre? Prepišimo le obe enačbi z zvezdico in nadomestimo: $x \rightarrow y$, $y \rightarrow x$, $k \rightarrow k'$, $n \rightarrow n'$:

$$k' = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}$$

$$n' = \frac{\langle y^2 \rangle \langle x \rangle - \langle y \rangle \langle xy \rangle}{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}$$

Potem upoštevamo: $k = 1/k'$ in $n = -n'/k'$, pa smo pri koncu:

$$k = \frac{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}$$

$$n = \frac{\langle y \rangle \langle xy \rangle - \langle y^2 \rangle \langle x \rangle}{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle} \spadesuit$$

Če funkcija $y(x)$ ni linearna, jo navadno najprej lineariziramo z novima spremenljivkama $u = u(x)$ in $v = v(y)$, tako da dobimo linearno zvezo $v = ku + n$. S funkcijo $v(u)$ naredimo linearno interpolacijo, potem pa se vrnemo k spremenljivkama x in y . Kako to naredimo, obravnavajmo v naslednjih računskih zgledih. To je kar pogost postopek v eksperimentalni fiziki, pa tudi v teoriji, npr. pri Monte Carlo simulacijah, ker nam računalniški generator naključnih števil generira naključne vrednosti fizikalnih spremenljivk.

♥ Računski zgled 1.11

Imamo N parov vrednosti (x_i, y_i) , za funkcijo $y(x)$ pa pričakujemo potenčno odvisnost: $y = Ax^b$, kjer sta A in b še neznan parametra. Linearizirajte funkcijo, izvedite YLR in tako ugotovite parametra A in b .

Enačbo $y = Ax^b$ logaritmujemo: $\ln y = \ln A + b \cdot \ln x$. Iz te zveze je že očitno, kaj izberemo za spremenljivki u in v : $u = \ln x$, $v = \ln y$. Potem velja med njima linearna zveza: $v = ku + n$, kjer je $k = b$ in $n = \ln A$. Torej parom (x_i, y_i) najprej priredimo pare $(u_i, v_i) = (\ln x_i, \ln y_i)$. Potem za te pare z YLR po enačbah (1.6) poiščemo k in n , nazadnje pa izračunamo: $b = k$, $A = \exp(n)$. ♠

♥ Računski zgled 1.12

Imamo N parov vrednosti (r_i, G_i) , za korelacijsko funkcijo $G(r)$ pa pričakujemo eksponentno odvisnost: $G = A \exp(-r/\xi)$. Iščemo neznan parametra A in ξ . Parametru ξ pravimo korelacijska dolžina, neodvisna spremenljivka r pa je navadno razdalja med točkama v sredstvu (snovi). Linearizirajte funkcijo, izvedite YLR in tako ugotovite parametra A in ξ .

Enačbo $G = A \exp(-r/\xi)$ logaritmujemo: $\ln G = \ln A - r/\xi$. Temu ustrezata spremenljivki u in v : $u = r$, $v = \ln G$. Potem velja med njima linearna zveza: $v = ku + n$, kjer je $k = -1/\xi$ in $n = \ln A$. Torej parom (r_i, G_i) najprej priredimo pare $(u_i, v_i) = (r_i, \ln G_i)$. Potem za te pare z YLR po enačbah (1.6) poiščemo k in n , nazadnje pa izračunamo: $\xi = -1/k$, $A = \exp(n)$. ♠

Konvolucija funkcij

Konvolucija pride v poštev npr. pri verjetnostnem računu [11], zato jo tu na kratko opišimo in naredimo dva zgleda. Če imamo funkciji $f(x)$ in $g(x)$, potem je njuna konvolucija $f * g$ po definiciji podana z integralom:

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(x-t)dt \quad (1.7)$$

Bralec naj bo pozoren na razliko med spremenljivko x in integracijsko spremenljivko t . Izkaže se, da lahko vlogi funkcij v integralu zamenjamo, torej: konvolucija je komutativna, $f * g = g * f$, kar naj bralec z uvedbo nove integracijske spremenljivke $u = x - t$ dokaže sam. Vendar je že iz definicije očitno, da konvolucija dveh navadnih funkcij ne obstaja vedno, ker lahko integral divergira. Druga omejitev pa je definicijsko območje funkcij. Na primer, če funkciji f in g nista definirani na vsej realni osi, še vedno lahko računamo z integralom (1.7), le da preprosto vzamemo, da sta funkciji povsod tam, kjer nista definirani, kar enaki nič. Tudi definicijsko območje funkcije $f * g$ je omejeno zaradi omejenosti definicijskih območij f in g , v splošnem pa se definicijska območja vseh treh funkcij ne ujemajo med seboj.

♥ Računski zgled 1.13

Na intervalu $0 \leq x < \infty$ sta definirani padajoči eksponentni funkciji $y_1 = A_1 \exp(-k_1x)$ in $y_2 = A_2 \exp(-k_2x)$, kjer so parametri A_1 , A_2 , k_1 in k_2 vsi pozitivni. Privzemimo različnost k_1 in k_2 . Poiščite konvolucijo teh funkcij in ugotovite njeno definicijsko območje.

Lotimo se računa:

$$(y_1 * y_2)(x) = A_1 A_2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-k_1 t) \exp(-k_2(x-t)) dt$$

Vendar, ker je $y_1(t)$ enaka nič za $t < 0$, je dejanska spodnja meja integrala enaka 0 in ne $-\infty$. Pri funkciji y_2 v integralu pa je argument $x - t$. Ta funkcija je torej definirana (različna od nič) le, če je $x - t \geq 0$, ali $t \leq x$. Tako je tudi zgornja integracijska meja integrala omejena: x namesto ∞ :

$$(y_1 * y_2)(x) = A_1 A_2 \int_0^x \exp(-k_1 t) \exp(-k_2(x-t)) dt$$

Hkrati ugotovimo še nekaj: v primeru $x < 0$ funkcija $y_2(x-t)$ nikoli ne more imeti pozitivnega argumenta, zato je lahko celoten integral samo nič. Ali drugače: za $x < 0$ tudi konvolucija ni definirana, ne samo prvotni funkciji. Torej predvidimo le $x > 0$ in dokončamo račun integrala. Faktor $\exp(-k_2 x)$ izpostavimo:

$$(y_1 * y_2)(x) = A_1 A_2 \exp(-k_2 x) \int_0^x \exp((k_2 - k_1)t) dt$$

$$(y_1 * y_2)(x) = \frac{A_1 A_2}{k_2 - k_1} \exp(-k_2 x) \left[\exp((k_2 - k_1)t) \right]_0^x$$

$$(y_1 * y_2)(x) = \frac{A_1 A_2}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 x) - \exp(-k_2 x)]$$

Ta funkcija je pozitivna, ne glede na to, kateri od parametrov k_1 in k_2 je večji. Kaj pa limita $k_2 \rightarrow k_1$? Lahko upoštevamo $k_2 = k_1$ že na začetku integriranja, kar je lažje, ali pa limitiramo končni izraz. Rezultat se tedaj poenostavi:

$$k_2 = k_1 \rightarrow (y_1 * y_2)(x) = A_1 A_2 x \exp(-k_1 x) \spadesuit$$

♥ Računski zgled 1.14

Na intervalu $a \leq x \leq b$ je definirana konstantna funkcija $y_1 = A_1$, na intervalu $c \leq x \leq d$ pa konstantna funkcija $y_2 = A_2$. Glede predznakov parametrov ni nobenih omejitev. Vzemimo samo primer, ko se definicijska intervala ne prekrivata: $a < b < c < d$, pa naj bo tudi drugi interval ožji od prvega: $d - c < b - a$ ali $a + d < b + c$. Obravnavajte konvolucijo funkcij.

Začnimo:

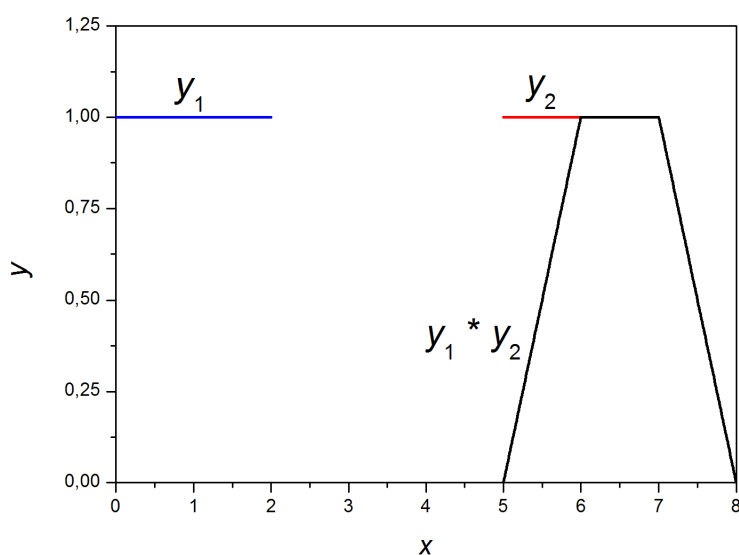
$$(y_1 * y_2)(x) = A_1 A_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt$$

Vendar pa sta zaradi funkcije y_1 integracijski meji kvečjemu a in b , zaradi funkcije y_2 pa kvečjemu $x-d$ in $x-c$ (drugi dve meji dobimo, ker je v argumentu druge funkcije $x-t$, tako da mora veljati $c \leq x-t \leq d$). Torej je na spodnji meji a ali pa $x-d$ (spodnja meja mora biti večja od teh dveh števil), na zgornji meji pa b ali pa $x-c$ (zgornja meja mora biti manjša od teh dveh števil). Intervala (a, b) in $(x-d, x-c)$ se morata vsaj delno prekrivati, da dobimo neničelno vrednost konvolucije. Iz tega izhaja, da mora x ležati v območju: $a + c \leq x \leq b + d$. Glede prekrivanja obeh intervalov razlikujemo 4 možnosti:

- I) Intervala se delno prekrivata: $x-d \leq a \leq x-c \leq b$; to pomeni, da je x v območju $a + c \leq x \leq a + d$; za spodnjo mejo integrala vzamemo a , za zgornjo pa $x-c$, zato je konvolucija enaka $A_1 A_2 (x - a - c)$.

- II) Interval $(x - d, x - c)$ je vsebovan v intervalu (a, b) : $a \leq x - d \leq x - c \leq b$; to pomeni, da je x v območju $a + d \leq x \leq b + c$; za spodnjo mejo integrala vzamemo $x - d$, za zgornjo pa $x - c$, zato je konvolucija enaka $A_1 A_2 (d - c)$.
- III) Intervala se delno prekrivata, a z druge strani: $a \leq x - d \leq b \leq x - c$; to pomeni, da je x v območju $b + c \leq x \leq b + d$; za spodnjo mejo integrala vzamemo $x - d$, za zgornjo pa b , zato je konvolucija enaka $A_1 A_2 (b + d - x)$.
- IV) Interval (a, b) je vsebovan v intervalu $(x - d, x - c)$. Vendar pa ta možnost v primeru $a + d < b + c$ odpade.

Hitro se lahko prepričamo tudi, na je konvolucija na mejah omenjenih intervalov zvezna. Na sliki 4 so prikazani grafi vseh treh funkcij v primeru $A_1 = A_2 = 1$, $a = 0$, $b = 2$, $c = 5$ in $d = 6$. To, da leži definijsko območje konvolucije med vsoto spodnjih mej in vsoto zgornjih mej definijskih območij prvotnih funkcij, če imata omejeni definijski območji, velja splošno.



Slika 4: Konstantni funkciji na omejenem intervalu in njuna konvolucija ♠

Funkcije več spremenljivk

Zgled funkcij več spremenljivk so npr. skalarna in vektorska polja. Tu bomo v nekaj zgledih samo podali nekaj drugih vidikov funkcij več kot ene neodvisne spremenljivke. Najprej omenimo popolni diferencial funkcije dveh spremenljivk [12]: $z = f(x, y) \rightarrow dz = (\partial f / \partial x) dx + (\partial f / \partial y) dy$. V oklepajih smo zapisali oba parcialna odvoda funkcije po neodvisnih spremenljivkah x in y . Posplošitev na več kot dve neodvisni spremenljivki je očitna in je ne bomo pisali.

♥ Računski zgled 1.15

Palico z dolžino l in kvadratnim prerezom s stranico a obremenimo enoosno z vzdolžno natezno silo F . Zato se palice podaljša po Hookovem zakonu: $\Delta l / l = \sigma / E$. Definirali smo natezno napetost $\sigma = F / S$, kjer je $S = a^2$, E pa Youngov modul [13]. Hkrati se stranica kvadrata a zmanjša: $\Delta a / a = -\nu \Delta l / l$, kjer je ν Poissonovo število. Za koliko se spremeni prostornina palice (relativno in absolutno)? Ker so relativne spremembe dolžin majhne, si pri računu pomagajte z diferenciali.

Začasno bomo nadomestili: $\Delta l \rightarrow dl$, $\Delta a \rightarrow da$. Prostornina kvadra je $V = la^2$, zato velja za njen diferencial: $dV = a^2 dl + 2lad a$. Bolj praktično je najprej izračunati kvocient:

$$\frac{dV}{V} = \frac{a^2 dl + 2l da}{la^2} = \frac{dl}{l} + 2 \frac{da}{a}$$

Upoštevajmo še $da/a = -\nu dl/l$:

$$\frac{dV}{V} = (1 - 2\nu) \frac{dl}{l} = (1 - 2\nu) \frac{\sigma}{E}$$

Vrnimo se h končni spremembi prostornine:

$$\frac{\Delta V}{V} = (1 - 2\nu) \frac{\sigma}{E} = (1 - 2\nu) \frac{F}{Ea^2}$$

$$\Delta V = (1 - 2\nu) \frac{Fl}{E}$$

Absolutna sprememba prostornine ni odvisna od stranice a . ♠

♥ Računski zgled 1.16

Idealni plin naj ima konstantno maso m , specifično toplotno kapaciteto pri konstantni prostornini c_V , razmerje specifičnih toplot pa je $\kappa = c_p/c_V$, kjer je c_p specifična toplotna kapaciteta pri konstantnem tlaku [14]. Če se spremeni termodinamično stanje plina od tlaka p_1 in temperature T_1 na tlak p_2 in temperaturo T_2 , se plinu spremeni entropija S za:

$$\Delta S = mc_V \left[(\kappa - 1) \ln \frac{p_1}{p_2} + \kappa \ln \frac{T_2}{T_1} \right]$$

Vpeljite referenčno vrednost entropije S_0 pri referenčnem stanju (p_0, T_0) in izrazite entropijo S kot funkcijo tlaka p in temperature T . Zapišite diferencial entropije. Poiščite nivojnice entropije ali izentrope (reverzibilne adiabate), to je krivulje $T(p)$, kjer ima entropija konstantno vrednost.

Ker velja za spremembo entropije tudi $\Delta S = S - S_0$, je iskana funkcija očitno:

$$S = S_0 + mc_V \left[(\kappa - 1) \ln \frac{p_0}{p} + \kappa \ln \frac{T}{T_0} \right]$$

Njen diferencial je $dS = (\partial S/\partial p)dp + (\partial S/\partial T)dT$. Odvajajmo po tlaku in temperaturi in dobimo:

$$dS = mc_V \left[-(\kappa - 1) \frac{dp}{p} + \kappa \frac{dT}{T} \right]$$

Za izentropo postavimo npr. $S = S_1 = \text{konst}$ in izrazimo zvezo med tlakom in temperaturo:

$$(\kappa - 1) \ln \frac{p_0}{p} + \kappa \ln \frac{T}{T_0} = \frac{S_1 - S_0}{mc_V}$$

$$\ln \left[\left(\frac{p_0}{p} \right)^{\kappa-1} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\kappa} \right] = \frac{S_1 - S_0}{mc_V}$$

$$T = T_0 \exp \left(\frac{S_1 - S_0}{mc_V} \right) \left(\frac{p}{p_0} \right)^{(\kappa-1)/\kappa}$$

Ker je $\kappa > 0$, je $T(p)$ naraščajoča potenčna funkcija. Pri drugi izentropi, $S_2 > S_1$, je funkcija $T(p)$ enake oblike, le faktor pred potenco $(p/p_0)^{(\kappa-1)/\kappa}$ je večji, ker je v eksponentni funkciji S_2 namesto S_1 . ♠

♥ Računski zgled 1.17

Razvijte v Taylorjevo vrsto naslednjo funkcijo koordinate x in časa t : $y(x, t) = y_0 \sin(kx) \sin(\omega t)$. To je npr. odmik delov napete strune, pritrjene na obeh koncih, če jo zanihamo. Obravnavajte območje $0 \leq x \leq L$ (kjer se struna nahaja), $-t_0/2 \leq t \leq t_0/2$. Pri tem je t_0 nihajni čas. Taylorjeva vrsta naj bo okrog $x = L/2$ in $t = 0$. Pri opisanem stojnem valovanju strune veljajo še zveze: $k = m\pi/L$, kjer je m poljubno naravno število, $\omega = ck$, kjer je c hitrost valovanja po struni, nihajni čas pa je $t_0 = 2\pi/\omega$. Ocenite napako Taylorjeve vrste pri končnem številu členov.

V tem primeru lahko izračunamo Taylorjevo vrsto na dva način. Prvi je seveda direktna Taylorjeva vrsta za funkcijo dveh neodvisnih spremenljivk. Ker pa je za našo funkcijo vsaka od spremenljivk v ločenem faktorju, si bomo pomagali tukaj drugače: izračunamo neodvisni Taylorjevi vrsti za vsak faktor posebej, potem pa vse skupaj zmnožimo. Izberimo si le $m = 1$ (osnovni nihajni način strune), za višje vrednosti m pa lahko bralec ponovi račun sam.

Funkcijo $\sin(\omega t) = \sin \varphi$, kjer si mislimo $\varphi = \omega t$ kot fazo, torej razvijemo okrog $\varphi = 0$ in uporabimo že znano vrsto:

$$\sin(\omega t) = \omega t - \frac{(\omega t)^3}{3!} + \frac{(\omega t)^5}{5!} - \frac{(\omega t)^7}{7!} + \dots$$

Drugače je s funkcijo $\sin(kx) = \sin \varphi$, kjer si mislimo $\varphi = kx$ kot »krajevno« fazo, ker jo moramo razviti okrog $x = L/2$. Spet raje direktno računamo kar s fazo namesto s koordinato x , torej vrednosti $x = L/2$ ustreza faza $\varphi = (\pi/L) \cdot (L/2) = \pi/2$. Pripravimo funkcijo in njene odvode (funkcijo sinus pa začasno označimo kar z y_1): $y_1 = \sin \varphi$, $y_1' = \cos \varphi$, $y_1'' = -\sin \varphi$, $y_1''' = -\cos \varphi$, $y_1^{(IV)} = \sin \varphi$ itd. (cikel se ponavlja). Vstavimo argument $\pi/2$: $y_1(\pi/2) = 1$, $y_1'(\pi/2) = 0$, $y_1''(\pi/2) = -1$, $y_1'''(\pi/2) = 0$, $y_1^{(IV)}(\pi/2) = 1$ itd. Že lahko zapišemo Taylorjevo vrsto:

$$\sin(kx) = 1 - \frac{(kx - \pi/2)^2}{2!} + \frac{(kx - \pi/2)^4}{4!} - \frac{(kx - \pi/2)^6}{6!} + \dots$$

To pa je tako, kot da bi zapisali Taylorjevo vrsto za $\cos(kx - \pi/2)$ okrog ničle, če za argument vzamemo res kar vse argument $kx - \pi/2$. To seveda ni presenečenje, saj je $\sin(kx) = \cos(\pi/2 - kx) = \cos(kx - \pi/2)$. Zmnožimo sedaj obe Taylorjevi vrsti funkcij ene spremenljivke in dodajmo spredaj še amplitudo y_0 . V katerem vrstnem redu pišemo člene zmnoženih vrst, je delno stvar okusa. Napačno pa bi bilo, če bi npr. člen 1 druge vrste najprej skušali zmnožiti z »vsemi« časovnimi potencami prve vrste, potem drugi člen druge vrste z »vsemi« časovnimi potencami itd. Tako drugi člen druge vrste sploh »nikoli ne bi prišel na vrsto«, ker je seveda časovnih členov prve vrste neskončno. Vedno moramo vzeti primeren

algoritem za zaporedje členov, tako da katerikoli člen, ki si ga izberemo, pride na vrsto v končnem številu korakov. Najbolj sistematično in v skladu z direktno Taylorjevo vrsto dveh spremenljivk je, če vzamemo člene po naraščajočih vsotah potenc za x in t . Torej je Taylorjeva vrsta sestavljena samo iz lihih skupnih potenc koordinate in časa:

$$y = y_0[f_1 - f_3 + f_5 - f_7 + \dots]$$

$$f_1 = \omega t$$

$$f_3 = \frac{(kx - \pi/2)^2 \omega t}{2} + \frac{(\omega t)^3}{6}$$

$$f_5 = \frac{(kx - \pi/2)^4 \omega t}{24} + \frac{(kx - \pi/2)^2 (\omega t)^3}{12} + \frac{(\omega t)^5}{120}$$

$$f_7 = \frac{(kx - \pi/2)^6 \omega t}{720} + \frac{(kx - \pi/2)^4 (\omega t)^3}{144} + \frac{(kx - \pi/2)^2 (\omega t)^5}{240} + \frac{(\omega t)^7}{5040}$$

Ker imajo vsi členi z isto potenco enak predznak, npr. predznak minus pri f_7 , smo predznake upoštevali že v prvi vrstici pri zapisu y . Enak rezultat bi dobili, če bi začeli s Taylorjevo vrsto:

$$y(x, t) = y(L/2, 0) + \frac{\partial y}{\partial x}(L/2, 0) \cdot (x - L/2) + \frac{\partial y}{\partial t}(L/2, 0) \cdot t + \dots$$

Napako za končno Taylorjevo vrsto dokaj lahko ocenimo samo, če spet obravnavamo posebej »časovni« in »krajevni« del. Ustavimo se pri funkciji $\sin(\omega t)$ pri lihi potenci $2n - 1$ in Taylorjevo vrsto zapišemo tudi z ostankom (tokrat bodimo v zapisu kratki):

$$\sin(\omega t) = \sum_{l=1}^n \frac{(-1)^{l+1}}{(2l-1)!} (\omega t)^{2l-1} \pm \frac{1}{(2n)!} \sin(\varphi_1) (\omega t)^{2n}$$

Upoštevali smo, da je naslednji odvod funkcije spet sinusna funkcija, vendar ker je to ostanek, gre za sinusno funkcijo pri neki nedoločeni fazi φ_1 . Predznak ostanka nas niti ne zanima, ker za oceno napake potrebujemo samo njegovo absolutno vrednost. Velikost sinusne funkcije je največ 1, zato vzemimo to vrednost za oceno. Čas pa opazujemo samo v zgoraj omenjenem intervalu $-t_0/2 \leq t \leq t_0/2$, tako da temu ustreza največja absolutna vrednost faze $\varphi_{\max} = \omega t_0/2 = \pi$. Maksimalna absolutna napaka časovnega dela funkcije je torej:

$$\Delta(\sin(\omega t)) = \frac{1}{(2n)!} \cdot \pi^{2n}$$

Smiselno je oceniti relativno napako tako, da za vrednost $\sin(\omega t)$ vzamemo kar največjo vrednost 1, torej je maksimalna absolutna napaka kar relativna napaka časovnega dela. Npr. pri $n = 10$ je relativna napaka $3,6 \cdot 10^{-9}$.

Podobno ravnamo pri krajevnem faktorju funkcije, kjer gremo v Taylorjevi vrsti do sode potence $2n$:

$$\sin(kx) = \sum_{l=1}^n \frac{(-1)^{l+1}}{(2l)!} (kx - \pi/2)^{2l} \pm \frac{1}{(2n+1)!} \sin(\varphi_1) (kx - \pi/2)^{2n+1}$$

Ni se nam treba ubadati z vprašanjem, ali je prav napisati $\sin \varphi_1$ ali $\cos \varphi_1$, saj ta faktor pri oceni napake spot postavimo na 1. Ocena pri krajevnem delu absolutne napake je podobna kot pri časovnem delu:

$$\Delta(\sin(kx)) = \frac{1}{(2n+1)!} \cdot (\pi/2)^{2n+1}$$

Podobno kot pri časovnem delu vzamemo to kar za relativno napako krajevnega dela. Skupna relativna napaka pri oceni celotne funkcije y je vsota obeh relativnih napak:

$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{1}{(2n)!} \cdot (\pi)^{2n} + \frac{1}{(2n+1)!} \cdot (\pi/2)^{2n+1} \approx \frac{1}{(2n)!} \cdot (\pi)^{2n}$$

Pri velikih n je namreč drugi člen zanemarljiv v primerjavi s prvim zaradi dodatne polovice pri π . Omenimo samo še, da s tem, ko smo se pri časovnem razvoju »ustavili« pri potenci $2n - 1$, pri krajevnem delu pa pri $2n$, nismo bili glede formalnega razvoja funkcije dveh spremenljivk v Taylorjevo vrsto povsem dosledni, ker se ni zaključila pri isti vsoti potenc, npr. pri členih v f_7 v zgoraj. ♠

♥ Računski zgled 1.18

Zelo dolga (polneskončna) pravokotna cev s tankimi prevodnimi stenami je ozemljena (pri teh stenah je potencial enak nič), na enem koncu pa zaprta s ploskvijo s stranicama a in b (osnovna ploskev) in pri potencialu $\varphi_0 > 0$ [15]. Gre torej za kvader s stranicama osnovne ploskve a in b , višina pa je neskončna. Zanima nas električni potencial v notranjosti cevi z vakuumom. Kartezični koordinatni sistem izberemo tako, da je osnovna ploskev v ravnini xy , kvader pa se razteza nad to ravnino v pozitivni smeri osi z . Rešitev, ki ustreza Laplaceovi diferencialni enačbi in potencialu nič na vseh stenah (z izjemo pravokotne ploskvice pri $z = 0$), je naslednja dvojna vsota:

$$\varphi = \sum_{m,n=1}^{\infty} A_{mn} \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b} y\right) \exp(-k_3 z)$$

$$k_3 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2} = \pi \sqrt{\left(\frac{m}{a}\right)^2 + \left(\frac{n}{b}\right)^2}$$

To je torej dvojna Fourierova vrsta. Izračunajte koeficiente A_{mn} , da bo veljal še robni pogoj pri $z = 0$.

Pri $z = 0$ mora veljati:

$$\sum_{m,n=1}^{\infty} A_{mn} \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b} y\right) = \varphi_0$$

Ker so si sinusne funkcije z različnimi indeksi med seboj ortogonalne, skalarni produkt sinusne funkcije same s seboj pa je $a/2$ oziroma $b/2$, mora veljati:

$$A_{mn} \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{b}{2} = \varphi_0 \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) dx \cdot \int_0^b \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) dy$$

Integrala na desni sta kosinusni funkciji (poleg dodatnih konstantnih faktorjev): na meji 0 imata vrednost 1, na zgornji meji pa ± 1 , odvisno od tega, ali sta m in n soda ali liha. Od nič različen rezultat dobimo samo za liha m in n , tedaj pa je koeficient: $A_{mn} = 16\varphi_0/(mn\pi^2)$. Tako končamo s Fourierovo vrsto:

$$\varphi = \frac{16\varphi_0}{\pi^2} \sum_{m,n=1}^{\infty} \frac{1}{mn} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \exp\left(-\sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2} z\right)$$

Seštevamo samo po lihih m in n . ♠

♥ Računski zgled 1.19

Pri tekočinah včasih delamo s kompleksnimi števili in funkcijami, npr. v zvezi s hitrostnim potencialom za idealne nestisljive tekočine [16]. Imejmo funkcijo $w = f(z)$. Pri tem sta kompleksni obe spremenljivki: $z = x + yi$, $w = u + vi$. Zato si lahko mislimo, da sta obe komponenti funkcije w , to sta u in v , funkciji dveh neodvisnih spremenljivk: x in y . Zanimajo nas tako imenovane analitične funkcije, kamor spadajo tudi potenčne funkcije. Obravnavajte najprej kvadratno funkcijo $w = z^2$. Poiščite vse štiri parcialne odvode: $\partial u/\partial x$, $\partial u/\partial y$, $\partial v/\partial x$, $\partial v/\partial y$. Uganite dve splošni zvezi med temi odvodi. Potem dokažite, da veljata obe zvezi za poljubno potenčno funkcijo $w = Az^n$, kjer je lahko tudi A kompleksno število, eksponent n pa je poljubno celo število. Pri poljubni potenčni funkciji si pomagajte z Eulerjevo formulo.

Za kvadratno funkcijo delamo kar direktno s komponentami:

$$w = (x + yi)^2 = x^2 - y^2 + 2xyi = u + vi$$

$$u = x^2 - y^2$$

$$v = 2xy$$

Ustrezni parcialni odvodi so:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 2x \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -2y$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 2y \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 2x$$

Tako uganemo naslednji enakosti:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}$$

Preverimo to pri potenčni funkciji:

$$w = (a + bi)(x + yi)^n$$

Pri tem smo pisali $A = a + bi$. Zapišimo $z = x + yi$ raje v polarni obliki:

$$z = x + yi = r \cdot \exp(i\varphi)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\varphi = \arctan \frac{y}{x}$$

Potem potenciramo z :

$$z^n = r^n \cdot \exp(in\varphi) = r^n [\cos(n\varphi) + i \sin(n\varphi)]$$

Pomnožimo z A in ločimo realni in imaginarni del:

$$Az^n = (a + bi)r^n [\cos(n\varphi) + i \sin(n\varphi)] = r^n (a \cos(n\varphi) - b \sin(n\varphi)) + r^n (a \sin(n\varphi) + b \cos(n\varphi))i$$

Zapišimo torej posebej u in v , pa še r in kot φ zapišimo z x in y :

$$u = (x^2 + y^2)^{n/2} \left(a \cdot \cos \left(n \cdot \arctan \frac{y}{x} \right) - b \cdot \sin \left(n \cdot \arctan \frac{y}{x} \right) \right)$$

$$v = (x^2 + y^2)^{n/2} \left(a \cdot \sin \left(n \cdot \arctan \frac{y}{x} \right) + b \cdot \cos \left(n \cdot \arctan \frac{y}{x} \right) \right)$$

Poiščimo vse 4 odvode po x in y , potem zaradi kratkosti v zapisu vrnemo k r in φ :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = nr^{n-2} [x(a \cdot \cos(n\varphi) - b \cdot \sin(n\varphi)) + y(a \cdot \sin(n\varphi) + b \cdot \cos(n\varphi))]$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = nr^{n-2} [y(a \cdot \cos(n\varphi) - b \cdot \sin(n\varphi)) - x(a \cdot \sin(n\varphi) + b \cdot \cos(n\varphi))]$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = nr^{n-2} [x(a \cdot \sin(n\varphi) + b \cdot \cos(n\varphi)) - y(a \cdot \cos(n\varphi) - b \cdot \sin(n\varphi))]$$

$$\frac{\partial v}{\partial y} = nr^{n-2} [y(a \cdot \sin(n\varphi) + b \cdot \cos(n\varphi)) + x(a \cdot \cos(n\varphi) - b \cdot \sin(n\varphi))]$$

Primerjava odvodov potrди zgoraj zapisani zvezi, ki smo ju uganili pri kvadratni funkciji:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}$$

Ker analitične funkcije lahko razvijemo v Taylorjevo vrsto in ker to pravilo velja za vsako potenco, potem velja tudi za vsako analitično funkcijo. ♠

Fourierova in Laplaceova transformacija

Ti dve transformaciji opišemo tukaj predvsem zato, ker si z njima lahko pomagamo pri reševanju nekaterih diferencialnih enačb, tako navadnih kot parcialnih [17]. To sta integralski transformaciji, ki realni ali kompleksni funkciji ene spremenljivke priredita drugo funkcijo.

Naj bo $f(t)$ realna ali kompleksna funkcija realne spremenljivke t , definirana na vsej realni osi. Transformacijo simbolično označimo takole: $F(x) = \mathbb{F}(f(t))(x)$, kjer je x spet realno število, F pa nova funkcija. Pri vseh enačbah bodimo pozorni na to, da pokončno pisani F pomeni operator, ki mora še delovati na funkcijo, poševno pisani F pa je že transformirana funkcija. Transformacija in njej inverzna transformacija sta naslednji:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ixt) f(t) dt \quad (1.8 \text{ a})$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ixt) F(x) dx \quad (1.8 \text{ b})$$

Pri tem je i imaginarna enota. Če pa hočemo računati samo z realnimi funkcijami, lahko na podoben način definiramo Fourierovo kosinusno in sinusno transformacijo. Zapišimo ju skupaj z njunima inverznima transformacijama:

$$F_c(x) = \int_0^{\infty} \cos(xt) f(t) dt \quad (1.8 \text{ c})$$

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(xt) F_c(x) dx \quad (1.8 \text{ č})$$

$$F_s(x) = \int_0^{\infty} \sin(xt) f(t) dt \quad (1.8 \text{ d})$$

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \sin(xt) F_s(x) dx \quad (1.8 \text{ e})$$

Kosinusna in sinusna inačica Fourierove transformacije sta posebno koristni takrat, kot je $f(t)$ soda ali liha funkcija. Ni pa nujno, da mora funkcija imeti takšno simetrijo, ker smo definicijski interval omejili na pozitivni poltrak realne osi. Da omenjene tri transformacije nedvoumno razlikujemo po imenu, bomo prvi transformaciji rekli kompleksna Fourierova transformacija. Naštajmo nekaj njenih uporabnih lastnosti:

- 1) Linearnost: $\mathbb{F}(af(t) + bg(t)) = a\mathbb{F}(f(t)) + b\mathbb{F}(g(t))$;
- 2) Umeritev (množenje s konstanto) argumenta: $\mathbb{F}(f(at)) = \mathbb{F}(x/a) / |a|$, če je a od nič različno realno število;

- 3) Kompleksno konjugiranje funkcije: $F(f^*(t)) = F^*(-x)$;
- 4) Premik argumenta pri prvotni funkciji in pri transformiranki: $F(f(t - a)) = \exp(iax)F(x)$ in $F(\exp(iat)f(t)) = F(x + a)$;
- 5) Odvodi prvotne funkcije in transformiranke: $F(f^{(n)}(t)) = (-ix)^n F(x)$ in $F((it)^n f(t)) = F^{(n)}(x)$;
- 6) Parsevalova formula: $\int f(t)g^*(t)dt = (1/2\pi)\int F(x)G^*(x)dx$, kjer gresta oba integrala po vsej realni osi;
- 7) Konvolucija: $F(f(t) * g(t)) = F(x)G(x)$.

Kjer smo na desni strani enačbe pisali F ali G , smo s tem mislili transformiranko prvotne funkcije $f(t)$ ali $g(t)$.

Pri kosinusni in sinusni Fourierovi transformaciji je v lastnostih nekaj razlik v primerjavi s kompleksno transformacijo. Razlike izhajajo predvsem iz razpolovljenega integracijskega intervala. Navedimo le štiri lastnosti v zvezi s prvim in drugim odvodom, ki so za reševanje diferencialnih enačb v fiziki z uporabo teh transformacij najpomembnejše:

$$F_c(f'(t)) = -f(0) + xF_s(f(t))$$

$$F_s(f'(t)) = -xF_c(f(t))$$

$$F_c(f''(t)) = -f'(0) - x^2F_c(f(t))$$

$$F_s(f''(t)) = xf(0) - x^2F_s(f(t))$$

Laplaceovo transformacijo lahko naredimo na realni funkciji $f(t)$, ki je definirana na intervalu $0 \leq t < \infty$. Transformacijo simbolično označimo takole: $F(z) = L(f(t))(z)$, kjer je z kompleksno število (ne nujno na celi kompleksni ravnini). Zato je transformiranka $F(z)$ v splošnem kompleksna, čeprav je original $f(t)$ realen. Laplaceova Transformacija spominja na Fourierovo:

$$F(z) = \int_0^{\infty} \exp(-zt)f(t)dt \quad (1.9 a)$$

$$f(t) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-iR}^{c+iR} \exp(zt)F(z)dz \quad (1.9 b)$$

Kot je razvidno iz enačbe (1.9 b), je račun inverzne Laplaceove transformacije manj neposreden in včasih tehnično zahtevnejši. Število c v enačbi je primerno realno število, da integral sploh konvergira in da se vrnemo k pravi začetni funkciji $f(t)$. Drugič, integral (1.9 b) lahko izračunamo najprej neposredno za končno realno število R in potem vzamemo limito neskončnega R . To pomeni, da gre kompleksno število z , po katerem integriramo, po vsej navpični premici v kompleksni ravnini, ki seka realno os pri $z = c$. Druga (največkrat bolj praktična) možnost pa je, da integracijsko območje dopolnimo v sklenjeno zanko v kompleksni ravnini in si pomagamo z metodo residuov. Tu se s tehnikami računanja inverzne transformacije ne bomo ukvarjali, temveč bomo samo uporabili tabelo znanih izrazov za transformacijo preprostih funkcij. Lastnosti Laplaceove transformacije so podobne kot pri Fourierovi transformaciji:

- 1) Linearnost: $L(af(t) + bg(t)) = aL(f(t)) + bL(g(t))$;
- 2) Premik argumenta pri prvotni funkciji in pri transformiranki: $L(f(t - a)) = \exp(-az)F(z)$ za $a > 0$ (enačba je v primeru $a < 0$ bolj zapletena in je ne bomo navajali) in $L(\exp(at)f(t)) = F(z - a)$;

- 3) Odvodi funkcij: $L(f^{(n)}(t)) = -f^{(n-1)}(0) - zf^{(n-2)}(0) \dots - z^{n-1}f(0) + z^n F(z)$ in $L(t^n f(t)) = (-1)^n F^{(n)}(z)$;
 4) Konvolucija: $L(f(t) * g(t)) = F(z)G(z)$.

Kjer smo na desni strani enačbe pisali F ali G , smo s tem mislili transformiranko prvotne funkcije $f(t)$ ali $g(t)$.

♥ Računski zgled 1.20

Izračunajte Laplaceovo transformacijo potenčne funkcije $f(t) = t^n$ za naravno potenco n .

Postopek je naslednji:

$$F_n(z) = \int_0^{\infty} \exp(-zt) t^n dt$$

Tudi transformiranko smo označili z indeksom n . Naprej si bomo pomagali z integracijo per partes, ki nas bo pripeljala do rekurzivne formule, $u = t^n$, $dv = \exp(-zt)$, $du = nt^{n-1}$, $v = -\exp(-zt)/z$:

$$F_n(z) = -\frac{t^n}{z} \exp(-zt) \Big|_0^{\infty} + \frac{n}{z} \int_0^{\infty} \exp(-zt) t^{n-1} dt$$

Če naj integral sploh konvergira, mora biti realna komponenta števila z pozitivna. V tem primeru je tudi prvi člen po integraciji per partes pri obeh mejah enak nič, drugi člen pa ustreza za 1 zmanjšani potenci n . Tako velja rekurzivna formula:

$$F_n(z) = \frac{n}{z} F_{n-1}(z)$$

Najprej z lahkoto ugotovimo $F_0(z) = L(1)(z) = 1/z$, potem pa naprej: $F_1(z) = 1/z^2$, $F_2(z) = 2/z^3$, $F_3(z) = 6/z^4$, za poljubni naravni n pa:

$$F_n(z) = \frac{n!}{z^{n+1}}$$

♠

Podobno ugotovimo Laplaceovo transformacijo za nekaj drugih elementarnih funkcij (tabela).

$f(t)$	$F(z)$
1	$1/z$
t^n	$n!/z^{n+1}$
$\exp(at)$	$1/(z-a)$
$\sin(kt)$	$k/(z^2+k^2)$
$\cos(kt)$	$z/(z^2+k^2)$

NAVADNE DIFERENCIALNE ENAČBE (NDE)

S temi enačbami in ustreznimi robnimi ali začetnimi pogoji poiščemo funkcijo ene same neodvisne spremenljivke [12,18]; povedano drugače: neznano funkcijo in njen argument obravnavamo kot skalar.

NDE z ločljivima spremenljivkama

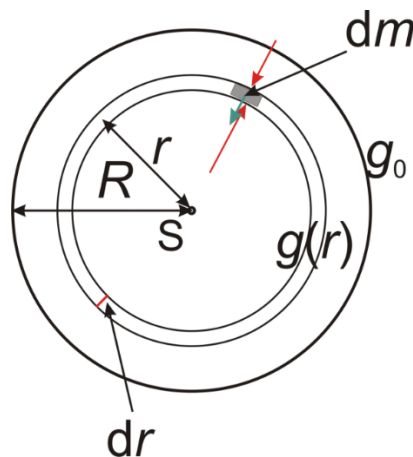
To je za reševanje najlažja kategorija NDE. Gre za diferencialne enačbe prvega reda, ki vsebujejo samo prvi odvod odvisne spremenljivke po neodvisni spremenljivki. Lahko pa obe spremenljivki nastopata enakovredno, tako da enačba vsebuje dva navadna diferenciala, zato je v tem primeru stvar izbire, katero od obeh spremenljivk izberemo kot neodvisno in katero odvisno. Spremenljivki sta ločljivi, kar pomeni, da brez težav postavimo eno spremenljivko skupaj z njenim diferencialom na levo stran enačbe, drugo pa na desno. Obe strani enačbe lahko potem neodvisno integriramo.

♥ Računski zgled 2.1

Ocenite gravitacijski tlak v središču Zemlje. Privzemite, da ima Zemlja homogeno gostoto.

Upoštevajmo krogelno simetrijo in najprej izrazimo težni pospešek $g(r)$ v notranjosti Zemlje pri razdalji r od središča. Uporabimo enako enačbo kot za težni pospešek na površju krogelno simetričnega nebesnega telesa s polmerom r : $g = GM/r^2$, kjer je G gravitacijska konstanta in M masa nebesnega telesa. V notranjosti nebesnega telesa (Zemlje) pa moramo namesto mase M celega planeta vzeti maso $M(r)$ tistega dela Zemlje, ki se nahaja v njeni notranjosti do polmera r . Označimo celoten polmer Zemlje z R , težni pospešek na njenem površju pa z g_0 . Ob privzetku homogene gostote je razmerje mas enako razmerju ustreznih prostornin krogel, zato velja: $M(r)/M = r^3/R^3 \rightarrow M(r) = Mr^3/R^3$. Tedaj je težni pospešek v notranjosti Zemlje:

$$g(r) = \frac{GMr^3}{R^3 r^2} = g_0 \frac{r}{R}$$



Slika 5: Sile v notranjosti Zemlje zaradi gravitacije. Z rdečima puščicama sta označeni tlačni sili na majhen odsek plasti (siv pravokotnik, masa dm), z zeleno pa sila teže na ta odsek kot razlika teh dveh sil.

Z razdaljo od središča Zemlje se $g(r)$ spreminja linearno od 0 do g_0 . Sedaj pa vzemimo tanko Zemljino krogelno lupino s srednjim polmerom r , debelino dr in maso $dm = \rho S dr$, kjer je ρ gostota in $S = 4\pi r^2$. Obravnavajmo sile na to lupino (slika 5): nanjo v vseh delih delujejo prispevki gravitacijske sile proti središču Zemlje: $dF_g = dm \cdot g(r)$. To gravitacijsko silo uravnovesi sila zaradi razlike tlakov tik pod lupino in tik nad njo, zato tlak postopno pojema od središča proti površju Zemlje: $p(r) > p(r + dr)$. Diferencial tlaka je potem: $dp = p(r + dr) - p(r) < 0$. Zapišimo pogoj za ravnovesje tlačne in gravitacijske sile in rešimo NDE:

$$S dp = -dm \cdot g(r) = -\rho S dr \cdot g_0 \frac{r}{R}$$

$$\int_{p_s}^0 dp = -\rho \cdot g_0 \int_0^R \frac{r dr}{R}$$

$$p_s = \frac{1}{2} \rho g_0 R$$

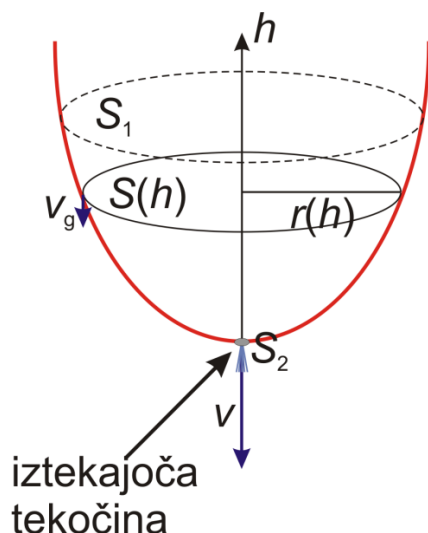
Vendar pa lahko (povprečno) gostoto Zemlje ρ izrazimo z maso Zemlje in njeno prostornino, pri računu mase Zemlje pa si spet pomagamo s težnim pospeškom na njenem površju: $g_0 = GM/R^2 \rightarrow M = g_0 R^2/G \rightarrow \rho = M/V = [g_0 R^2/G]/[4\pi R^3/3] = 3g_0/(4\pi GR)$. Tlak v središču Zemlje je torej:

$$p_s = \frac{3g_0^2}{8\pi G} = 1,7 \cdot 10^6 \text{ bar } \spadesuit$$

♥ Računski zgled 2.2

V zgoraj odprti valjasti posodi s ploščino osnovne ploskve S_1 je tekočina do višine h_0 . Na dnu posode je majhna luknja s ploščino $S_2 \ll S_1$, skozi katero začne tekočina iztekati. Kako se s časom spreminja višina gladine tekočine h , če je po Bernoullijevi enačbi [16] trenutna hitrost iztekanja enaka $v = (2gh)^{1/2}$? Skicirajte graf $h(t)$. V kolikšnem času se posoda izprazni? Kako se spremeni odvisnost $h(t)$, če ima posoda obliko rotacijskega paraboloida z ozkim koncem spodaj, kjer je luknjica? Če je prostornina tekočine na začetku v obeh posodah enaka in sta luknjici spodaj enako veliki, katera posoda se izprazni prej?

Začnimo reševati nalogo za poljubno obliko posode z rotacijsko simetrijo. Na sliki 6 je prikazan zgled paraboloidne posode. Koordinatno os usmerimo navpično navzgor in jo označimo kar s h , tako da je dno posode z luknjico pri $h = 0$ in trenutna gladina tekočine (rekli bom kar vode) pri $h = h(t)$. Obliko posode podamo z odvisnostjo njenega polmera od višine h : $r = r(h)$.



Slika 6: Paraboloidna posoda in iztekanje vode skozi luknjico na njenem dnu

Pomagamo si z ohranitvijo prostornine vode: toliko vode, kot v kratkem času dt odteče skozi luknjico spodaj, toliko je »zmanjka« pri gladini. To pomeni, da sta prostorninska pretoka pri luknjici in gladini enaka: $\Phi_V = S_2 v = S v_g$, kjer je v_g trenutna hitrost nižanja gladine. Hitrost gladine vode je torej $v_g = (S_2/S)v = (S_2/S)(2gh)^{1/2}$. Vendar pri poljubni rotacijsko simetrični obliki posode prerez S pri trenutni gladini ni konstanten, $S(h) \neq S_1$, temveč je enak ploščini kroga s polmerom r : $S = \pi(r(h))^2$. Zapišimo vse skupaj kot diferencialno enačbo:

$$v_g = -\frac{dh}{dt} = \frac{S_2}{\pi(r(h))^2} \cdot \sqrt{2gh}$$

Ločimo spremenljivki h in t in hkrati integrirajmo enačbo:

$$\int_{h_0}^h \frac{(r(h))^2 dh}{\sqrt{h}} = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \int_0^t dt$$

$$\int_{h_0}^h \frac{(r(h))^2 dh}{\sqrt{h}} = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

Od tu naprej moramo rešiti integral na levi strani enačbe za vsako obliko posode posebej. Pri valjasti posodi je polmer neodvisen od višine: $r(h) = R$, zato:

$$R^2 \int_{h_0}^h \frac{dh}{\sqrt{h}} = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

$$2R^2 \sqrt{h} \Big|_{h_0}^h = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

$$2R^2 (\sqrt{h} - \sqrt{h_0}) = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

$$\sqrt{h} - \sqrt{h_0} = -\frac{S_2}{2\pi R^2} \cdot \sqrt{2g} \cdot t = -\frac{S_2}{S_1} \cdot \sqrt{\frac{g}{2}} \cdot t$$

$$h = \left[\sqrt{h_0} - \frac{S_2}{S_1} \cdot \sqrt{\frac{g}{2}} \cdot t \right]^2 = h_0 \left[1 - \frac{S_2}{S_1} \cdot \sqrt{\frac{g}{2h_0}} \cdot t \right]^2 = h_0 \left[1 - \frac{t}{t_k} \right]^2$$

Čas t_k , v katerem se posoda izprazni, izračunamo iz pogoja $h = 0$:

$$t_k = \frac{S_1}{S_2} \cdot \sqrt{\frac{2h_0}{g}}$$

Pri paraboloidni posodi je polmer pri višini h enak $r = Ah^{1/2}$. Zato dobimo:

$$\int_{h_0}^h \frac{A^2 h dh}{\sqrt{h}} = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

$$A^2 \int_{h_0}^h h^{1/2} dh = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

$$\frac{2}{3} A^2 (h^{3/2} - h_0^{3/2}) = -\frac{S_2}{\pi} \cdot \sqrt{2g} \cdot t$$

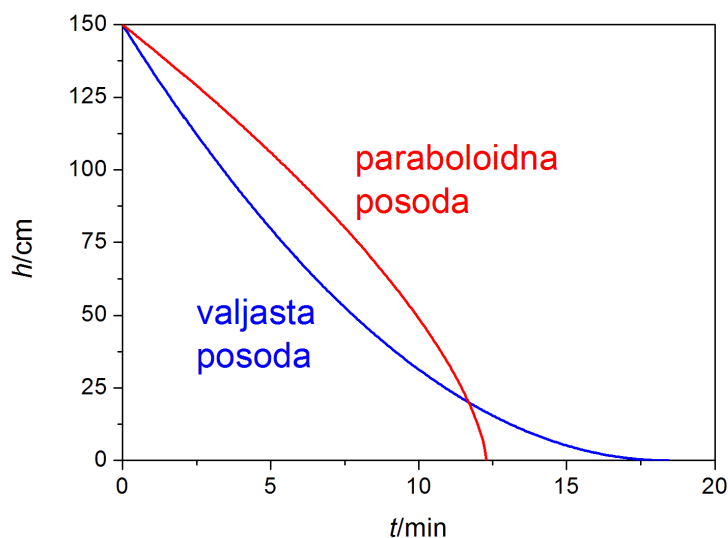
$$h = \left[h_0^{3/2} - \frac{3S_2}{\pi A^2} \cdot \sqrt{\frac{g}{2}} \cdot t \right]^{2/3}$$

Na sliki 7 je primerjava grafov $h(t)$ za oba primera (gl. spodaj za konkretne podatke). Za bolj fizikalno interpretacijo zadnje enačbe vzemimo kot začetna podatka začetno višino gladine tekočine h_0 in prerez posode pri tej višini, to je S_1 . S tema podatkoma izrazimo kvadrat konstante A : $S_1 = \pi(r(h_0))^2 = \pi(Ah_0^{1/2})^2 \rightarrow A^2 = S_1/(\pi h_0)$.

$$h = h_0 \left[1 - \frac{3S_2}{S_1} \cdot \sqrt{\frac{g}{2h_0}} \cdot t \right]^{2/3} = h_0 \left[1 - \frac{t}{t_k} \right]^{2/3}$$

Čas izpraznitve te posode je:

$$t_k = \frac{S_1}{3S_2} \cdot \sqrt{\frac{2h_0}{g}}$$



Slika 7: Grafa $h(t)$ za valjasto in paraboloidno posodo

Odgovor na vprašanje, katera posoda, valjasta ali paraboloidna, se prej izprazni, ni enoličen, tudi če vsebujeta posodi na začetku enako prostornino tekočine V_0 . Že pri valjasti posodi namreč ugotovimo, potem ko vstavimo $V_0 = S_1 h_0 \rightarrow S_1 = V_0/h_0$, da je rezultat za t_k še vedno odvisen od začetne višine gladine h_0 . Zato moramo vprašanje postaviti natančneje: katera posoda se izprazni prej, če sta enaki začetni prostornini V_0 in tudi začetni višini gladine h_0 ? Tedaj prereza S_1 posode pri začetni gladini tekočine ne moreta biti enaka. Pri paraboloidni posodi moramo zato najprej z integriranjem povezati prostornino V_0 s podatkom h_0 in S_1 :

$$V_0 = \int_0^{h_0} S(h) dh = \int_0^{h_0} \pi (r(h))^2 dh = \pi A^2 \int_0^{h_0} h dh$$

$$V_0 = \pi A^2 \frac{h_0^2}{2} = \pi \frac{S_1}{\pi h_0} \frac{h_0^2}{2} = \frac{S_1 h_0}{2} \rightarrow S_1 = \frac{2V_0}{h_0}$$

Razmerje obeh časov t_k za paraboloidno in valjasto posodo je torej:

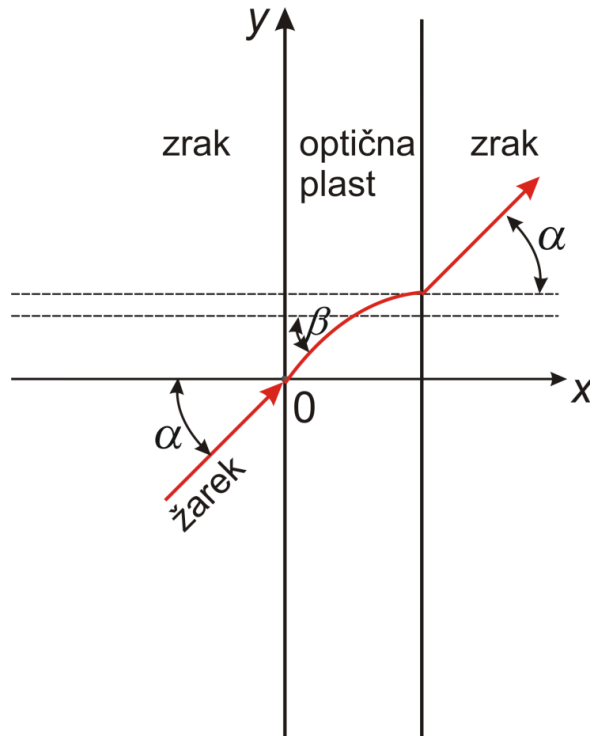
$$t_k(\text{parab}) / t_k(\text{valj}) = \left[\frac{2(V_0/h_0)}{3S_2} \cdot \sqrt{\frac{2h_0}{g}} \right] / \left[\frac{V_0/h_0}{S_2} \cdot \sqrt{\frac{2h_0}{g}} \right] = \frac{2}{3}$$

Prej se izprazni paraboloidna posoda. Na sliki 7 sta prikazana grafa časovne odvisnosti višin za obe posodi pri konkretnih podatkih: $V_0 = 300$ L, $h_0 = 1,5$ m, $S_2 = 1$ cm² (enako za obe posodi). Naj omenimo še, da je efektivni prerez izhajajočega curka tekočine bistveno manjši od ploščine luknjice, zato si lahko podatek S_2 mislimo kar kot efektivni prerez curka (luknjica je večja od tega).

Vprašanja za razmislek: 1) Zakaj je ena krivulja na sliki 7 konveksna, druga pa konkavna? 2) Kako bi rešili problem poiskati takšno obliko posode, da bi se gladina nižala enakomerno? 3) Kako bi izračunali spreminjanje prostornine preostale tekočine v posodi s časom? 4) V čem je bil račun malo pred izpraznitvijo paraboloidne posode precej nenatančen (zadnji, zelo strmi del krivulje)? Zakaj je enačba $v = (2gh)^{1/2}$ v tem primeru neupravičena? ♠

♥ Računski zgled 2.3

Svetlobni žarek vpada iz zraka ($n = 1$) pod kotom α glede na pravokotnico na plast optične snovi, katere lomni količnik se linearno spreminja v smeri osi x (smer normale na plast, slika 8). Mejni plasti sta pri $x = 0$ in $x = a$, za lomni količnik na teh mejah pa velja $n(0) = 1$, $n(a) = n_1$. Ravnina žarka je (x, y) . Poiščite enačbo krivulje, po kateri se giblje žarek v optični plasti.



Slika 8: Geometrija loma žarka na plasti optične snovi. Žarek je prikazan z rdečo barvo in je v plasti ukrivljen.

Lomni količnik v plasti je $n = kx + 1 = (n_1 - 1)x/a + 1$; koeficient je: $k = (n_1 - 1)/a$. Kot žarka glede na pravokotnico se v plasti zvezno spreminja s koordinato x , vključno s točko $x = 0$, ko pride žarek iz zraka, saj se zaradi enakih lomnih količnikov zraka in optičnega sredstva na meji tam žarek ne lomi. Kjer koli vmes v plasti pa lahko direktno zapišemo med vpadnim kotom α v zraku in lomnim kotom β : $n \cdot \sin \beta = \sin \alpha$, kot da bi imeli direktno mejo med zrakom in snovjo vmes v plasti (slika 8). Da je res tako, pove preprost razmislek, kjer si zamislimo množico posameznih lomov žarka od ene do naslednje tanke plasti v snovi: $n(0) \cdot \sin \alpha = n(dx) \cdot \sin \beta(dx) = n(2dx) \cdot \sin \beta(2dx) = \dots = n(x) \cdot \sin \beta(x)$. Naklonski kot žarka glede na os x pri koordinati x je potem kar β , smerni koeficient tangente na žarek pa je:

$$K = \tan \beta = \frac{\sin \beta}{\sqrt{1 - \sin^2 \beta}} = \frac{\sin \alpha / n}{\sqrt{1 - (\sin \alpha / n)^2}} = \frac{\sin \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}$$

Zapišimo ustrezni odvod funkcije $y(x)$, ki opisuje obliko žarka:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\sin \alpha}{\sqrt{(kx+1)^2 - \sin^2 \alpha}}$$

Ločimo spremenljivki in integrirajmo zadnjo enačbo:

$$y = \int_0^x \frac{\sin \alpha}{\sqrt{(kx+1)^2 - \sin^2 \alpha}} dx$$

Ker je $n(x)$ naraščajoča funkcija, se žarek lomi vedno bolj proti vpadni pravokotnici na plast, torej v vsakem primeru pričakujemo smiselno rešitev in konkavno naraščajočo funkcijo $y(x)$, če vpade žarek na plast poševno navzgor, kot je prikazano na sliki. Integracijski meji v enačbi smo postavili tako, da ustrezata vpadu žarka na plast pri $x = 0$, $y = 0$. Nadaljujmo:

$$y = \int_0^x \frac{dx}{\sqrt{\left(\frac{kx+1}{\sin \alpha}\right)^2 - 1}}$$

Naprej uporabimo novo integracijsko spremenljivko, $u = (kx + 1)/\sin \alpha$, potem pa si pomagamo s hiperbolično funkcijo, $u = \cosh w$. Da se nam ne bo treba ukvarjati s sprotno pretvorbo integracijskih mej, uporabimo nedoločeni integral in se nazadnje vrnimo k stari spremenljivki:

$$y = \frac{\sin \alpha}{k} \int \frac{du}{\sqrt{u^2 - 1}}$$

Takšen integral sicer najdemo v tabelah, vendar ga formalno izpeljimo sami z zgoraj omenjeno novo spremenljivko w :

$$y = \frac{\sin \alpha}{k} \int \frac{\sinh(w)dw}{\sqrt{\cosh^2 w - 1}} = \frac{\sin \alpha}{k} \int \frac{\sinh(w)dw}{\sqrt{\sinh^2 w}} = \frac{\sin \alpha}{k} \int dw = \frac{\sin \alpha}{k} \cdot w$$

$$y = \frac{\sin \alpha}{k} \cdot \operatorname{ar} \cosh u = \frac{\sin \alpha}{k} \cdot \ln(u + \sqrt{u^2 - 1}) + C$$

Nazadnje smo dodali nedoločeno konstanto C . Vrnimo se k neodvisni spremenljivki x :

$$y = \frac{\sin \alpha}{k} \cdot \ln \left[\frac{kx+1}{\sin \alpha} + \sqrt{\left(\frac{kx+1}{\sin \alpha}\right)^2 - 1} \right] + C$$

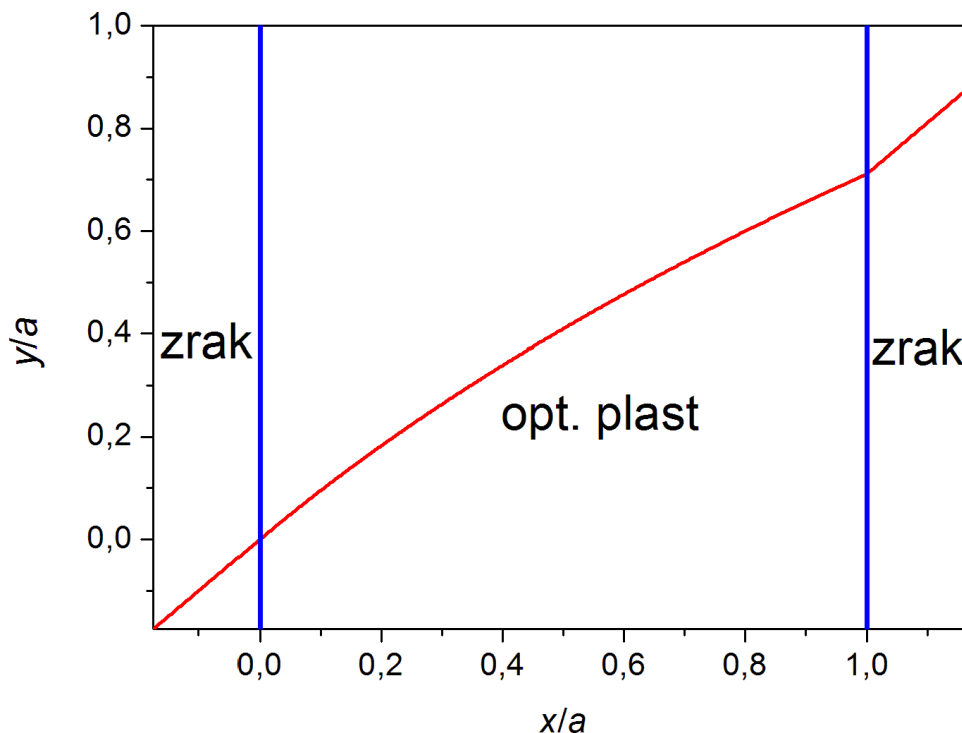
Upoštevajmo še robni pogoj $y(0) = 0$:

$$C = -\frac{\sin \alpha}{k} \cdot \ln \left[\frac{1}{\sin \alpha} + \sqrt{\left(\frac{1}{\sin \alpha}\right)^2 - 1} \right]$$

Zložimo vse skupaj:

$$y = \frac{\sin \alpha}{k} \cdot \ln \frac{\frac{kx+1}{\sin \alpha} + \sqrt{\left(\frac{kx+1}{\sin \alpha}\right)^2 - 1}}{\frac{1}{\sin \alpha} + \sqrt{\left(\frac{1}{\sin \alpha}\right)^2 - 1}}$$

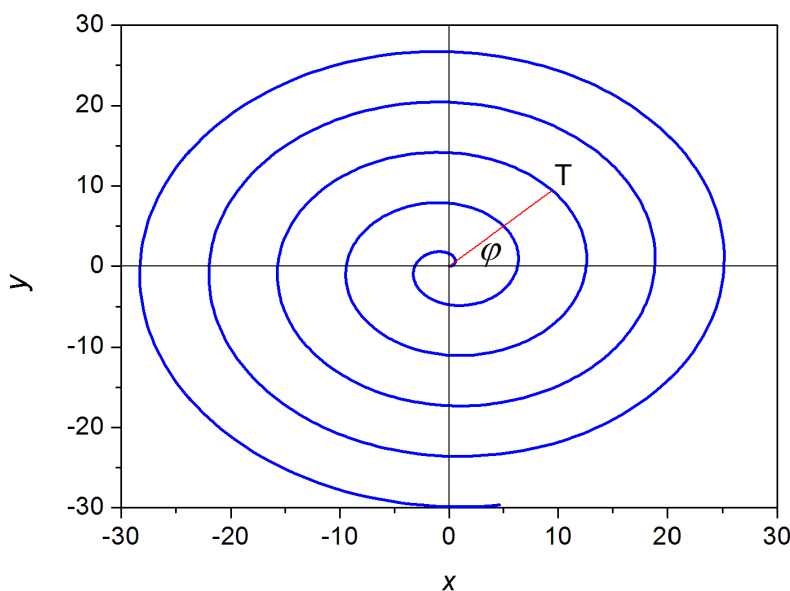
Graf $y(x)$ je prikazan na sliki 9. V našem primeru je funkcija pri prehodu iz zraka v optično plast ne samo zvezna, temveč je zvezen tudi njen odvod, ker se žarek zaradi $n = 1$ na meji ne lomi. Vendar bi bil opisani potek reševanja naloge pravilen tudi za nezvezni odvod, saj postopek sam ne zahteva zveznosti odvoda pri $x = 0$. Nezveznost odvoda je razvidna pri meji $x = a$, ker je tam lomni količnik različen od tistega v zraku. Znano je tudi, da je žarek v zraku po prehodu skozi neko plast vzporeden vstopnemu žarku.



Slika 9: Izračunani tir žarka skozi plast z linearno se spreminjajočim lomnim količnikom. Izbrali smo $\alpha = 45^\circ$ in $n_1 = 1,5$. ♠

♥ Računski zgled 2.4

Točkasto telo se giblje v ravnini po polžasti vijačnici (slika 10), podani s parametričnim zapisom: $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$, kjer je $r = k\varphi$. Gibanje telesa je torej podano z zvezo $\varphi(t)$. Naj je v trenutku $t = 0$ telo v izhodišču: $\varphi(0) = 0$. Izrazite v splošnem hitrost telesa (kot velikost vektorja hitrosti). Kakšna mora biti funkcija, da je hitrost konstantna?



Slika 10: Lega točkastega telesa na polžasti spirali, pri kateri »polmer« raste linearno s polarnim kotom φ . Graf spirale je prikazan v brezdimenzijski obliki ($k = 1$).

Zapišimo časovno odvisnost koordinat eksplicitno:

$$x = k\varphi(t) \cos[\varphi(t)]$$

$$y = k\varphi(t) \sin[\varphi(t)]$$

Komponenti hitrosti sta:

$$v_x = \frac{dx}{dt} = k(\cos \varphi - \varphi \sin \varphi) \cdot \dot{\varphi}$$

$$v_y = \frac{dy}{dt} = k(\sin \varphi + \varphi \cos \varphi) \cdot \dot{\varphi}$$

Ne smemo pozabiti dvojega: 1) da odvajamo produkt funkcij, 2) da odvajamo po času in je azimutni kot φ posredna spremenljivka. Odvod kota po času smo označili s piko nad simbolom φ , ker je takšna navada npr. pri analitični mehaniki. Velikost hitrosti je torej:

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} = k\sqrt{1 + \varphi^2} \cdot \dot{\varphi}$$

Vzemimo najprej tri značilne zglede, kjer hitrost ni konstantna. Hitrost raje kot s kotom primerjamo s kotno hitrostjo $\omega = \dot{\varphi}$ s piko $\dot{\varphi} = d\varphi/dt$, ker sta pri kroženju sorazmerni in je zato razen konstantnega faktorja R njuna časovna odvisnost enaka. Gibanje po spirali se namreč od kroženja razlikuje po tem, da ima hitrost tudi radialno komponento glede na izhodišče (»središče« spirale). Ti trije zglede so: 1) $\varphi = \omega t$, 2) $\varphi = \alpha t^2/2$, 3) $\varphi = \varphi_0 \sin(\Omega t)$.

V zadnjem primeru moramo razlikovati med kotna hitrostjo ω in krožno frekvenco sinusnega nihanja kota Ω . Zdaj pa se vrnimo k problemu enakomernega gibanja po vijačnici, $v = v_0$. Rešiti moramo diferencialno enačbo:

$$k\sqrt{1+\varphi^2} \cdot \dot{\varphi} = v_0$$

$$k\sqrt{1+\varphi^2} \cdot \frac{d\varphi}{dt} = v_0$$

$$\sqrt{1+\varphi^2} \cdot d\varphi = \frac{v_0}{k} \cdot dt$$

Integrirajmo obe strani enačbe v znanih mejah:

$$\int_0^\varphi \sqrt{1+\varphi^2} \cdot d\varphi = \frac{v_0}{k} \cdot \int_0^t dt$$

Integral na desni strani enačbe je kar $v_0 t/k$, mi pa se pozabavajmo z integralom na levi in najprej obravnavajmo nedoločeni integral:

$$I = \int \sqrt{1+\varphi^2} \cdot d\varphi$$

Uporabili bomo hiperbolični funkciji (hiperbolični sinus in hiperbolični kosinus), $\sinh x = (e^x - e^{-x})/2$, $\cosh x = (e^x + e^{-x})/2$, kaj več o njiju pa si oglejte na spletnih straneh. Uvedimo novo integracijsko spremenljivko z : $\varphi = \sinh z$, $d\varphi = \cosh z \cdot dz$. Funkciji sta namreč druga drugi odvod. Integral prepíšemo:

$$I = \int \sqrt{1+\sinh^2 z} \cdot \cosh z \cdot dz$$

Uporabimo še eno znano zvezo med hiperboličnima funkcijama, $\cosh^2 z = 1 + \sinh^2 z$, tako da je integral:

$$I = \int (\cosh^2 z) dz$$

Podobno kot pri sorodnem problemu kotnih funkcij kombiniramo enačbi: $\cosh(2z) = \cosh^2 z + \sinh^2 z$ in $1 = \cosh^2 z - \sinh^2 z$, tako da eliminiramo kvadrat hiperboličnega sinusa in dobimo: $\cosh^2 z = (1 + \cosh(2z))/2$. Torej je integral:

$$I = \frac{1}{2} \int [1 + \cosh(2z)] dz = \frac{1}{2} \left[z + \frac{1}{2} \sinh(2z) \right]$$

Zdaj se moramo vrniti k stari spremenljivki φ :

$$\varphi = \sinh z \rightarrow z = \ln\left(\varphi + \sqrt{\varphi^2 + 1}\right)$$

S tem nadomestimo prvi člen v oglatem oklepaju v izrazu za I . Pri drugem členu pa si pomagamo z adicijskim izrekom za hiperbolični sinus, iz katerega izhaja tudi ustrezeni izraz za dvojni argument

(podobno kot pri navadnem sinusu): $\sinh(2z) = 2\sinh z \cdot \cosh z = 2\sinh z \cdot (1 + \sinh^2 z)^{1/2} = 2\varphi(1 + \varphi^2)^{1/2}$. Sedaj smo pri koncu:

$$I = \frac{1}{2} \cdot \left[\ln(\varphi + \sqrt{1 + \varphi^2}) + \varphi\sqrt{1 + \varphi^2} \right]$$

Kdor ne verjame, pa naj izračuna odvod $dI/d\varphi$ in bo spet pristal pri funkciji pod integralom $(1 + \varphi^2)^{1/2}$. Če vzamemo zdaj določeni integral z mejama 0 in φ , je njegova vrednost pri spodnji meji enaka nič, tako da ostane rešitev:

$$\frac{1}{2} \cdot \left[\ln(\varphi + \sqrt{1 + \varphi^2}) + \varphi\sqrt{1 + \varphi^2} \right] = \frac{v_0 t}{k}$$

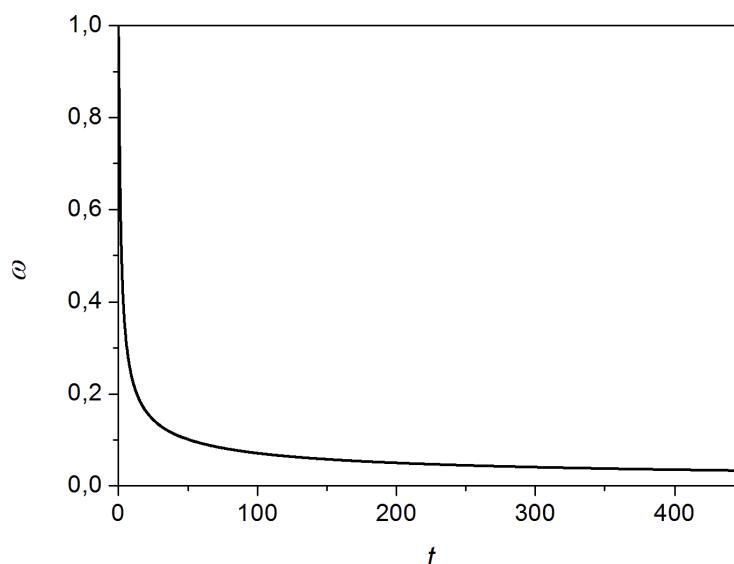
Ker bi bil poskus izraziti funkcijo $\varphi(t)$ brezupen, raje izrazimo čas kot funkcijo kota, saj tako še vedno lahko narišemo graf $\varphi(t)$:

$$t = \frac{k}{2v_0} \cdot \left[\ln(\varphi + \sqrt{1 + \varphi^2}) + \varphi\sqrt{1 + \varphi^2} \right]$$

Parameter k ima glede na definicijo $r = k\varphi$ enoto meter, tako da se enote v zadnji enačbi ujemajo. Kot φ merimo v radianih, vendar po dogovoru poistovetimo radian z enoto 1. Kako pa izrazimo v tem primeru kotno hitrost, če ne poznamo niti eksplicitne odvisnosti $\varphi(t)$, da bi si lahko odvajali kot po času? Uporabimo trik:

$$\omega = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{dt/d\varphi} = \frac{v_0}{k} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \varphi^2}}$$

Napotek je včasih zelo uporaben: odvod spremenljivke y po x je enak inverzni vrednosti odvoda x po y . Na sliki 11 je prikazan graf odvisnosti $\omega(t) = d\varphi/dt$, tako da je hitrost telesa T (po velikosti) konstantna. Graf je prikazan v brezdimenzijski obliki, $k = 1$, $v_0 = 1$. Graf je numerično izračunan z naslednjim zaporedjem spremenljivk: $\varphi \rightarrow t$, $\omega \rightarrow \omega(t)$. Če vzamemo vhodno spremenljivko za graf φ (ki se sicer v grafu samem ne pojavi) v enakomernih razmikih, potem »neodvisna« spremenljivka t v grafu ni v enakomernih razmikih; vendar pa to ni nič hudega, saj se pri gosti izbiri točk na grafu na pozna.



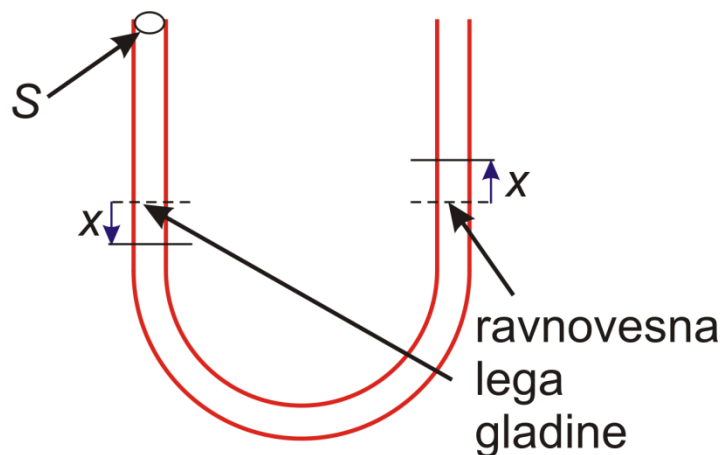
Slika 11: Graf odvisnosti $\omega(t)$ v primeru enakomernega gibanja ($k = 1, \nu = 1$) ♠

Linearna NDE s konstantnimi koeficienti

Tudi to je pomemben razred NDE, ki pa so lahko poljubnega reda [18]. Vsi odvodi in sama funkcija se v enačbi pojavljajo v prvi potenci in imajo konstantne koeficiente. Enačba lahko vsebuje tudi člen, ki je poljubna funkcija neodvisne spremenljivke (nehomogena enačba), ali pa takšnega člena ni (homogena enačba).

♥ Računski zgled 2.5

V cev v obliki pokončne črke U s homogenim notranjim prerezom S , ki je odprta na obeh zgornjih koncih, nalijemo tekočino, tako da je dolžina njenega stolpca (ne glede na ukrivljenost cevi) enaka L . V ravnovesju sta nivoja tekočine v obeh krakih cevi enako visoka (slika 12). Zaradi tlačne motnje tekočina v cevi zaniha. Pokažite, da je nihanje sinusno in izrazite nihajni čas.



Slika 12: Nihanje tekočine v U-cevi

Naj bo trenutni odmik gladine v desnem kraku od ravnovesne lege navzgor enak x . Za enak x se zniža gladina v levem kraku. Zato je višinska razlika gladin enaka $2x$, ustreza hidrostatična tlačna razlika pa $\Delta p = 2\rho g x$, kjer je ρ gostota tekočine. Sila, ki deluje na tekočino, je $F = -\Delta p \cdot S = -2\rho g S x$. Po 2. Newtonovem zakonu velja: $ma = F \rightarrow \rho S L a = -2\rho g S x$, ali:

$$\ddot{x} + \frac{2g}{L}x = 0$$

Dušenje smo zanemarili. To je res enačba za sinusno nihanje, za krožno frekvenco pa velja: $\omega_0^2 = 2g/L$. Nihajni čas je:

$$t_0 = \frac{2\pi}{\omega_0} = 2\pi\sqrt{\frac{L}{2g}} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 2.6

Na vodi plava lesen splav v obliki kvadra z osnovno ploskvijo S in debelino D . Gostota vode je ρ_V , gostota lesa pa ρ_L . S kolikšnim nihajnim časom zaniha splav, če ga premaknemo iz ravnovesne lege?

V ravnovesni legi sta v ravnovesju teža splava in sila vzgona. Naj se splav premakne za x navzgor. Sila teže ostane enaka, vzgon pa se zmanjša za $\Delta F_{vz} = \rho_V S x g$, ker se prostornina izpodrinjene vode zmanjša za Sx , sila vzgona pa je enaka teži izpodrinjene vode. Rezultanta sil je $-\rho_V S x g$. Po 2. Newtonovem zakonu velja: $ma = F \rightarrow \rho_L S D a = -\rho_V S x g$, ali:

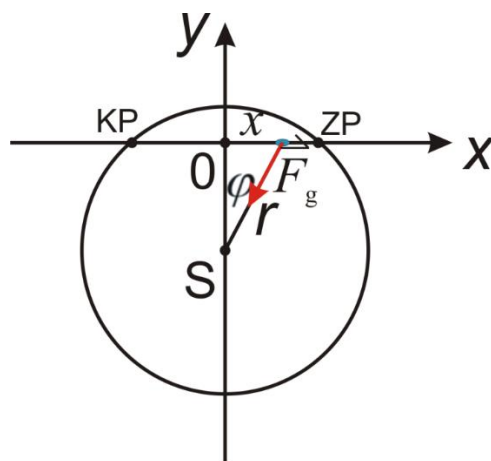
$$\ddot{x} + \frac{g\rho_V}{D\rho_L}x = 0$$

Dušenje smo zanemarili. To je res enačba za sinusno nihanje, za krožno frekvenco pa velja: $\omega_0^2 = g\rho_V/D\rho_L$. Nihajni čas je:

$$t_0 = \frac{2\pi}{\omega_0} = 2\pi\sqrt{\frac{D\rho_L}{g\rho_V}} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 2.7

Futuristični inženirji so si zamislili vlak za dolge proge, ki ga poganja teža. Začetno in končno postajo (brez vmesnih postaj) povezuje raven evakuiran tunel pod tlemi (slika 13). Koliko časa potrebuje vlak od začetne do končne postaje?



Slika 13: Lega vlaka in sila teže; ZP in KP sta začetna in končna postaja. Trenutna lega vlaka je označena z modro barvo.

Ravnovesno lego vlaka na pol poti med postajama označimo z 0, središče Zemlje pa je S. Trenutna lega vlaka glede na točko 0 je podana s koordinato x na progi, vlak pa je od središča Zemlje oddaljen za r . V notranjosti Zemlje predpostavimo linearno odvisnost težnega pospeška od razdalje r : $g = g_0 r/R$, kjer je g_0 težni pospešek na Zemljinem površju, R pa polmer planeta. Na vlak deluje proti središču S sila teže $F_g = mg_0 r/R$. Komponento teže, ki je pravokotna na tir, uravnovesi sila tira na vlak, tako da ostane samo komponenta teže v smeri osi x (v smeri tira), silo trenja in zračnega upora pa zanemarimo. Zapišimo gibalno enačbo: $ma = F_{gx} = -mg_0 r/R \cdot \sin \varphi = -mg_0 x/R$. Dobili smo enačbo za sinusno nihanje:

$$\ddot{x} + \frac{g_0}{R} x = 0$$

Nihajni čas je:

$$t_0 = 2\pi \sqrt{\frac{R}{g}}$$

Čas od začetne do končne postaje (desna in leva skrajna lega nihanja) je enak polovici nihajnega časa:

$$t = \pi \sqrt{\frac{R}{g}} = 42 \text{ min}$$

Ta čas je neodvisen od tega, kako blizu središča Zemlje je tunel. Rotacije Zemlje nismo upoštevali, saj bi se račun zelo zapletel. O izvedljivosti in praktičnosti te zamisli pa razmislite sami. ♠

♥ Računski zgled 2.8

Obravnavajte vsiljeno nedušeno nihanje vzmetnega nihala (masa m , koeficient vzmeti k). Sila je harmonična, vendar pojema njena amplituda eksponentno s časom. Zato velja diferencialna enačba [19–20]:

$$m\ddot{x} + kx = F_0 \exp(-t/\tau) \sin(\omega t)$$

Pri tem naj bo krožna frekvenca ω različna od $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$. Poiščite splošno rešitev.

Enačbo delimo z maso in prepisemo:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = a_0 \exp(-t/\tau) \sin(\omega t)$$

Definirali smo količino $a_0 = F_0/m$ z enoto pospeška. Rešitev homogenega dela enačbe je seveda preprosta in znana: $x_H = C_1 \sin(\omega_0 t) + C_2 \cos(\omega_0 t)$. Tudi za partikularno rešitev nehomogene enačbe takoj uganemo smiselni nastavek: $x_P = [A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)] \exp(-t/\tau)$. Vstavimo ga v zgornjo diferencialno enačbo in kar dobimo na njeni levi strani, razvrstimo po členih s sinusom in kosinusom, izpustimo pa skupni eksponentni faktor na obeh straneh:

$$\left[\left(-\omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right) A + \frac{2\omega}{\tau} B \right] \sin(\omega t) + \left[\left(-\omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right) B - \frac{2\omega}{\tau} A \right] \cos(\omega t) = a_0 \sin(\omega t)$$

Če naj bo leva stran identično enaka desni, se morajo ujemati koeficienti pri sinusnih in kosinusnih členih posebej:

$$\left(-\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}\right)A + \frac{2\omega}{\tau}B = a_0$$

$$-\frac{2\omega}{\tau}A + \left(-\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}\right)B = 0$$

Rešitev tega sistema linearnih enačb za A in B je:

$$A = \frac{1/\tau^2 - \omega^2}{(1/\tau^2 + \omega^2)^2} a_0$$

$$B = \frac{2\omega/\tau}{(1/\tau^2 + \omega^2)^2} a_0$$

Celotna rešitev diferencialne enačbe je:

$$x = [C_1 \sin(\omega_0 t) + C_2 \cos(\omega_0 t)] + \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \cdot \frac{a_0}{(1/\tau^2 + \omega^2)^2} \left[(1/\tau^2 - \omega^2) \sin(\omega t) + (2\omega/\tau) \cos(\omega t) \right]$$

Pri tej nalogi je prav nasprotno kot pri navadnem vsiljenem dušenem nihanju, ki smo ga že obravnavali. Tu s časom zamre vsiljeno nihanje in ne lastno. ♠

Eulerjeva diferencialna enačba

Fizikalni zgled za reševanje te enačbe bomo našli npr. v računskem zgledu 3.17. Ker se ta enačba rešuje vedno po istem kopitu, bomo tu prikazali samo splošni postopek. Eulerjeva diferencialna je tudi linearna, to pomeni, da so funkcija y in njeni odvodi v enačbi vedno v prvi potenci. Koeficienti teh členov pa so potenčne funkcije neodvisne spremenljivke x , in sicer eksponent ustreza stopnji odvoda funkcije [18]. Enačba je lahko poljubnega reda:

$$a_n x^n y^{(n)} + \dots + a_2 x^2 y'' + a_1 x y' + a_0 y = 0$$

Enačbo rešimo z nastavkom $y = x^\lambda$, kjer je λ še neznan realni eksponent. Ko izračunamo vse odvode in jih skupaj s funkcijo vstavimo v Eulerjevo enačbo, dobimo v vseh členih enake potenčne funkcije. Zato jih krajšamo, ostane pa nam navadna enačba za λ , ki je n -te stopnje. Da ne bo preveč pisanja, zapišimo npr. ustrezno enačbo za Eulerjevo enačbo tretje stopnje:

$$a_3 \lambda(\lambda - 1)(\lambda - 2) + a_2 \lambda(\lambda - 1) + a_1 \lambda + a_0 = 0$$

Če so vse tri rešitve λ_1 , λ_2 in λ_3 med seboj različne, je splošna rešitev:

$$y = C_1 x^{\lambda_1} + C_2 x^{\lambda_2} + C_3 x^{\lambda_3}$$

Kaj pa, če sta dve rešitvi enaki, npr. $\lambda_2 = \lambda_1$? Tedaj je splošna rešitev:

$$y = C_1 x^{\lambda_1} + C_2 x^{\lambda_2} \cdot \ln x + C_3 x^{\lambda_3}$$

To je v skladu s splošnim pravilom, da morajo linearno NDE tretje stopnje obstajati tri neodvisne rešitve. Ne bomo v splošnem dokazovali, da tudi rešitev z logaritemskim faktorjem zadošča Eulerjevi enačbi. Oglejmo si to le v posebnem primeru.

♥ Računski zgled 2.9

Rešite Eulerjevo diferencialno enačbo: $x^3 y''' - x^2 y'' + 2xy' - 2y = 0$.

Z vstavitvijo nastavka $y = x^\lambda$ v enačbo dobimo rešitvi: $\lambda_1 = 1$ (dvojna ničla ustreznega polinoma za λ) in $\lambda_3 = 2$. Pokažimo, da poleg rešitev $y = x$ in $y = x^2$ enačbo reši tudi $y = x \ln x$. Izračunajmo zaporedoma odvode: $y' = \ln x + 1$, $y'' = 1/x$, $y''' = -1/x^2$. Funkcijo in njene odvode vstavimo v levo stran Eulerjeve enačbe in res dobimo vrednost 0 na desni strani. Celotna rešitev enačbe je torej: $y = Ax + Bx \ln x + Cx^2$. Da izračunamo še koeficiente A, B in C, potrebujemo še tri dodatne pogoje (enačbe). Za to je veliko možnosti. Ena od njih je, da so v neki točki, npr. $x = 0$, podane vrednosti za funkcijo y ter njen prvi in drugi odvod. Oglejmo si drugo možnost – da so podane kar vrednosti funkcije v treh različnih točkah: $y(x_1) = y_1$, $y(x_2) = y_2$, $y(x_3) = y_3$. Dobimo nehomogeni sistem linearnih enačb za neznanke A, B in C, bralec pa naj za vajo sam napiše ustrezno matriko in preveri, ali je njena determinanta različna od nič.



Splošnejši zgledi NDE

♥ Računski zgled 2.10

Mislimo si pospeševanje telesa zaradi zunanje sile, ki narašča kot kvadratna funkcija časa. Hkrati na telo deluje upor tekočine po linearnem zakonu upora (upor je sorazmeren s hitrostjo telesa), vendar pa se zaradi notranjih mehanizmov spreminja oblika telesa, tako da koeficient pred hitrostjo narašča kot kvadratna funkcija časa. Ustrezna enačba je:

$$\frac{dv}{dt} + at^2 v = bt^2$$

To je splošna nehomogena linearna navadna diferencialna enačba prvega reda. Konstanti a in b sta pozitivni. Rešite enačbo v splošnem, potem pa še upoštevajte začetni pogoj $v(0) = v_0$.

Značilnost linearne diferencialne enačbe poljubnega reda je, da so v njej funkcija (v našem primeru hitrost v) in vsi njeni odvodi v prvi potenci, medtem ko so lahko koeficienti poljubne funkcije neodvisne spremenljivke (v našem primeru je to čas t). Člen, ki ne vsebuje funkcije ali njenega odvoda, postavimo na desno stran enačbe. Takšno enačbo rešujemo v splošnem tako, da najprej rešimo ustrezno homogeno enačbo, brez desne strani:

$$\frac{dv}{dt} + at^2 v = 0$$

Enačba ima ločljivi spremenljivki: najprej prestavimo člen s hitrostjo na desno stran, ločimo spremenljivki in kar takoj integriramo, da je manj pisanja:

$$\int \frac{dv}{v} = -\int at^2 dt$$

Uporabljamo nedoločeni integral, zato bomo na eni strani enačbe pisali dodatno konstanto. To naj bo kar $\ln C$:

$$\ln v = -\frac{1}{3}at^3 + \ln C$$

$$v = C \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right)$$

To je samo rešitev homogenega dela enačbe, zato izraz prepíšemo:

$$v_h = C \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right)$$

Matematični trik, kako rešimo celotno, nehomogeno enačbo, pa je variacija konstante. To namreč ni več enačba z ločljivima spremenljivkama. Pri variaciji konstante si mislimo, da C ni več konstanta, ampak še neznan funkcija časa. To poudarimo z zapisom funkcije, potem pa izrazimo še ustrezní odvod produkta dveh funkcij:

$$v = C(t) \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right)$$

$$\frac{dv}{dt} = C'(t) \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right) - C(t)at^2 \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right)$$

Če oboje vstavimo v celotno diferencialno enačbo, ugotovimo, da se drugi člen odvoda dv/dt izniči z drugim členom na levi strani enačbe, at^2v , zato ostane:

$$C'(t) \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right) = bt^2$$

Nekaj podobnega se pri variaciji konstante pri takšni enačbi vedno zgodi. To se da brez težav dokazati, če namesto funkcij at^2 in bt^2 vzamemo poljubni funkciji časa. Dobili smo diferencialno enačbo za $C(t)$, ki jo rešimo z direktnim integriranjem po času:

$$C(t) = \int bt^2 \exp\left(\frac{1}{3}at^3\right) dt$$

V našem primeru gre integriranje lepo analitično do konca, če vzamemo novo integracijsko spremenljivko $u = at^3/3$. Rezultat je:

$$C(t) = \frac{b}{a} \exp\left(\frac{1}{3}at^3\right)$$

Tu ne potrebujemo še ene integracijske konstante in bomo hitro spoznali, zakaj ne. S funkcijo $C(t)$ pomnožimo zgornji nastavek za celotno funkcijo $v(t)$. Eksponentni funkciji se zaradi nasprotnih predznakov eksponenta krajšata in rezultat je zelo preprost:

$$v_p(t) = \frac{b}{a}$$

Oznaka v_p pove, da gre le za posebno (partikularno) rešitev cele enačbe. Tole konstantno rešitev bi lahko takoj uganili že iz enačbe, saj tedaj prvi člen s časovnim odvodom hitrosti odpade. Seveda še zdaleč ni v vsakem primeru partikularna rešitev tako preprosta. Celotna rešitev je zaradi linearnosti enačbe vsota homogenega in partikularnega dela, $v = v_h + v_p$:

$$v = C \exp\left(-\frac{1}{3}at^3\right) + \frac{b}{a}$$

Zdaj tudi uvidimo, zakaj funkciji $C(t)$ ni bilo treba dodati še ene konstante, npr. D . Ko bi namreč sešteli v_h in v_p , bi se konstanta D samo prištela h konstanti C pred eksponentno funkcijo in ne bi dobili nič novega. To je bula splošna rešitev enačbe; če pa upoštevamo še začetni pogoj $v(0) = v_0$, lahko izračunamo neznan konstanto C v tem primeru: $v_0 = C + b/a \rightarrow C = v_0 - b/a$. V limiti $t \rightarrow \infty$ se hitrost monotono približuje asimptotični vrednosti b/a . ♠

♥ Računski zgled 2.11

Gibanje nosilcev električnega naboja v zunanjem električnem polju jakosti E in tako tudi električni tok v kovinah ali elektrolitih opišemo z naslednjo enačbo za hitrost:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -m\gamma\vec{v} + e\vec{E}$$

Pri tem je e naboj nosilca, prvi člen na desni strani enačbe pa je posledica disipacije njegove kinetične energije. Električna poljska jakost se v splošnem lahko spreminja s časom. Dokažite, da lahko rešitev te enačbe zapišemo v obliki integrala [8]:

$$\vec{v}(t) = \frac{e}{m} \int_{-\infty}^t \exp[\gamma(t-t')] \vec{E}(t') dt'$$

Preden nalogo rešimo, še nekaj opomb. Enačba je sicer vektorska, ker pa so to tri neodvisne skalarne enačbe, jo formalno rešujemo enako kot NDE, samo da ves čas pišemo ustrezne vektorje namesto skalarjev. Drugič, to je enak tip enačbe kot pri prejšnjem zgledu (nehomogena linearna enačba prvega reda) in bi jo lahko rešili direktno. Vendar je v tem primeru zelo poučno preverjanje enačbe pri že podani rešitvi. Odvajajmo najprej hitrost po času, pri tem pa bodimo pozorni, da se čas t pojavi na dveh mestih: v zgornji integracijski meji in v eksponentni funkciji. Zato dobimo pri odvajanju dva člena: pri enem prepisemo integrand (brez integrala), tako da vstavimo vanj $t' = t$, pri drugem členu pa integral ostane, vendar pa eksponentno funkcijo odvajamo po času t . Odvod hitrosti je torej:

$$\dot{\vec{v}}(t) = \frac{e}{m} \left\{ \vec{E}(t) - \gamma \int_{-\infty}^t \exp[\gamma(t-t')] \vec{E}(t') dt' \right\}$$

Če hitrost in njen odvod vstavimo v zgornjo diferencialno enačbo, se vse izide. ♠

♥ Računski zgled 2.12

V kvantni mehaniki se v primeru atoma z mnogo elektroni uporablja tudi Thomas-Fermijeva enačba za račun električnega potenciala [7]. To je le grob približek, ki izhaja iz statistične porazdelitve elektronov v faznem prostoru, iz energijske enačbe in iz Poissonove enačbe v elektrostatiki. Zaradi približka krogelne simetrije vsebuje Laplaceov operator samo radialni del, tako da odvisnost potenciala od polmera $\varphi(r)$ podaja naslednja navadna diferencialna enačba drugega reda:

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \cdot \frac{d\varphi}{dr} \right) = \lambda \varphi^{3/2}$$

kjer je koeficient na desni strani enačbe:

$$\lambda = \frac{(2m)^{3/2} e_0^{5/2}}{3\pi^2 \hbar^3 \varepsilon_0}$$

Simboli pomenijo: m je masa elektrona, e_0 osnovni naboj, h s črtico Planckova konstanta deljena z 2π , ε_0 pa influenčna konstanta. Zamenjajte spremenljivki r in φ z brezdimenzijskima spremenljivkama x in χ z naslednjima nastavkoma:

$$r = bZ^{-1/3} x$$

$$\varphi = \frac{Ze_0}{4\pi\varepsilon_0 r} \cdot \chi(x)$$

Tako da bo nova diferencialna enačba brezdimenzijska in čim preprostejša (brez numeričnih faktorjev). Naloga je torej poiskati primeren parameter b , ki ima enoto dolžine. V novih spremenljivkah zapišite še »robna« pogoja: $\varphi r \rightarrow Ze_0/(4\pi\varepsilon_0)$ za $r \rightarrow 0$ (kar pomeni, da elektronu zelo blizu jedra ne senčijo potenciala zaradi jedra drugi elektroni), $\varphi r \rightarrow 0$ za $r \rightarrow \infty$. Nazadnje z nastavkom $\chi = Ax^a$ poiščite še potenčno rešitev nove enačbe (ki pa ne ustreza prvemu robnemu pogoju).

Po vstavitvi novih spremenljivk v NDE, dvakratnem odvajanju in premetavanju faktorjev dobimo naslednjo enačbo:

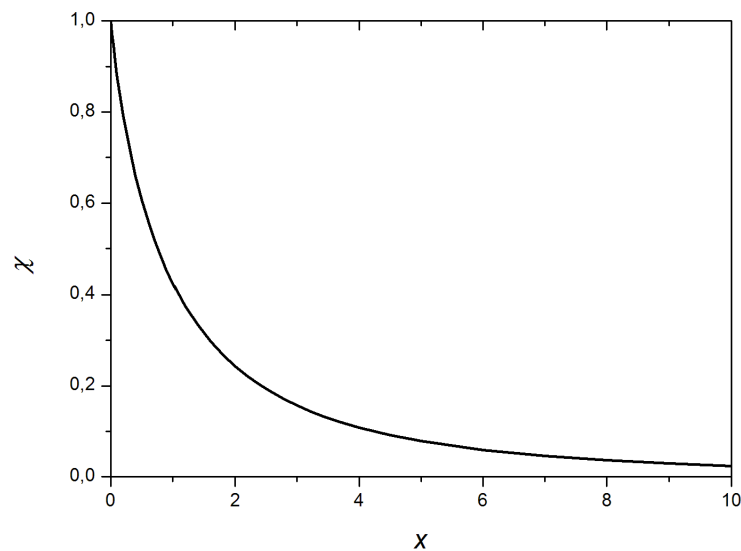
$$\sqrt{x} \cdot \frac{d^2 \chi}{dx^2} = \chi^{3/2}$$

ki ji ustreza parameter:

$$b = \sqrt[3]{\frac{9\pi^2}{2} \cdot \frac{\hbar^2 \varepsilon_0}{me_0^2}}$$

Robna pogoja sta preprosta: $\chi(0) = 1$, $\chi(\infty) = 0$. Zato smo tudi izbrali prav zgoraj zapisano zvezo med φ in χ (dodatno deljenje z r v tej zvezi pa nam je poenostavilo diferencialno enačbo). Če vstavimo v diferencialno enačbo nastavek $\chi = Ax^a$, dobimo s primerjavo potenc neodvisne spremenljivke x na obeh straneh enačbe najprej $a = -3$, potem pa še koeficient $A = 144$. Vendar pa bi se ta rešitev asimptotično ujemala s pravo rešitvijo le pri zelo velikih polmerih, ki za praktični namen ne pridejo v poštev.

Diferencialno enačbo s pravim začetnim pogojem pri $x = 0$ je treba reševati numerično, graf funkcije pa je prikazan na sliki 14.



Slika 14: Graf funkcije $\chi(x)$ ♠

♥ Računski zgled 2.13

Besselovo funkcijo reda n , kjer je n poljubno naravno število ali pa 0, lahko definiramo z naslednjo potenčno vrsto [18]:

$$y(x) = J_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n}$$

Dokažite, da ta funkcija zadošča diferencialni enačbi drugega reda:

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - n^2)y = 0$$

Enačba se razlikuje od Eulerjeve po predzadnjem členu $x^2 y$. Zapišimo najprej prvi in drugi odvod funkcije, kjer odvajamo po členih:

$$y' = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2k+n)}{k!(n+k)!} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n-1}$$

$$y'' = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2k+n)(2k+n-1)}{k!(n+k)!} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n-2}$$

Vstavimo vse skupaj v diferencialno enačbo in preverimo, ali se vse izide:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \cdot \left[f_1(n, k) \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n} + 4 \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+n+2} \right] = 0$$

$$f_1(n, k) = (2k + n)(2k + n - 1) + (2k + n) - n^2$$

Potenci $2k + n$ namreč ustrezajo prvi, drugi in četrti člen NDE in to je razvidno pri »funkciji« $f_1(n, k)$. Na primer, faktor $\frac{1}{4}$ pri drugem odvodu funkcije y je šel skupaj s faktorjem x^2 k potenci argumenta $x/2$, tako da smo prišli iz zmanjšane eksponenta $2k + n - 2$ spet na prvotni eksponent $2k + n$. Podobno je s prvim odvodom funkcije, za člen $z n^2$ pa je stvar očitna. Izjema je le tretji člen NDE, ki nam eksponent poveča za 2, s faktorjem 4 pri drugem členu v oglatem oklepaju pa smo kompenzirali to, da smo x^2 vtaknili k potenci argumenta $x/2$. V nadaljevanju najprej poenostavimo f_1 : $f_1(n, k) = 4k(n + k)$.

Glavni miselni skok pri reševanju naloge pa pride zdaj. Če naj bo enačba identično izpolnjena, mora biti koeficient pri vsaki potenci argumenta $x/2$ posebej enak nič. V oglatem oklepaju sicer moti člen z eksponentom $2k + n + 2$, vendar pa dobimo enak eksponent kot pri prvem členu, če namesto indeksa k vzamemo $k - 1$. To lahko naredimo, saj vsota vsebuje tudi ta indeks; paziti pa moramo, da ustrezno spremenimo tudi faktorje pred oglatim oklepajem. Tako lahko zapišemo ključno enačbo:

$$\frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \cdot f_1(n, k) + \frac{(-1)^{k-1}}{(k-1)!(n+k-1)!} \cdot 4 = 0$$

Enačbo pomnožimo z $n!(n+k)!/(-1)^k$:

$$f_1(n, k) - 4k(n+k) = 0$$

Nazadnje samo še vstavimo $f_1(n, k) = 4k(n+k)$ in se prepričamo, da enačba velja. Naj omenimo še, da lahko namesto parametra n vzamemo poljubno realno število a in podobno definiramo Besselovo funkcijo J_a :

$$J_a(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(a+k+1)} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+a}$$

Uporabili smo funkcijo gama:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

Funkcija J_a zadošča diferencialni enačbi:

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - a^2)y = 0$$

Pri fiziki uporabljamo Besselove funkcije v zvezi z Laplaceovo enačbo v cilindrični simetriji, npr. pri elektromagnetizmu. ♠

♥ Računski zgled 2.14

V fiziki večkrat, posebno v termodinamiki srečamo diferencialno enačbo prvega reda v tej obliki: $P(x, y)dx + Q(x, y)dy = 0$. Pri tem sta P in Q znani funkciji dveh spremenljivk, mi pa iščemo funkcijo $y(x)$. Obravnavali bomo samo primer, ko je izraz na levi strani enačbe popoln diferencial neke (še neznan) funkcije $u(x, y)$, torej $du = 0$. Če je to res, potem mora veljati $P = \partial u / \partial x$ in $Q = \partial u / \partial y$, da imamo diferencial $du = (\partial u / \partial x)dx + (\partial u / \partial y)dy$. Ker pa morata biti enaka mešana odvoda $\partial^2 u / \partial x \partial y$ in $\partial^2 u / \partial y \partial x$, potem mora veljati zveza [18]:

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x}$$

To je torej pogoj, da imamo na levi strani enačbe res diferencial neke funkcije u . Tedaj lahko u izračunamo z naslednjo vsoto dveh integralov:

$$u = \int_a^x P(x, y) dx + \int_b^y Q(x, y) dy$$

Rešitev diferencialne enačbe je potem $u(x, y) = C$. To je implicitna enačba za $y(x)$.

Na tej osnovi obravnavajte naslednjo enačbo: $Ax^a y^b dx + Bx^c y^d dy = 0$. Pri katerih pogojih gre za popoln diferencial? Pri teh pogojih rešite enačbo.

Delamo s funkcijama $P = Ax^a y^b$ in $Q = Bx^c y^d$.

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x}$$

$$Abx^a y^{b-1} = Bcx^{c-1} y^d$$

Da se vse ujema, mora veljati: $c = a + 1, d = b - 1, Ab = Bc \rightarrow B = Ab/(a + 1)$. Zapišimo NDE še enkrat:

$$Ax^a y^b dx + \frac{Ab}{a+1} x^{a+1} y^{b-1} dy = 0$$

Krajšajmo samo konstanto A in izračunajmo funkcijo u :

$$u = \int_{x_0}^x x^a y^b dx + \frac{b}{a+1} \int_{y_0}^y x^{a+1} y^{b-1} dy$$

$$u = \frac{2}{a+1} x^{a+1} y^b = \text{konst}$$

Kar smo dobili pri spodnjih mejah integralov, samo postavili kar na nič. Faktor $2/(a + 1)$ lahko seveda priključimo kar konstanti na desni strani enačbe. Končno lahko izrazimo y :

$$y = C / x^{\frac{a+1}{b}}$$

Poskusimo še drugače. V enačbi:

$$Ax^a y^b dx + \frac{Ab}{a+1} x^{a+1} y^{b-1} dy = 0$$

krajšamo potence, kolikor se da, pa jo prepišemo:

$$(a+1)\frac{dx}{x} + b\frac{dy}{y} = 0$$

Direktno jo integriramo, ker imamo ločeni spremenljivki, pridemo do logaritmov obeh spremenljivk, antilogaritmujemo, pa pridemo do enake rešitve kot zgoraj. V termodinamiki sta spremenljivki x in y npr. tlak in temperatura. ♠

♥ Računski zgled 2.15

Hermitov polinom H_n stopnje n zadošča naslednji diferencialni enačbi drugega reda: $H_n'' - 2xH_n' + 2nH_n = 0$. Po dogovoru je vodilni člen polinoma $(2x)^n$. Poiščite prvih nekaj polinomov ($n = 0$ do 4). Potem razvijte potenčne funkcije x^n v končne linearne kombinacije teh polinomov. Hermitovi polinomi se pojavijo v rešitvah za valovne funkcije linearnega harmonskega oscilatorja v kvantni mehaniki [7, 18].

Polinom stopnje 0 je: $H_0 = 1$. Polinom stopnje 1 je $H_1 = 2x + a$. Hitro ugotovimo, da mora biti $a = 0$. Malo podrobneje napišimo postopek za iskanje H_2 : $H_2 = 4x^2 + ax + b$. Izrazimo oba odvoda: $H_2' = 8x + a$, $H_2'' = 8$. Vstavimo polinom in njegova odvoda v enačbo: $8 - 2x(8x + a) + 4(4x^2 + ax + b) = 0$. Vodilna (kvadratna) člena se izničita. Iz linearnih členov dobimo $a = 0$, konstantni člen pa je $b = -2$. Podobno računamo koeficiente polinomov višjega reda. Izkaže se, da so polinomi sode ali lihe funkcije, to je, imajo samo sode ali samo lihe potence. Zapišimo jih nekaj: $H_0 = 1$, $H_1 = 2x$, $H_2 = 4x^2 - 2$, $H_3 = 8x^3 - 12x$, $H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$.

Razvoj potenc po teh polinomih je za prvih nekaj potenc preprost: $1 = H_0$, $x = H_1/2$, $x^2 = H_2/4 + H_0/2$, $x^3 = H_3/8 + 3H_1/4$, $x^4 = H_4/16 + 3H_2/4 + 3H_0/4$. Sode potence razvijemo po Hermitovih polinomih sodega reda, lihe potence pa po polinomih lihega reda. ♠

PARCIALNE DIFERENCIALNE ENAČBE (PDE)

To so enačbe za funkcije dveh ali več neodvisnih spremenljivk vključno z ustreznimi začetnimi in/ali robnimi pogoji [12, 17, 21]. Za reševanje so neprimerno težje kot NDE, tako da znamo v splošnem analitično rešiti samo nekaj najenostavnejših linearnih PDE. Pri reševanju največkrat poskusimo funkcijo več spremenljivk zapisati kot produkt funkcij s po eno spremenljivko in nato transformirati PDE v NDE.

♥ Računski zgled 3.1

Poiščite stacionarne valovne funkcije in njihove diskretne energijske nivoje za neskončno tridimenzionalno (3D) potencialno jamo v obliki kvadra z robovi a , b in c . Za potencialno energijo velja: $V(x, y, z) = 0$ v območju $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, $0 \leq z \leq c$, zunaj tega območja pa je neskončna. Ustrezni robni pogoji so: $\psi(0, y, z) = \psi(a, y, z) = 0$ za vsak y in z na dveh nasprotnih ploskvah kvadra, $\psi(x, 0, z) = \psi(x, b, z) = 0$ za vsak x in z na drugih dveh ploskvah in podobno $\psi(x, y, 0) = \psi(x, y, c) = 0$ za vsak x in y na preostalih dveh ploskvah. Valovna enačba v omenjenem prostorninskem območju kvadra, kjer je potencialna energija enaka nič, je [7]:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] = E \psi$$

Maso kvantnega delca v jami smo tokrat označili z M .

Valovno funkcijo zapišemo kot produkt treh funkcij: $\psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$. Odslej odvisnosti posameznih funkcijskih faktorjev od koordinat ne bomo posebej poudarjali. Pri vsakem parcialnem odvodu odvajamo po enega od faktorjev, npr.: $\partial^2 \psi / \partial x^2 = X''YZ$. Namesto parcialnega odvoda lahko namreč pri posameznem faktorju celotne valovne funkcije pišemo navadni drugi odvod (oznaka $''$). Zato dobimo:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot [X''YZ + XY''Z + XYZ''] = EXYZ$$

Enačbo delimo s produktom XYZ :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \left[\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} \right] = E$$

Na levi strani enačbe je vsota treh členov, od katerih je vsak člen funkcija ene koordinate, na desni strani enačbe pa je konstanta energija E . To je edino mogoče, če je vsak od treh členov konstanta zase; te konstante bomo označili z E_1 , E_2 in E_3 , tako da je $E = E_1 + E_2 + E_3$. To so delne energije sistema, posamezne enačbe pa so:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{X''}{X} = E_1 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{d^2 X}{dx^2} = E_1 X$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{Y''}{Y} = E_2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_2 Y$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{Z''}{Z} = E_3 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{d^2 Z}{dz^2} = E_3 Z$$

To pa so med seboj neodvisne NDE, vsaka zase pa ustreza problemu neskončne enodimenzionalne (1D) potencialne jame vključno z ustreznima robnima pogojeva. Zdaj že lahko zapišemo celotno valovno funkcijo in energijo za 3D-problem:

$$\psi_{mnl} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \sin\left(\frac{l\pi}{c}z\right)$$

$$E_{mnl} = \frac{\hbar^2}{8M} \left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)$$

Vpeljali smo tri naravna kvantna števila m , n in l . Za celotno rešitev kvantno-mehanskega problema pripišimo še časovni faktor:

$$\Psi_{mnl}(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right) \sin\left(\frac{l\pi}{c}z\right) \cdot \exp\left(-\frac{iE_{mnl}t}{\hbar}\right)$$

To je stacionarna rešitev splošnejše enačbe:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 3.2

Pokažite, da splošna funkcija $\psi(x, t) = \psi_1(x - ct) + \psi_2(x + ct)$ res zadošča valovni enačbi:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

za poljubni funkciji ψ_1 in ψ_2 .

Pri dokazu bomo upoštevali, da sta funkciji ψ_1 in ψ_2 navadni funkciji posrednih spremenljivk $\varphi_1 = x - ct$ in $\varphi_2 = x + ct$. Izračunajmo postopno oba druga odvoda (pozor na oznake za navadne in parcialne odvode!):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot (-c) + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot c$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} \cdot (-c)^2 + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2} \cdot c^2 = c^2 \left(\frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2} \right)$$

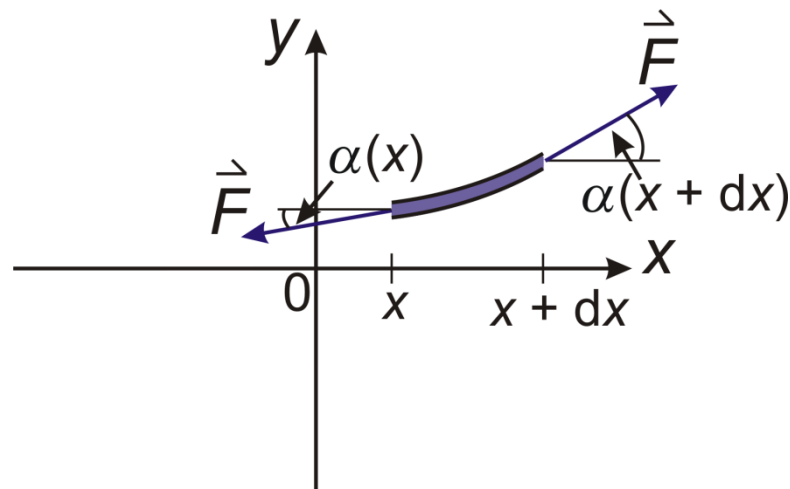
$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} = \frac{d\psi_1}{d\varphi_1} \cdot 1 + \frac{d\psi_2}{d\varphi_2} \cdot 1$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} \cdot 1^2 + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2} \cdot 1^2 = \frac{d^2 \psi_1}{d\varphi_1^2} + \frac{d^2 \psi_2}{d\varphi_2^2}$$

Parcialna druga odvoda valovne funkcije po času in koordinati res zadoščata valovni enačbi. ♠

♥ Računski zgled 3.3

Izpeljite valovno enačbo in ustrezno hitrost za prečno valovanje strune (prožne vrvice), ki je napeta z vzdolžno silo F . Struna je homogena: njen prerez je S , gostota materiala pa ρ .



Slika 15: Sile na kratek odsek strune pri izpeljavi valovne enačbe za njeno nihanje; zaradi nazornosti so prikazani odmiki strune in ustrezni koti so pretirano veliki.

Obravnavajmo sile, ki delujejo na kratek odsek strune z dolžino dx in maso $dm = \rho S dx$. Os x naj bo usmerjena v smeri nedeformirane strune (slika 15). Zaradi geometrijske nazornosti odmik strune od osi x raje označimo s koordinato y namesto s simbolom ψ . Poudarimo, da je pri izpeljavi pravzaprav bolj kot (povprečni) odmik koščka strune in njen nagib glede na os x pomembna njena oblika (ukrivljenost). Košček na sliki ima obliko konveksne naraščajoče funkcije, tako da je njen nagib na levem koncu, $\tan \alpha(x) \equiv \partial y / \partial x(x)$, manjši kot na desnem koncu, $\tan \alpha(x + dx) \equiv \partial y / \partial x(x + dx)$. Kako je z (ne)ravnovesjem sil na takšen košček strune? Navadno so odmiki strune od osi x majhni, zato je povsod majhen tudi kot α . Komponenta natezne sile F v smeri osi x je po velikosti enaka $F_x = F \cos \alpha \approx F$. Glede na smer x sta si torej komponenti sile na obeh koncih koščka strune približno nasprotno enaki, torej v ravnovesju, zato lahko gibanje strune v smeri osi x zanemarimo. Drugače je glede smeri y : razlika komponent obeh sil na obeh koncih koščka strune je: $\Delta F_y = F \sin \alpha(x + dx) - F \sin \alpha(x)$. Iz Newtonovega zakona $dm \cdot a_y = \Delta F_y$ izhaja:

$$dm \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = F \cdot [\sin \alpha(x + dx) - \sin \alpha(x)]$$

Ker je kot α majhen, lahko nadomestimo $\sin \alpha \approx \tan \alpha = \partial y / \partial x$:

$$\rho S dx \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = F \cdot \left[\frac{\partial y}{\partial x}(x + dx) - \frac{\partial y}{\partial x}(x) \right]$$

Nazadnje delimo enačbo z maso $dm = \rho S dx$ in upoštevajmo, da pomeni deljenje razlike prvih odvodov v bližnjih točkah z razliko njunih koordinat dx na desni strani enačbe definicijo drugega odvoda po koordinati x :

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \frac{F}{\rho S} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

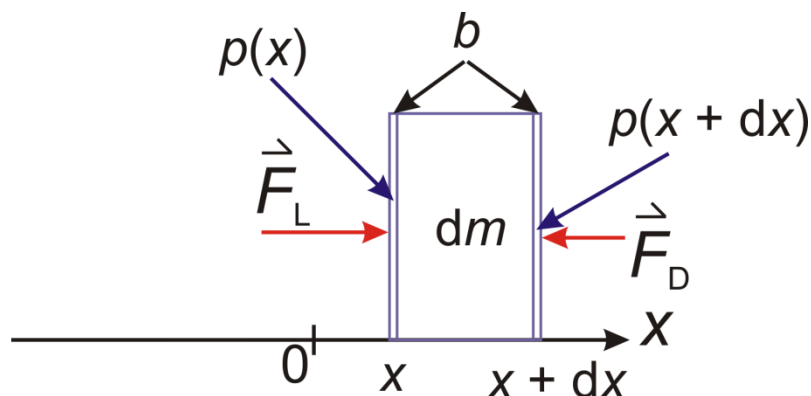
Res smo dobili valovno enačbo s hitrostjo valovanja:

$$c = \sqrt{\frac{F}{\rho S}} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 3.4

Izpeljite valovno enačbo in ustrezno hitrost za zvok kot vzdolžno valovanje snovi. Snov ima modul stisljivosti K in gostoto ρ . Modul stisljivosti je fizikalno najbolj nazorno definiran takole: Če majhen košček snovi s prostornino V dodatno stisnemo z zunanjimi okoliškimi silami (negativna sprememba prostornine ΔV), potem se v njem pojavi dodaten tlak, sorazmeren z relativno spremembo prostornine koščka: $\Delta p = -K \Delta V / V$. Modul K je torej sorazmernostni koeficient med povečanjem tlaka in relativnim zmanjšanjem prostornine snovi, merimo pa ga v megapaskalih.

Izpeljava spominja na tisto pri prečnem valovanju napete strune, le da gre zdaj za longitudinalno valovanje: tako motnja kot odmiki delov snovi naj bodo vzdolž osi x (slika 16).



Slika 16: Sile na košček snovi pri izpeljavi valovne enačbe za zvok

Kot pri prejšnjem zgledu obravnavajmo sile, ki delujejo na kratek odsek (del) snovi z dolžino dx in maso $dm = \rho S dx$. Pri tem je S poljubni prerez snovi, prečno na smer širjenja valovanja. Tokrat odmik snovi od ravnovesne lege x v vsaki točki označimo s funkcijo ψ . Tudi tu poudarimo, da je bolj kot povprečni premik dela snovi pomembno to, kako se premik spreminja vzdolž odseka. Ključna je razlika tlakov na levem in desnem koncu odseka (slika 16). Ta razlika je namreč sorazmerna z rezultanto zunanjih sil (z leve in desne strani) na odsek. Naj bo v našem primeru sila z leve strani $F_L = S \Delta p(x)$ večja kot sila z desne strani $F_D = S \Delta p(x + dx)$, ki kaže v nasprotno smer. To hkrati pomeni, da je dodaten

tlak v levem koncu odseka večji kot v desnem koncu, torej je snov na levi strani odseka bolj stisnjena (v danem trenutku). Iz Newtonovega zakona $dm \cdot a = F_L - F_D$ izhaja:

$$dm \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = S \cdot [\Delta p(x) - \Delta p(x + dx)]$$

Uporabimo definicijo modula stisljivosti:

$$\rho S dx \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = SK \cdot \left[-\frac{\Delta V}{V}(x) + \frac{\Delta V}{V}(x + dx) \right]$$

Pozor, tu moramo biti previdni pri interpretaciji relativnih prostornin na desni strani enačbe. Na primer, simbol V zdaj ne označuje celotne prostornine obravnavanega dela snovi, kot je prikazan na sliki, temveč samo njegov še manjši del na levi ali na desni strani odseka. Enako velja za ΔV : to ni sprememba prostornine celotnega odseka na sliki, ampak to spet velja samo za delček odseka na njegovem levem in desnem koncu. Predpostavimo, da se snov v prečnih smereh glede na smer valovanja nič ne premika (tudi to je le približek in ne nekaj samo po sebi razumljivega). Zato se pojavijo razlike v prostornini samo zaradi premikov v smeri x : $\Delta V/V = \Delta b/b \equiv \partial \psi / \partial x$. Pri tem je b še precej manjši košček intervala dx . Torej velja:

$$\rho S dx \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = SK \cdot \left[\frac{\partial \psi}{\partial x}(x + dx) - \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) \right]$$

Nazadnje delimo enačbo z maso $dm = \rho S dx$ in upoštevajmo, da pomeni deljenje razlike prvih odvodov v bližnjih točkah z razliko njunih koordinat dx na desni strani enačbe definicijo drugega odvoda po koordinati x :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{K}{\rho} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

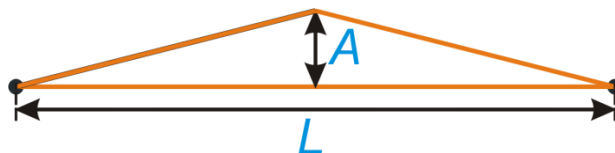
Res smo dobili valovno enačbo s hitrostjo valovanja:

$$c = \sqrt{\frac{K}{\rho}}$$

Nazadnje omenimo, da pri kapljevinah in plinih za modul K res lahko uporabimo modul adiabatne stisljivosti, za elastično trdno snov pa moramo K nadomestiti z Youngovim modulom E . ♠

♥ Računski zgled 3.5

Rešite v splošnem valovno enačbo za nihanje (stojno valovanje) na obeh koncih vpete strune, če je njena začetna oblika prikazana na sliki 17.



Slika 17: Začetna oblika strune

Valovne enačbe

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = c^2 \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

se lotimo z nastavkom $y = X(x)T(t)$, tako da moramo poiskati funkciji X in T . Kot navadno označimo časovni odvod s piko, odvod po koordinati pa s črtico. Valovna enačba z omenjenim nastavkom postane:

$$XT'' = c^2 \cdot X''T \rightarrow \frac{T''}{T} = c^2 \frac{X''}{X} = -c^2 k^2$$

Vnaprej smo uporabili sklep o konstantnosti vsake strani enačbe posebej in izbrali negativno konstanto $-c^2 k^2$, ki ustreza sinusnemu nihanju. Označimo kot navadno $\omega = ck$ in ločeni NDE za oba funkcijska faktorja zapišimo v že znani obliki:

$$T'' + \omega^2 T = 0$$

$$X'' + k^2 X = 0$$

Rešitvi s sinusnim in kosinusnim členom spet združimo:

$$y = [A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)] \cdot [C \cos(kx) + D \sin(kx)]$$

Začetni pogoji za PDE so bolj zapleteni kot pri NDE, ker potrebujemo po dva začetna pogoja za vsako koordinato x posebej. Po enem od začetnih pogojev je začetna hitrost pri vsaki koordinati x enaka nič. To pomeni:

$$v = \partial y / \partial t = [-A\omega \sin(\omega t) + B\omega \cos(\omega t)] \cdot [C \cos(kx) + D \sin(kx)]$$

$$v(t = 0) = B\omega \cdot [C \cos(kx) + D \sin(kx)]$$

Če naj bo ta hitrost enaka nič za vsak x , mora biti $B = 0$. Poenostavljeno funkcijo y prepišemo le s kosinusnim časovnim členom, in to brez konstante A , ker sta C in D dovolj:

$$y = [C \cos(kx) + D \sin(kx)] \cdot \cos(\omega t)$$

Če pa pomislimo na to, da lahko pri stojnem valovanju struna niha na več nihajnih načinov hkrati, je celotna rešitev v resnici neskončna vsota členov, kakršen je zgoraj napisani produkt:

$$y = \sum_{i=1}^{\infty} [C_i \cos(k_i x) + D_i \sin(k_i x)] \cdot \cos(\omega_i t)$$

Neznane parametre k_i , C_i in D_i izračunamo s Fourierovo analizo, medtem ko vedno velja $\omega_i = ck_i$. Upoštevamo namreč še en začetni pogoj, to je obliko funkcije y v trenutku $t = 0$:

$$y(t = 0) = \sum_{i=1}^{\infty} [C_i \cos(k_i x) + D_i \sin(k_i x)]$$

S simetrijo začetne oblike strune na sliki 17 si najlepše pomagamo, če postavimo izhodišče osi x na sredino strune v mirovni legi. Tedaj je funkcija $y(x, t = 0)$ soda funkcija in v njeni Fourierovi vrsti odpadejo sinusni členi. Vendar tudi konstantnega člena, ki ga sicer v razvoju Fourierovem sodih funkcij upoštevamo, v našem primeru ni, ker bi pomenil konstantno, nenihajočo rešitev tudi v časovnem delu; takšnega člena pa pri nihanju seveda ni, če je mirovna lega $y \equiv 0$. Tako v Fourierovi vrsti ostane:

$$y(t = 0) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \cos(k_i x)$$

in $k_i > 0$ za vse indekse i . Ker mora veljati $\cos(k_i L/2) = 0$ (oba konca strune), kosinus pa je enak nič pri argumentu, ki je lihi mnogokratnik števila $\pi/2$, lahko za valovno število k_i zapišemo: $k_i = (2i - 1)\pi/L$, zato:

$$y(t = 0) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \cos\left(\frac{2i-1}{L} \pi x\right)$$

Ta račun je lepa priložnost, da ponovimo bistvo Fourierove analize. Hkrati bomo uporabili še Diracov zapis, ki je sicer bolj znan v kvantni mehaniki. Z njim poudarimo, da lahko na funkcije, v našem primeru kosinusne, gledamo kot na neke vrste vektorjev. Kosinusno funkcijo, ki ustreza indeksu i , bomo na kratko označili s simbolom $|i\rangle$. Preverimo »pravokotnost« funkcij z različnimi indeksi, hkrati pa skalarni produkt funkcije same s seboj:

$$\langle i|j\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{2i-1}{L} \pi x\right) \cos\left(\frac{2j-1}{L} \pi x\right) dx$$

$$\langle i|j\rangle = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} \left[\cos\left(\frac{i+j-1}{L} \cdot 2\pi x\right) + \cos\left(\frac{i-j}{L} \cdot 2\pi x\right) \right] dx$$

I) $i \neq j$

$$\langle i|j\rangle = \frac{L}{4\pi} \left[\frac{1}{i+j-1} \cdot \sin\left(\frac{i+j-1}{L} \cdot 2\pi x\right) + \frac{1}{i-j} \cdot \sin\left(\frac{i-j}{L} \cdot 2\pi x\right) \right] \Bigg|_{-L/2}^{L/2} = 0$$

II) $i = j$

$$\langle i|i\rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{L}{2\pi(2i-1)} \cdot \sin\left(\frac{2i-1}{L} \cdot 2\pi x\right) + x \right] \Bigg|_{-L/2}^{L/2} = \frac{L}{2}$$

Zapišimo Fourierovo vrsto po Diracu:

$$|y\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} C_i |i\rangle$$

Z leve strani jo skalarno zmnožimo z »vektorjem« $|j\rangle$:

$$\langle j|y \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \langle j|i \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \delta_{ij} \cdot \frac{L}{2} = C_j \cdot \frac{L}{2}$$

Kroneckerjev simbol v zadnji enačbi pomeni: $\delta_{ij} = 1$ za $i = j$, sicer pa nič. Nazadnje izračunamo koeficient C_j :

$$C_j = \frac{2}{L} \cdot \langle j|y \rangle = \frac{2}{L} \cdot \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{2j-1}{L} \pi x\right) y(x, t=0) dx$$

Obe funkciji pod integralom sta sodi, zato lahko razpolovimo integracijsko območje:

$$C_j = \frac{4}{L} \cdot \int_0^{L/2} \cos\left(\frac{2j-1}{L} \pi x\right) \cdot A\left(-\frac{2}{L} x + 1\right) dx$$

Funkcija y je namreč na intervalu $(0, L/2)$ linearna, s koeficientom $-2A/L$ in prostim členom A . Integrirajmo do konca:

$$C_j = \frac{4A}{(2j-1)\pi} \cdot \left[\left(1 - \frac{2x}{L}\right) \sin\left(\frac{2j-1}{L} \pi x\right) - \frac{2}{(2j-1)\pi} \cos\left(\frac{2j-1}{L} \pi x\right) \right] \Bigg|_0^{L/2}$$

$$C_j = \frac{8A}{(2j-1)^2 \pi^2}$$

Rezultat je preprost, ker je od nič različen samo kosinusni člen pri spodnji meji. Povzemimo in zapišimo celotno rešitev:

$$y(x, t) = \frac{8A}{\pi^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(2i-1)^2} \cos\left(\frac{2i-1}{L} \pi x\right) \cos\left(\frac{2i-1}{L} \pi ct\right)$$

Za poznejšo uporabo preverimo še nekaj. Pri teoriji Fourierove vrste smo navajeni, da so si med seboj pravokotne tudi sinusne funkcije ter sinusne funkcije s kosinusnimi. Vendar to zagotovo velja, če vzamemo celo osnovno periodo funkcij. Če pa zaradi simetrije periodo skrajšamo, npr. na polovico kot v našem primeru, moramo biti previdni in ne sklepati prehitro. Preverimo torej tudi pravokotnost sinusnih funkcij za enake valovne vektorje kot pri kosinusnih funkcijah (pozor: sinusne funkcije zdaj v krajših niso enake nič, temveč tam najbolj nihajo!):

$$\langle i|j \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \sin\left(\frac{2i-1}{L} \pi x\right) \sin\left(\frac{2j-1}{L} \pi x\right) dx$$

$$\langle i|j \rangle = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} \left[-\cos\left(\frac{i+j-1}{L} \cdot 2\pi x\right) + \cos\left(\frac{i-j}{L} \cdot 2\pi x\right) \right] dx$$

I) $i \neq j$

$$\langle i|j \rangle = \frac{L}{4\pi} \left[-\frac{1}{i+j-1} \cdot \sin\left(\frac{i+j-1}{L} \cdot 2\pi x\right) + \frac{1}{i-j} \cdot \sin\left(\frac{i-j}{L} \cdot 2\pi x\right) \right] \Bigg|_{-L/2}^{L/2} = 0$$

II) $i = j$

$$\langle i|i \rangle = \frac{1}{2} \left[-\frac{L}{2\pi(2i-1)} \cdot \sin\left(\frac{2i-1}{L} \cdot 2\pi x\right) + x \right]_{-L/2}^{L/2} = \frac{L}{2}$$

Izpeljava je skoraj povsem enaka kot pri preverjanju ortogonalnosti kosinusnih funkcij, razlika je le pri negativnem koeficientu prvega kosinusnega člena.

Kolikšna mehanska energija nihanja ustreza j -temu nihajnemu načinu? Enačba za i -ti člen odmika je: $y_i = C_i \cos(k_i x) \cos(\omega_i t)$. Za časovni faktor je vseeno, ali vzamemo sinusno ali kosinusno funkcijo. Mehanska energija je v poljubnem trenutku vsota prožnostne in kinetične energije in je konstantna, če zanemarimo dušenje. Praktično pa jo izračunamo kot maksimalno prožnostno energijo (v skrajni legi) ali pa kot maksimalno kinetično energijo (v ravnovesni legi). Najbolj neposreden je račun maksimalne kinetične energije strune, še prej pa moramo zapisati hitrost v prečni smeri vsakega delčka strune: $v = \partial y_i / \partial t = -\omega_i C_i \cos(k_i x) \sin(\omega_i t)$. Maksimalna hitrost je: $v_0 = \omega_i C_i \cos(k_i x)$, še vedno pa je odvisna od koordinate x , kjer se delček nahaja. Celotno kinetično energijo izračunamo z integralom:

$$E_i = \frac{1}{2} \int_m dm v_0^2 = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} (\rho S dx) [\omega_i C_i \cos(k_i x)]^2$$

Z integralom se nam ni treba ukvarjati, saj je znano, da še integriramo kvadrat sinusne ali kosinusne funkcije po območju L , ki je večkratnik polovične periode (kar za na obeh koncih vpeto strune velja), je rezultat integriranja kar $L/2$. Zato je energija:

$$E_i = \frac{\rho S (\omega_i C_i)^2}{2} \cdot \frac{L}{2}$$

Krožna frekvenca je: $\omega_i = c k_i = (2i-1)\pi c/L$. Upoštevajmo še $c^2 = F/(\rho S)$ in zgoraj izračunani koeficient C_i , pa pristanemo pri izrazu:

$$E_i = \frac{16FA^2}{(2i-1)^2 \pi^2 L}$$

Vrsta za celotno energijo nihanja kar hitro konvergira:

$$E = \frac{16FA^2}{\pi^2 L} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(2i-1)^2} = 2 \cdot \frac{FA^2}{L}$$

Na primer, pri 50 členih dobimo 1,992 namesto številke 2, pri 100 členih 1,996, pri 500 členih pa že 1,9992. Dokažimo še, da se res za vsak nihajni način posebej ohranja vsota kinetične in prožnostne energije strune. Pokažimo to le za skrajno in ravnovesno lego strune. Pri tem ne smemo pozabiti, da ima struna prožnostno energijo E_{pr0} tudi v ravnovesni legi, ko je ravna, saj je že napeta s silo F : napeta struna z dolžino L že ima neki raztezek x_0 . Izračunati moramo torej razliko prožnostne energije ΔE_{pr} v obeh legah. Prožnostna energija je odvisna le od raztezka in ne od oblike strune. Poleg začetnega raztezka x_0 ravne strune se pri njenem nihanju pojavi še dodaten raztezek x_1 . Smiselna je predpostavka $x_1 \ll x_0$, saj so dodatne sile pri deformaciji strune zaradi nihanja zelo majhne v primerjavi z natezno silo F . Ker za struno velja Hookov zakon $F/S = Ex/L_0$, si mislimo struno kot vzmet s koeficientom $K = ES/L_0$, kjer je E Youngov modul, S prerez, L_0 pa začetna dolžina. Razliko obeh prožnostnih energij

izračunamo kar glede na nenapeto struno: $\Delta E_{\text{pr}} = (K/2)[(x_0 + x_1)^2 - x_0^2] = (K/2)[2x_0x_1 + x_1^2] \approx Kx_0x_1 = Fx_1$. Ta preprosti rezultat je logičen, ker pomeni dodatno delo na struni, če ostaja sila napetosti F zaradi zanemarljivih dodatnih sil konstantna. Torej je dovolj računati raztezek strune glede na napeto struno dolžine L , kot je npr. prikazana na sliki 17.

Zapišimo spet odmik za en nihajni način na kratko, brez indeksov: $y = C \cos(kx)\cos(\omega t)$; velja še $\omega = ck$ in $c^2 = F/(\rho S)$. Kinetično energijo v ravnovesni legi smo že zapisali, tu po kar obdržimo zapis z valovnim vektorjem k :

$$E_k = \frac{1}{4} L \rho S C^2 \omega^2 = \frac{1}{4} L \rho S C^2 c^2 k^2 = \frac{1}{4} L \rho S C^2 \cdot \frac{F}{\rho S} k^2 = \frac{1}{4} L F k^2 C^2$$

Pri računu razlike prožnostnih energij pa moramo prej izračunati dolžino deformirane strune v obliki kosinusne krivulje. Splošna enačba za dolžino krivulje $y(x)$ na intervalu (a, b) je:

$$l = \int_a^b \sqrt{1 + (dy/dx)^2} dx$$

V našem primeru je skrajna lega v trenutku $t = 0$: $y = C \cos(kx) \rightarrow dy/dx = -Ck \sin(kx)$. Dolžina strune je zaradi sode simetrije:

$$l = 2 \int_0^{L/2} \sqrt{1 + C^2 k^2 \sin^2(kx)} dx \approx 2 \int_0^{L/2} \left[1 + \frac{1}{2} C^2 k^2 \sin^2(kx) \right] dx = L \left(1 + \frac{1}{4} k^2 C^2 \right)$$

Upoštevali smo, da je drugi člen pod korenem veliko manjši od 1. Razlika prožnostnih energij v skrajni in ravnovesni legi je torej:

$$\Delta E_{\text{pr}} = Fx_1 = F(l - L) = \frac{1}{4} L F k^2 C^2 = E_k$$

Kaj pa, če moramo zaradi Fourierovega razvoja pri računu dodatnega raztezka strune sešteti vse Fourierove člene? Izpeljava gre podobno kot za en sam nihajni način:

$$l = 2 \int_0^{L/2} \sqrt{1 + \left(\sum_{i=1}^{\infty} dy_i/dx \right)^2} dx \approx 2 \int_0^{L/2} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{\infty} dy_i/dx \right)^2 \right] dx$$

Pozor: V izrazu imamo kvadrat vsote in ne vsoto kvadratov, kar v splošnem ni enako! Vendar lahko kvadrat vsote členov pišemo kot dvojno vsoto (po načelu množenja vsakega člena v prvi vsoti z vsakim členom v drugi vsoti). Sproti še integrirajmo enko in prvi člen je kar L . Dobimo kar raztezek x_1 :

$$x_1 = \int_0^{L/2} \left[\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} (dy_i/dx) \cdot (dy_j/dx) \right] dx$$

Pri takšnih izpeljavah moramo paziti, da za drugo vsoto uporabimo drugi seštevalni indeks, ker sta seštevanji po i in j neodvisni med seboj. Zaradi linearnosti integrala lahko zamenjamo vrstni red vsot in integriranja:

$$x_1 = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{L/2} (dy_i / dx) \cdot (dy_j / dx) dx$$

Funkcije y_i so kosinusne, njihovi odvodi so sinusne funkcije, ki so med seboj pravokotne. Zato od dvojne vsote ostanejo samo členi z enakima indeksoma, $j = i$, in s tem enojna vsota:

$$x_1 = \sum_{i=1}^{\infty} \int_0^{L/2} (dy_i / dx)^2 dx$$

Iz $y_i = C_i \cos(k_i x) \rightarrow dy_i / dx = -k_i C_i \sin(k_i x)$ izhaja:

$$x_1 = \sum_{i=1}^{\infty} \int_0^{L/2} k_i^2 C_i^2 \sin^2(k_i x) dx = \frac{L}{4} \cdot \sum_{i=1}^{\infty} (k_i C_i)^2$$

Celotna razlika prožnostnih energij je torej:

$$\Delta E_{\text{pr}} = F x_1 = \frac{FL}{4} \cdot \sum_{i=1}^{\infty} (k_i C_i)^2$$

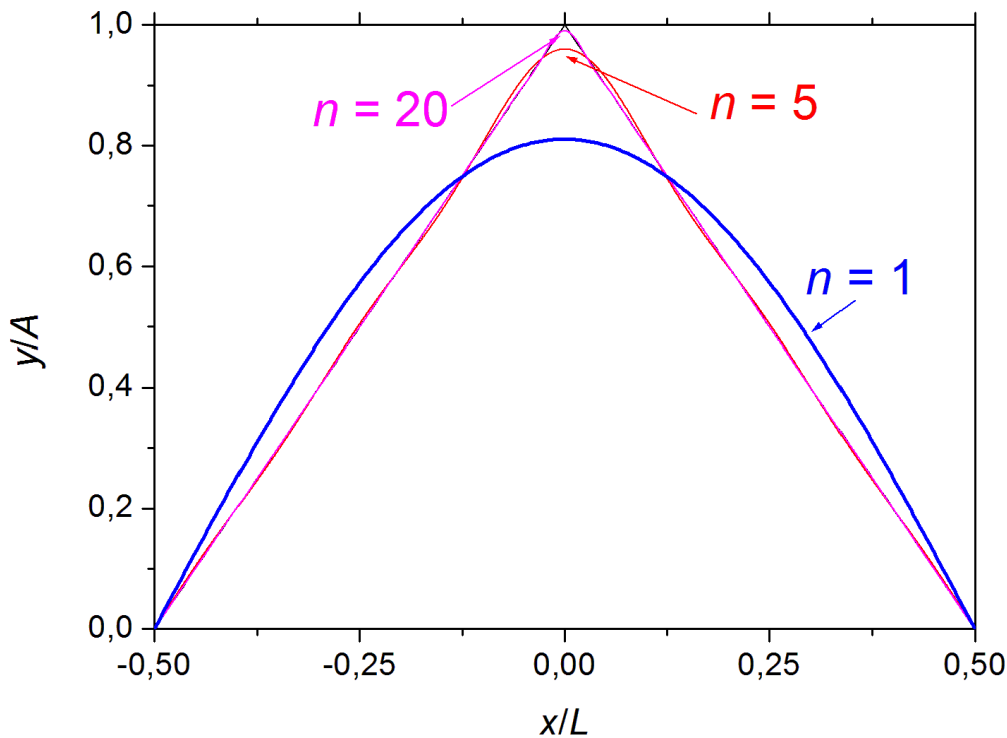
Celotno razliko prožnostnih energij res lahko zapišemo z vsoto po posameznih nihajnih načinih.

Vrnimo se k struni na sliki 17 in preverimo, kako je z njeno prožnostno energijo. Tako kot pri struni kosinusne oblike, izračunamo najprej njeno dolžino l in potem razliko prožnostnih energij:

$$l = 2 \sqrt{\left(\frac{L}{2}\right)^2 + A^2} = L \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{2A}{L}\right)^2} \approx L \left(1 + 2 \frac{A^2}{L^2}\right)$$

$$\Delta E_{\text{pr}} = F x_1 = F(l - L) = 2 \frac{FA^2}{L}$$

Vse se lepo ujema, saj je ta vrednost enaka skupni kinetični energiji, izračunani zgoraj. Iz grafa na sliki 18 razberemo, da se že Fourierova vsota z 20 členi dobro prilega začetni trikotni funkciji.



Slika 18: Začetna oblika strune in ustrezna Fourierova vsota z 1, 5 in 20 členi ♠

♥ Računski zgled 3.6

V Sommerfeldovem modelu obravnavamo prevodne elektrone v kovini kot proste (potencialna energija je nič) [22]. Vendar pa so vezani na kovino, zato bi zanje lahko vzeli model neskončne 3D potencialne jame. Tako bi dobili stojno valovanje zaradi robnih pogojev, da je valovna funkcija na ploskvah kvadra enaka nič. Namesto tega raje izberemo potujoče valove v jami; ta naj bo kar kocka s koordinatami v območju $0 \leq x \leq L$, $0 \leq y \leq L$, $0 \leq z \leq L$. Ustrezni robni pogoji so periodični (Born-von Karmanovi): $\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$ in podobno za drugi dve koordinati. Valovna enačba v notranjosti kocke je:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] = E \psi$$

Uporabite nastavek za ravni val (brez časovnega dela):

$$\psi = C \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

in poiščite vse mogoče vrednosti valovnega vektorja na osnovi periodičnih robnih pogojev. Valovno funkcijo normalizirajte, izrazite energijo sistema in nazadnje dopolnite valovno funkcijo s časovnim delom.

Upoštevajmo npr. robni pogoj glede koordinate x :

$$\exp[i(k_x(x+L) + k_y y + k_z z)] = \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)]$$

$$\exp[ik_x L] = 1 \rightarrow k_x = n_1 \cdot 2\pi / L$$

kjer je n_1 poljubno celo število. Podobno velja: $k_y = n_2 \cdot 2\pi / L$, $k_z = n_3 \cdot 2\pi / L$. Valovni vektorji so torej kvantizirani, njihove vrednosti pa so $\mathbf{k} = (2\pi/L)(n_1, n_2, n_3)$. Normalizacija valovne funkcije pomeni:

$$\int_V \psi \psi^* dV = C^2 V = 1 \rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{V}} = L^{-3/2}$$

Energija je:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Celotna valovna funkcija za stacionarno stanje enega elektrona je:

$$\psi = C \exp\left[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{E}{\hbar} t)\right] = L^{-3/2} \exp\left[\frac{2\pi i}{L} \left\{ (n_1 x + n_2 y + n_3 z) - \frac{ht}{8mL} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \right\}\right]$$

♠

♥ Računski zgled 3.7

V Shrödingerjevo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + V\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

vstavite kvazi-klasični nastavek [7]:

$$\Psi = a \exp(iS/\hbar)$$

kjer sta tako a kot S splošni realni funkciji koordinat in časa. Zapišite sklopljeno kompleksno enačbo za a in S , nato ločite realni in imaginarni del enačbe.

Z dvakratnim odvajanjem po koordinatah in enkratnim odvajanjem po času dobimo naslednjo enačbo, ki jo lahko zapišemo v kompaktni obliki z uporabo vektorskih diferencialnih operatorjev (gradient in Laplaceov operator):

$$a \frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} (\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m} a \nabla^2 S - \frac{i\hbar}{m} \nabla S \cdot \nabla a - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a + Va = 0$$

Ločimo realni in imaginarni del enačbe:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 - \frac{\hbar^2}{2ma} \nabla^2 a + V = 0$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} \nabla^2 S + \frac{1}{m} \nabla S \cdot \nabla a = 0$$

Če drugo enačbo pomnožimo z $2a$, jo lahko prepisemo:

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{a^2 \nabla S}{m} \right) = 0$$

Drugi člen je divergenca izraza v oklepaju. To je neke vrste kontinuitetna enačba za snovni verjetnostni val. ♠

♥ Računski zgled 3.8

Pri opisu gibanja navadnih (Newtonovih) tekočin uporabljamo Navier-Stokesovo (NS) enačbo [16]:

$$\tilde{\rho} \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = \vec{f} - \nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} + \left(\xi + \frac{\eta}{3} \right) \nabla (\nabla \cdot \vec{v})$$

Pri tem je $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ hitrostno polje tekočine. Gostoto smo označili z vijugo nad simbolom ρ , da je ne bi zamenjevali s cilindrično koordinato ρ , ki jo bomo uporabljali pri tej nalogi. Simbola η in ξ označujeta navadno dinamično in dilatacijsko viskoznost tekočine, p je tlak, \mathbf{f} pa prostorninska gostota zunanjih sil, npr. sile teže. To je vektorska enačba in tako v bistvu sistem treh PDE.

Pri zapisu enačbe v cilindričnih koordinatah moramo posebej paziti na tako imenovani adveksijski člen. Past se lahko skriva pri odvajanju po azimutnem kotu φ . Zapišimo ta člen brez gostote:

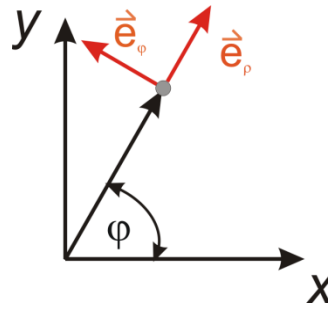
$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = \left(v_\rho \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} v_\varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + v_z \cdot \frac{\partial}{\partial z} \right) (v_\rho \vec{e}_\rho + v_\varphi \vec{e}_\varphi + v_z \vec{e}_z)$$

kar ugotovimo, če najprej hitrost v cilindričnem zapisu skalarno pomnožimo z zgoraj zapisano »nabla«, vemo pa, da so si tudi smerni vektorji v teh koordinatah med seboj pravokotni. Morda najprej pomislimo, da dobimo v splošnem pri tako zapisanem adveksijskem členu 9 členov. V resnici pa dobimo še dva člena več, ker odvajanje po kotu φ deluje tudi na smerna vektorja \mathbf{e}_ρ in \mathbf{e}_φ . Da to preverimo, zapišimo oba vektorja v kartezičnem zapisu samo z dvema komponentama (slika 19), ker je tretja komponenta enaka nič: $\mathbf{e}_\rho = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ in $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi)$. Odvajajmo oba vektorja po kotu:

$$\frac{\partial \vec{e}_\rho}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} (\cos \varphi, \sin \varphi) = (-\sin \varphi, \cos \varphi) = \vec{e}_\varphi$$

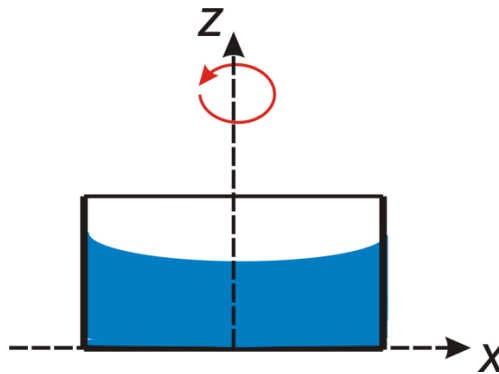
$$\frac{\partial \vec{e}_\varphi}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} (-\sin \varphi, \cos \varphi) = (-\cos \varphi, -\sin \varphi) = -\vec{e}_\rho$$

Smerna vektorja se zamenjata, v drugem primeru pa se pojavi še negativni predznak.



Slika 19: Smerna vektorja e_ρ (v radialni smeri) in e_ϕ (v tangencialni smeri)

Uporabite NS enačbo pri problemu vrtenja posode z vodo (slika 20). Posoda je valjasta, os vrtenja je njena geometrijska os in to je hkrati os z . Poenostavite enačbo in nazadnje ugotovite njeno fizikalno vsebino v tem primeru.



Slika 20: Vrtenje posode s tekočino: prikazana je projekcija na ravnino (x, z) .

Kotna hitrost vrtenja posode je ω in tako se po začetnem prehodnem stanju tako togo vrti tudi voda kot celota. Hitrost zato lahko zapišemo takole:

$$\vec{v} = (\omega\rho)\vec{e}_\phi$$

Ima samo komponento v_ϕ , in ta je odvisna le od »polmera« ρ , to je od razdalje dela tekočine od osi vrtenja. Takoj lahko izračunamo, da je divergenca hitrosti enaka nič, zato odpade zadnji člen na desni strani NS-enačbe. Eksplicitne odvisnosti od časa tudi ni, zato odpade še prvi člen na levi strani enačbe.

Obravnavajmo naprej člen z Laplaceovim operatorjem. Pomagamo si kar z enačbo $\nabla^2\mathbf{v} = \text{grad div } \mathbf{v} - \text{rot rot } \mathbf{v}$. Ker je divergenca hitrosti nič, je »Laplace« kar minus dvojni rotor:

$$\text{rot}(\vec{v}) = (0-0)\vec{e}_r + (0-0)\vec{e}_\phi + \left(\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial(\rho f_\phi)}{\partial\rho} - 0 \right)\vec{e}_z = 2\omega \cdot \vec{e}_z$$

Zadnji izraz pa je konstanten, zato je njegov rotor enak nič:

$$\nabla^2\vec{v} = -\text{rot}(\text{rot}(\vec{v})) = 0$$

Torej odpade tudi ta člen z viskoznostjo.

Advekcijski člen pa je različen od nič. Za zdaj ga pišimo brez gostote, in sicer le od nič različen člen ter poudarimo odvisnost hitrostne komponente od radija. Odvod po kotu deluje le na smerni vektor:

$$(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} = \left[\frac{1}{\rho} v_\varphi(\rho) \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] [v_\varphi(\rho) \vec{e}_\varphi] = \frac{v_\varphi^2(\rho)}{\rho} \cdot \frac{\partial \vec{e}_\varphi}{\partial \varphi} = -\frac{v_\varphi^2(\rho)}{\rho} \cdot \vec{e}_\rho$$

To pa je ravno centripetalni pospešek.

Upoštevajmo še $v_\varphi = \omega\rho$ in zapišimo enačbo s členi, ki so nam še ostali:

$$-\omega^2 \tilde{\rho} \rho \vec{e}_\rho = \vec{f} - \nabla p$$

Volumenska gostota zunanje sile \vec{f} je teža na volumensko enoto, ki kaže v nasprotno smer z -osi. Iz zadnje enačbe izrazimo gradient tlaka:

$$\nabla p = \omega^2 \tilde{\rho} \rho \vec{e}_\rho - \tilde{\rho} g \vec{e}_z$$

Tlak v vodi se spreminja tako v radialni smeri (»centrifugalni« del) kot po višini (»hidrostatični« tlak). Ker sta smeri neodvisni in ker je gradient v cilindričnih koordinatah enostaven, lahko takoj integriramo oba člena: prvega po radiju, drugega po višini, da dobimo sam tlak:

$$p = p_1 + \tilde{\rho} \left(\frac{1}{2} \omega^2 \rho^2 - gz \right)$$

Nedoločeno konstanto označimo s p_1 , in to je tlak sredi dna posode ($\rho = 0$, $z = 0$).

Z NS-enačbo smo pridobili le informacijo o tlaku v vodi. Ker se enačba nanaša na notranjost obravnavanega območja, z njo ne moremo ugotoviti »robnih pogojev«, to je kakšno obliko ima gladina vode, čeprav domnevamo, da bi nam morda dala to informacijo zgoraj dobljena enačba za tlak. Tlak povsod ob površini tekočine bi moral biti kar enak zunanjemu zračnemu tlaku. Da ne ugibamo o tem, si raje pomagamo z 2. Newtonovim zakonom za sile na majhen del tekočine na površini. Naj bo $h(\rho)$ odvisnost višine vode nad dnem posode v odvisnosti od radija. Pri nekem radiju je gladina vode nagnjena za kot φ od vodoravnice, tangens tega kota pa je ravno odvod $dh/d\rho$. Na nagnjen del tekočine (vzamemo kratko, še bolj pa tanko plast na površju, delujeta dve sili: navpično navzdol teža, pravokotno na košček pa sila zaradi razlike tlakov tik pod njim in tik nad njim. Vendar niti ni treba vedeti, kolikšna je ta druga sila. Njuna rezultanta je namreč vodoravna in je ravno centripetalna sila na del. Zaradi podobnih trikotnikov pa je kot med poševno silo zaradi razlike tlakov in silo teže spet kot φ . Zato velja:

$$\frac{dh}{d\rho} = \tan \varphi = \frac{F_c}{F_g} = \frac{dm \cdot \rho \omega^2}{dm \cdot g} = \frac{\rho \omega^2}{g}$$

Ločimo spremenljivki, integriramo in ugotovimo zvezo:

$$h = h_0 + \frac{\omega^2 \rho^2}{2g}$$

Pri tem je h_0 višina vode na geometrijski osi in je manjša kot pred vrtenjem. Če vstavimo ta izraz za višino h namesto koordinate z v zgornjo enačbo za tlak, se člena s kvadratom polmera izničita in je tlak na površini tekočine res povsod enak zračnemu tlaku p_0 . ♠

♥ Računski zgled 3.9

V teoriji elastičnosti trdne snovi velja naslednja enačba za premike posameznih točk telesa pri njegovi deformaciji [13]:

$$\nabla^2 \bar{u} + \frac{1}{1-2\nu} \nabla(\nabla \cdot \bar{u}) = 0$$

Pri tem je število ν Poissonovo razmerje. Enačba velja, če lahko zanemarimo zunanje sile, porazdeljene po prostornini telesa, npr. težo, to je, če so kontaktne sile veliko večje. Pokažite, da se v primeru, ko je rotor premika zaradi simetrije enak nič, enačba poenostavi v obliko

$$\nabla \cdot \bar{u} = C$$

kjer je C konstanta. V primeru cilindrične simetrije uporabimo nastavek za premike v telesu:

$$\bar{u} = f(\rho)\bar{e}_\rho + \varepsilon_z z \bar{e}_z$$

Konstanta ε_z označuje relativni premik v smeri geometrijske osi z . Pokažite, da je rotor premika res nič. Potem poiščite splošno rešitev poenostavljene enačbe za premik, to je, poiščite funkcijo f .

Da dokažemo poenostavitev prve enačbe, ki je drugega reda, v enačbo prvega reda z divergenco, zapišemo Laplaceov operator takole: $\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})$. Če je rotor premika nič, ostane samo prvi člen z gradientom. Tedaj vsebujeta oba člena v zgoraj zapisani enačbi drugega reda gradient divergence premika; če je ta enak nič, potem je divergenca premika res konstantna. Če preverimo vseh šest členov v zapisu za operator rotorja v cilindričnih koordinatah, uvidimo, da so pri našem nastavku za \mathbf{u} res vsi enaki nič. Uporabimo operator divergence na premiku:

$$\nabla \cdot \bar{u} = \nabla \cdot [f(\rho)\bar{e}_\rho + \varepsilon_z z \bar{e}_z] = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d(\rho f(\rho))}{d\rho} + \varepsilon_z = C$$

Konstanto ε_z odštejemo od C , pišimo $2a = C - \varepsilon_z$ in pomnožimo enačbo z ρ :

$$\frac{d(\rho f(\rho))}{d\rho} = 2a\rho$$

Zdaj jo lahko integriramo:

$$\rho f(\rho) = a\rho^2 + b$$

Delimo še s polmerom in že imamo splošno rešitev za funkcijo $f(\rho)$:

$$f(\rho) = a\rho + \frac{b}{\rho} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 3.10

Pri prevajanju toplote v trdni snovi velja za gostoto toplotnega toka naslednja enačba [14]:

$$\vec{j} = -\kappa \nabla T$$

Konstanta κ je toplotna prevodnost snovi, predznak minus pri gradientnem členu na desni strani enačbe pa pomeni, da toplota spontano teče od mesta z višjo temperaturo k mestom z nižjo. Zapišite enačbo v krogelnih koordinatah in upoštevajte krogelno simetrijo: $T = T(r)$, $\mathbf{j} = \mathbf{j}(r)\mathbf{e}_r$. Rešite dobljeno enačbo v splošnem v stacionarnem stanju, ko je rešitev neodvisna od časa. Potem obravnavajte prevajanje toplote skozi debelo krogelno plast s polmeroma R_1 in $R_2 > R_1$, z znanima robnima pogojema: $T(R_1) = T_1$ in $T(R_2) = T_2$. Pomagajte si še z zvezo, da je divergenca gostote toplotnega toka konstanta.

Gradient temperature, ki je odvisna le od krogelne koordinate r , je enostaven: $\nabla T = (dT/dr)\mathbf{e}_r$. Zato enačbo za prevajanje toplote v tem primeru zapišemo takole:

$$\vec{j} = -\kappa \frac{dT}{dr} \vec{e}_r$$

Da rešimo enačbo in poiščemo funkcijo $T(r)$, delujemo nanjo z operatorjem divergence in upoštevamo, da je divergenca gradienta po definiciji enaka Laplaceovemu operatorju:

$$\nabla \cdot \vec{j} = -\kappa \nabla^2 T = C$$

saj je divergenca toka \mathbf{j} konstantna. Upoštevajmo zapis Laplaceovega operatorja v krogelnih koordinatah in od treh členov je od nič različen samo radialni del:

$$-\kappa \left[\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \cdot \frac{dT}{dr} \right) \right] = C$$

Najprej enačbo pomnožimo s faktorjem $-r^2/\kappa$, pišimo $6a = -C/\kappa$ in prvič integriramo:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \cdot \frac{dT}{dr} \right) = 6ar^2$$

$$r^2 \cdot \frac{dT}{dr} = 2ar^3 + b$$

Naredimo še en, podoben korak:

$$\frac{dT}{dr} = 2ar + \frac{b}{r^2}$$

$$T = ar^2 - \frac{b}{r}$$

Upoštevajmo robna pogoja, izračunajmo parametra a in b , končni izraz za temperaturo pa je:

$$T = \frac{(T_2 R_2 - T_1 R_1) r^2 + (T_1 R_2^2 - T_2 R_1^2) R_1 R_2 / r}{R_2^3 - R_1^3} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 3.11

Naloga je podobna kot pri računskem zgledu 3.5, le da gre za prevajanje toplote. Rešite v splošnem »difuzijsko enačbo«, to je parcialno diferencialno enačbo za odvisnost temperature od časa t in koordinate x za 1D-problem. Gre za tanko palico dolžine L , ki je v prečni smeri popolnoma toplotno izolirana od okolice. To pomeni, da se toplota lahko širi le vzdolž osi x . Začetni temperaturni profil naj bo takšen kot odmik pri struni na sliki 17, temperatura v obeh krajiščih pa naj bo ves čas enaka nič (stik z velikim toplotnim rezervoarjem s temperaturo nič na obeh krajiščih). To ne pomeni nujno absolutne ničle temperature, saj lahko vzamemo za nič poljubno referenčno temperaturo.

Zaradi podobnosti z zgledom 3.5 označimo temperaturo s črko u . Ustrezna PDE se razlikuje od valovne enačbe po tem, da je časovni odvod v njej le prve stopnje [12]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Fizikalni pomen konstante a bomo razložili pozneje. Uporabimo značilni nastavek $u = X(x)T(t)$, tako da pridemo do enačbe:

$$X\dot{T} = a^2 \cdot X''T \rightarrow \frac{\dot{T}}{T} = a^2 \frac{X''}{X} = -a^2 k^2$$

Ustrezni enačbi za obe funkciji sta tako:

$$\dot{T} + a^2 k^2 T = 0$$

$$X'' + k^2 X = 0$$

Splošna rešitev za krajevni faktor $X(x)$ je vsota sinusnega in kosinusnega člena kot pri struni, medtem ko je časovni faktor eksponentna funkcija:

$$u = \exp(-a^2 k^2 t) [C \cos(kx) + D \sin(kx)]$$

Pri časovnem delu $T(t)$ nismo pisali dodatnega konstantnega faktorja, ker nam zadostujeta konstanti C in D pri krajevni delu celotne funkcije. Celotna rešitev je v resnici vsota neskončnega števila členov:

$$u = \sum_{i=1}^{\infty} [C_i \cos(k_i x) + D_i \sin(k_i x)] \cdot \exp(-a^2 k_i^2 t)$$

Od tu naprej je potek reševanja naloge enak kot pri zgledu 2.5. Zapišimo celotno rešitev:

$$u(x, t) = \frac{8A}{\pi^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{(2i-1)^2} \cos\left(\frac{2i-1}{L} \pi x\right) \exp\left[-\left(\frac{2i-1}{L} \pi a\right)^2 t\right]$$

Ne pozabimo, da ta rešitev ustreza koordinatnemu sistemu z izhodiščem $x = 0$ na sredini palice, tako da je temperatura u ves čas soda funkcija koordinate x . Druga možnost bi bila, da bi izhodišče postavili v levi konec palice. V tem primeru bi v Fourierovem razvoju krajevnega dela funkcije ostali sinusni členi namesto kosinusnih, a z drugače izraženimi koeficienti k_i . Za zapis $u(x', t)$ v takšnem

koordinatnem sistemu pa nam ni treba ponoviti celotnega postopka, ampak preprosto izvedemo koordinatni premik $x' = x + L/2$. V novih koordinatah je rešitev naloge:

$$u(x, t) = \frac{8A}{\pi^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i+1}}{(2i-1)^2} \sin\left(\frac{2i-1}{L} \pi(x + L/2)\right) \exp\left[-\left(\frac{2i-1}{L} \pi a\right)^2 t\right]$$

Kaj pomeni konstanta a in katera je njena fizikalne enota? Že dimenzijska analiza diferencialne enačbe pokaže, da ima a enoto $\text{m/s}^{1/2}$. Iz teorije je znana relacija $a^2 = \kappa/(\rho c)$, kjer je κ toplotna prevodnost snovi (enota $\text{W}/(\text{m K})$), ρ gostota (enota kg/m^3) in c specifična toplotna kapaciteta ($\text{J}/(\text{kg K})$), tako da so enote v skladu z enačbo. ♠

♥ Računski zgled 3.12

Pri numeričnem reševanju parcialnih diferencialnih enačb v zvezi s skalarnim poljem v treh dimenzijah (3D) si pomagamo s kubično diskretno mrežo [10]. To pomeni, da če imamo skalarno polje $f(x, y, z)$, podamo vrednosti funkcije v diskretnih točkah. Če imamo torej mrežo $N \times N \times N$ točk, med najbližjimi sosedi pa je razdalja h , lahko vzamemo koordinate $x = ih, y = jh, z = kh, 0 \leq i, j, k \leq N - 1$. Zato lahko tudi funkcijo f označimo na kratko z indeksi $f(i, j, k) \equiv f(x = ih, y = jh, z = kh)$. Kako bi potem v diferenčni obliki simulirali diferencialno enačbo $\nabla^2 f + q^2 f = g(x, y, z, f)$, kjer je g znana funkcija?

Gre za to, da napišemo Laplaceov operator v pravi diferenčni obliki. Zato si najprej oglejmo približni zapis prvega in drugega odvoda po eni od koordinat:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{\partial f / \partial x(x+h) - \partial f / \partial x(x)}{h} \approx \frac{[f(x+h) - f(x)] - [f(x) - f(x-h)]}{h^2}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2}$$

Če vzamemo to v diskretni točki (i, j, k) , lahko z indeksi zapišemo:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(i, j, k) \approx \frac{f(i+1, j, k) + f(i-1, j, k) - 2f(i, j, k)}{h^2}$$

Podobno izrazimo druga odvoda po drugih dveh koordinatah, pa imamo cel Laplaceov operator v diferenčni obliki:

$$\nabla^2 f(i, j, k) \approx \frac{f(i+1) + f(i-1) + f(j+1) + f(j-1) + f(k+1) + f(k-1) - 6f}{h^2}$$

Da ne bi zmanjkalo prostora za formulo, smo pri f -ih v števcu zapisali samo tisti indeks, ki je drugačen od tistih v trojici (i, j, k) , tako da npr. $f(j+1)$ pomeni $f(i, j+1, k)$. Zgornjo diferencialno enačbo bi torej v diferenčni obliki zapisali takole:

$$\frac{f(i+1) + f(i-1) + f(j+1) + f(j-1) + f(k+1) + f(k-1) - 6f}{h^2} + q^2 f = g(i, j, k, f) \spadesuit$$

♥ Računski zgled 3.13

3D Gaussovo funkcijo zapišemo v obliki:

$$g(\vec{r}) = C \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) = C \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}\right)$$

Konstruirajte PDE, ki vsebuje Laplaceov operator in ustreza tej funkciji.

Nalogo bi zaradi dane simetrije lahko reševali v sferičnih koordinatah, a za vajo ostanimo kar pri kartezičnih. Dovolj je zapisati drugi odvod funkcije po koordinati x , da nam postane končni rezultat jasen:

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -C \frac{x}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = -C \frac{1}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}\right) + C \frac{x^2}{\sigma^4} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\nabla^2 g = -\frac{3}{\sigma^2} g + \frac{r^2}{\sigma^4} g$$

$$\nabla^2 g + \frac{1}{\sigma^2} \left(3 - \frac{r^2}{\sigma^2}\right) g = 0 \spadesuit$$

Naslednje tri naloge so v zvezi z elektromagnetnim valovanjem (EMV) v valovnem vodniku.

♥ Računski zgled 3.14

Pravokotni valovni vodnik za EMV je v eni smeri neomejen (naj bo to smer osi z), njegov prečni prerez pa je pravokotnik s stranicama a in b . Vodnik ima kovinske stene, opazujemo pa EMV v njegovi notranjosti. Postavimo kartezični koordinatni sistem tako, da so robovi vodnika vzporedni s koordinatnimi osmi: $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, $-\infty < z < \infty$. EMV potuje v smeri osi z . Ustrezne enačbe za komponente električne poljske jakosti so [15]:

$$E_x = E_{x0} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$E_y = E_{y0} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$E_z = 0$$

Komponente valovnega vektorja (k_x, k_y, k_z) v teh enačbah pa so:

$$\vec{k} = \left(\frac{n_x \pi}{a}, \frac{n_y \pi}{b}, k_z \right)$$

Preverite, ali velja valovna enačba $\nabla^2 \mathbf{E} = (1/c^2) \partial^2 \mathbf{E} / \partial t^2$. Kolikšna je krožna frekvenca ω ? Kateri pogoj mora biti izpolnjen, da je divergenca \mathbf{E} enaka nič? Kaj velja za komponente vektorja \mathbf{E} ob stenah valovnega vodnika? Z uporabo Maxwelllove enačbe $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$ izračunajte še gostoto magnetnega polja \mathbf{B} . Katere lastnosti v primerjavi z \mathbf{E} ima \mathbf{B} ?

Da res velja valovna enačba, lahko bralec hitro sam preveri. Za krožno frekvenco velja: $\omega^2 = c^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$. Pogoj $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ je izpolnjen, če velja $k_x E_{x0} + k_y E_{y0} = 0$. Tangencialne komponente vektorja \mathbf{E} ob stenah so enake nič. Na primer, pri steni $x = 0$ je tangencialna komponenta E_y , ki je tam res enaka nič. Podobno velja za steno $x = a$, saj je $\sin(k_x a)$ tam res nič; zato je tudi bila komponenta valovnega vektorja k_x tako izbrana. Podobno je pri stenah $y = 0$ in $y = b$ tangencialna komponenta E_x enaka nič.

Gostoto magnetnega polja izračunamo tako, da najprej poiščemo rotor električne poljske jakosti, potem komponente rotorja integriramo po času in dodamo predznak minus. \mathbf{B} ima komponente:

$$B_x = -\frac{k_z E_{y0}}{\omega} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$B_y = \frac{k_z E_{x0}}{\omega} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$B_z = \frac{k_y E_{x0} - k_x E_{y0}}{\omega} \cos(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z - \omega t)$$

Normalna komponenta \mathbf{B} ob kovinskih stenah je enaka nič, pa tudi divergenca gostote magnetnega polja je nič. Polji sta si med seboj pravokotni. To je transverzalno električno EMV po valovnem vodniku, ker je jakost električnega polja pravokotna na smer širjenja valovanja, medtem ko ima gostota magnetnega polja tudi komponento B_z . Tudi za \mathbf{B} velja valovna enačba kot za \mathbf{E} : $\nabla^2 \mathbf{B} = (1/c^2) \partial^2 \mathbf{B} / \partial t^2$.

♠

♥ Računski zgled 3.15

Naloga je podobna kot pri prejšnjem zgledu, le da imamo sedaj vnaprej podane komponente gostote magnetnega polja v valovnem vodniku (transverzalno magnetno EMV):

$$B_x = B_{x0} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$B_y = B_{y0} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$B_z = 0$$

Preverite, ali velja valovna enačba $\nabla^2 \mathbf{B} = (1/c^2) \partial^2 \mathbf{B} / \partial t^2$. Kateri pogoj mora biti izpolnjen, da je divergenca \mathbf{B} enaka nič? Kaj velja za komponente vektorja \mathbf{B} ob stenah valovnega vodnika? Z uporabo Maxwelllove enačbe $c^2 \nabla \times \mathbf{B} = \partial \mathbf{E} / \partial t$ izračunajte še \mathbf{E} .

Da bo divergenca \mathbf{B} res nič, mora veljati enačba $k_x B_{x0} + k_y B_{y0} = 0$. Izračunajmo zdaj ustrezno jakost električnega polja z uporabo druge Maxwellove enačbe (brez \mathbf{j}):

$$\vec{E} = c^2 \int (\nabla \times \vec{B}) dt$$

Po izračunu rotorja \mathbf{B} in časovnem integriranju dobimo:

$$E_x = -\frac{c^2 k_z B_{y0}}{\omega} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$E_y = \frac{c^2 k_z B_{x0}}{\omega} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z - \omega t)$$

$$E_z = \frac{c^2 (k_x B_{y0} - k_y B_{x0})}{\omega} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z - \omega t)$$

Spet sta izpolnjeni valovni enačbi za obe polji. Spet sta tangentska komponenta \mathbf{E} in pravokotna komponenta \mathbf{B} ob kovinskih stenah enaki nič, pa tudi divergenca \mathbf{E} je nič. Polji sta si med seboj spet pravokotni. ♠

♥ Računski zgled 3.16

V tem primeru ne gre za valovni vodnik, temveč za valjasti resonator. To je valj s polmerom R , višino c in tankimi kovinskimi stenami. V njegovi notranjosti vzbudimo stojno EMV. Geometrijska os naj bo os z . Uporabili bomo cilindrične koordinate ρ , φ in z : $0 \leq \rho \leq R$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq z \leq c$. Obravnavajmo le poseben primer, ko ima električno polje smer osi z . Električna poljska jakost je torej $\mathbf{E} = E(r, \varphi) \mathbf{e}_z$. Neodvisna je od koordinate z , tako da je njena divergenca res enaka nič. Rešite naslednjo Laplaceovo enačbo za krajevno odvisnost električnega polja v cilindričnih koordinatah:

$$\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \cdot \frac{\partial E}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2} = -k^2 E$$

Upoštevajte robni pogoj, da je ob stenah električno polje povsod pravokotno na stene (torej tam nima tangencialne komponente). Potem dodajte časovni faktor, nazadnje pa izračunajte še gostoto magnetnega polja.

Seveda bomo spet poskusili z razcepom: $E = \Omega(\rho)\Phi(\varphi)$. Takoj napišimo tudi ustrezne robne pogoje. Ker \mathbf{E} nima tangentske komponente pri $\rho = R$, mora veljati $\Omega(R) = 0$. Pri $z = 0$ in $z = c$ v tem primeru ni nobenega dodatnega pogoja, ker je polje že pravokotno na ti dve ploskvi valja. Pri $\rho = 0$ pa se skriva še en, manj očiten pogoj: tu azimutni kot φ nima nobenega pomena in mora biti zaradi enoličnosti funkcija E pri $\rho = 0$ neodvisna od φ . Glede na gornji razcep pa imamo samo dve možnosti: $\Omega(0) = 0$ ali pa je $\Phi(\varphi)$ kar konstanta. In seveda zaradi enoličnosti tudi drugod v valju še »robni« pogoji: $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$. Zaradi splošnosti bomo predvideli obe možnosti. Nadaljujmo:

$$\frac{1}{\rho} \cdot \Phi \frac{d}{d\rho} \left(\rho \cdot \frac{d\Omega}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \Omega \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -k^2 \Omega \Phi$$

Odslej bomo navadne odvode pisali s črticami. Enačbo delimo s produktom $\Omega\Phi$:

$$\frac{1}{\rho\Omega}(\rho\Omega')' + \frac{\Phi''}{\rho^2\Phi} = -k^2$$

Za azimutni del funkcije lahko zapišemo: $\Phi = C \exp(im\varphi) + D \exp(-im\varphi)$. Ampak tu zaradi periodičnosti funkcije Φ ni nobenega dvoma: število m je naravno ali 0, tako da zapišemo raje v realnem: $\Phi = C \cos(m\varphi) + D \sin(m\varphi)$. Prav nič ne izgubimo pri fizikalni splošnosti, če vzamemo samo $\Phi = \cos(m\varphi)$.

Tako preostane enačba za radialni faktor:

$$\frac{1}{\rho\Omega}(\rho\Omega')' - \frac{m^2}{\rho^2} = -k^2$$

Preurejena enačba je:

$$\Omega'' + \frac{1}{\rho}\Omega' + \left(k^2 - \frac{m^2}{\rho^2}\right)\Omega = 0$$

To pa je Besselova enačba z rešitvijo:

$$\Omega = AJ_m(k\rho) + BJ_{-m}(k\rho)$$

Ostane le Besselova funkcija J_m , ker ima J_{-m} singularnost pri $\rho = 0$.

Besselova funkcija J_0 ima pri $\rho = 0$ vrednost 1, funkcije J_m z naravnim m pa so pri $\rho = 0$ enake nič. To pa je ravno prav glede enoličnosti celotne funkcije za $\rho = 0$, neodvisno od kota φ . Zapišimo celotno polje v smeri osi z , vključno s časovnim delom:

$$\vec{E} = E_0 J_m(k\rho) \cos(m\varphi) \sin(\omega t) \vec{e}_z$$

Pri tem velja še $\omega = ck$. Ker so funkcije J_m , \cos in \sin sode ali lihe, ne izgubimo pri splošnosti, če vzamemo $k \geq 0$. Upoštevajmo še robni pogoj pri $\rho = R$: $J_m(kR) = 0 \rightarrow k = \xi_{mn}/R$, kjer je ξ_{mn} n -ta ničla Besselove funkcije J_m . Vrednosti k so torej lahko le diskretne.

Gostoto magnetnega polja izračunamo spet kot minus časovni integral rotorja električne poljske jakosti, seveda v cilindričnih koordinatah:

$$\vec{B} = \frac{E_0}{\omega} \left[\frac{m}{\rho} J_m(k\rho) \sin(m\varphi) \vec{e}_r + k J_m'(k\rho) \cos(m\varphi) \vec{e}_\varphi \right] \cos(\omega t)$$

Magnetno polje ima torej radialno in azimutno komponento. Črtica pri J_m pri azimutni komponenti pomeni odvod funkcije po celem argumentu $x = k\rho$, ne po polmeru, ker smo k že izpostavili. Če pa upoštevamo še znani izraz za odvod Besselove funkcije, $J_m' = (J_{m-1} - J_{m+1})$, lahko zapišemo končni izraz s tremi »sosednjimi« (po indeksih) Besselovimi funkcijami:

$$\vec{B} = \frac{E_0}{\omega} \left[\frac{m}{\rho} J_m(k\rho) \sin(m\varphi) \vec{e}_r + \frac{k}{2} (J_{m-1}(k\rho) - J_{m+1}(k\rho)) \cos(m\varphi) \vec{e}_\varphi \right] \cos(\omega t)$$

Divergenca \mathbf{B} je nič, magnetno polje pa je očitno pravokotno na električno polje. Normalna komponenta B_r je pri $\rho = R$ enaka nič.

♥ Računski zgled 3.17

V prostoru z dielektrično konstanto $\varepsilon = 1$ vzpostavimo homogeno električno polje z jakostjo E_0 . V to polje vstavimo kovinsko kroglo s polmerom R . Kako je s poljem v krogli in v njeni okolici? Nalogo rešite v sferičnem koordinatnem sistemu z osjo z v smeri zunanega polja. Pomagajte si s skalarnim potencialom φ in upoštevajte naslednje zveze [15]:

- 1) Jakost električnega polja zapišemo kot $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, kjer je φ skalarni potencial.
- 2) Količine v notranjosti krogle bomo označili z indeksom 1, tiste v zunanosti pa z indeksom 2. Ker v krogli ni električnega polja, velja: $\varphi_1 = \text{konst.}$ Ker zunaj krogle ni električnih nabojev, velja Laplaceova enačba: $\nabla^2\varphi_2 = 0$.
- 3) Potencial je na površju krogle zvezen tako kot drugod v prostoru.
- 4) Na meji med različnima sredstvoma velja: $\mathbf{D}_{2n} - \mathbf{D}_{1n} = \sigma$, kjer je σ površinska gostota naboja, simbol n pa označuje normalno (v našem primeru radialno) komponento gostote električnega polja na mejno ploskev.
- 5) Čeprav je na površju krogle porazdeljen pozitivni in negativni površinski naboj, je skupni naboj na krogli enak nič.
- 6) Daleč od krogle je električno polje homogeno: $\mathbf{E} = E_0\mathbf{e}_z$, kjer je $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)$.

Izhodišče koordinatnega sistema je v središču krogle. Sistem je simetričen glede na rotacijo okrog osi z , zato skalarni potencial ni odvisen od azimutnega kota, temveč le od polmera r in polarnega kota θ . V limiti $r \rightarrow \infty$ je zaradi homogenega električnega polja (pogoj 6) potencial enostaven: $\varphi_2 \rightarrow -E_0z = -E_0r \cos \theta$. Tik ob površju krogle pa mora biti φ_2 neodvisen od kota θ , saj mora biti enak notranjemu homogenemu potencialu φ_1 . Zato poskusimo z nastavkom iz dveh členov: $\varphi_2 = f(r)\cos \theta + g(r)$, kjer naj bi prvi člen prevladoval pri zelo velikih polmerih v primerjavi s polmerom krogle, $r \gg R$, drugi člen pa pri polmerih, malo večjih od R . Najprej rešimo v splošnem PDE za potencial φ_2 . Laplaceov operator zapišemo v krogelnih koordinatah (prva knjiga Matematične fizike) brez azimutnega člena:

$$\nabla^2\varphi_2 = \left[\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] [f(r)\cos \theta + g(r)] = 0$$

Enačbo lahko takoj pomnožimo z r^2 . Po odvajanju dobimo dve vrsti členov: tiste, ki vsebujejo faktor $\cos \theta$, in tiste, ki tega faktorja ne vsebujejo:

$$\left[r^2 \frac{d^2 f}{dr^2} + 2r \frac{df}{dr} - 2f \right] \cos \theta + \left[r^2 \frac{d^2 g}{dr^2} + 2r \frac{dg}{dr} \right] = 0$$

Če naj enačba velja za vsak par neodvisnih spremenljivk r in θ , to pomeni, da je izraz v vsakem od obeh oglatih oklepajev enak nič. Na takšen način smo namesto PDE dobili dve neodvisni navadni diferencialni enačbi, ker je v eni samo funkcija $f(r)$, v drugi pa samo $g(r)$. Obe enačbi sta Eulerjevega tipa in ju rešimo z nastavkom r^λ , eksponent λ pa moramo še poiskati. Pokažimo način reševanja le pri prvi enačbi, ker gre pri drugi enačbi za enak postopek: $f = r^\lambda$, $df/dr = \lambda r^{\lambda-1}$, $d^2f/d\lambda^2 = \lambda(\lambda-1)r^{\lambda-2}$. Poljubne multiplikacijske konstante nismo niti pisali. Vstavimo funkcijo in njena odvoda v NDE:

$$r^2 \frac{d^2 f}{dr^2} + 2r \frac{df}{dr} - 2f = 0$$

$$r^2 \cdot \lambda(\lambda - 1)r^{\lambda-2} + 2r \cdot \lambda r^{\lambda-1} - 2r^\lambda = 0$$

Krajšamo skupni faktor r^λ in rešimo preprosto kvadratno enačbo za λ : $\lambda_1 = -2$, $\lambda_2 = 1$. Funkcija f je torej sestavljena iz dveh različnih potenčnih členov. Podobno ugotovimo za funkcijo g : $\lambda_3 = -1$, $\lambda_4 = 0$. Zdaj lahko sestavimo celotno rešitev za »zunanji« potencial:

$$\varphi_2 = \left[\frac{A}{r^2} + Br \right] \cos \theta + \left[\frac{C}{r} + D \right]$$

Ugotoviti moramo še konstante A , B , C in D , tako da upoštevamo zgoraj zapisane dodatne pogoje. V limiti $r \rightarrow \infty$ ostaneta le člena s konstantama B in D . Glede na pogoj 6, zapisan kot $\varphi_2 \rightarrow -E_0 z = -E_0 r \cos \theta$, pa mora veljati $B = -E_0$ in $D = 0$. Dalje, pri $r = R$ potencial ne sme biti odvisen od kota θ , zato je takrat izraz v prvem oglatem oklepaju pri φ_2 enak nič ali: $A = -BR^3 = E_0 R^3$. Nedoločena je ostala le še konstanta C . Zapišimo vmesni rezultat:

$$\varphi_2 = \left[\left(\frac{R}{r} \right)^3 - 1 \right] E_0 r \cdot \cos \theta + \frac{C}{r}$$

Na vrsti je izračun jakosti električnega polja zunaj kovinske krogle. Gradient bomo seveda tudi izrazili v sferičnih koordinatah brez azimutnega člena:

$$\vec{E}_2 = -\nabla \varphi_2 = - \left[\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \left\{ \left[\left(\frac{R}{r} \right)^3 - 1 \right] E_0 r \cdot \cos \theta + \frac{C}{r} \right\}$$

Bralcu v razmislek: Zakaj smo v prvem oglatem oklepaju smerna vektorja raje pisali pred operatorjema parcialnega odvajanja (to je pravzaprav pomembno le pri drugem členu, ki vsebuje odvajanje po polarnem kotu)?

Odvajanje nam da:

$$\vec{E}_2 = \left\{ \left[2 \left(\frac{R}{r} \right)^3 + 1 \right] E_0 \cos \theta + \frac{C}{r^2} \right\} \vec{e}_r + \left[\left(\frac{R}{r} \right)^3 - 1 \right] E_0 \sin \theta \cdot \vec{e}_\theta$$

Ob površju krogle ($r = R$) drugi člen odpade:

$$\vec{E}_2(r = R, \theta) = \left\{ 3E_0 \cos \theta + \frac{C}{R^2} \right\} \vec{e}_r$$

To je prav: električno polje kaže v radialno smer in je pravokotno na površino kovine. To je hkrati skladno s splošnejšim pravilom, da so silnice električnega polja pravokotne na ekvipotencialne ploskve; površje krogle je namreč ekvipotencialna ploskev (φ je enak povsod na njej).

Površinska gostota naboja na krogli je po pravilu (4) zgoraj enaka:

$$\sigma = \vec{D}_{2n} = \varepsilon_0 \vec{E}_{2r}(r = R, \theta) = \varepsilon_0 \left\{ 3E_0 \cos \theta + \frac{C}{R^2} \right\}$$

Celoten naboj na površini krogle izračunamo z integralom njegove površinske gostote po krogelni ploskvi:

$$e = \iint \sigma dS = 4\pi\epsilon_0 C$$

Hitro se da namreč preveriti, da je prispevek kosinusnega člena pri integriranju enak nič, integriranje člena s konstanto C pa je enostavno. Ker pa je bila na začetku kroglja nevtralna, tudi pri porazdelitvi površinskega naboja ne more biti skupnega naboja. Torej je konstanta C enaka nič. Zapis za površinsko gostoto naboja na krogli še poenostavimo:

$$\sigma = 3\epsilon_0 E_0 \cos \theta$$

To pomeni: pri kotih $0 < \theta < 90^\circ$ je $\sigma > 0$ (presežek pozitivnega naboja ali natančneje: primanjkljaj prevodnih elektronov), pri $90^\circ < \theta < 180^\circ$ pa $\sigma < 0$ (presežek prevodnih elektronov). Predznaki so v redu, ker ostri polarni koti pomenijo polovico krogelne površine v smeri električnega polja, zato gre zaradi odbojne sile presežek elektronov na nasprotno polovico.

Električna poljska jakost brez člena s C je:

$$\vec{E}_2 = \left[2\left(\frac{R}{r}\right)^3 + 1 \right] E_0 \cos \theta \cdot \vec{e}_r + \left[\left(\frac{R}{r}\right)^3 - 1 \right] E_0 \sin \theta \cdot \vec{e}_\theta$$

Izberimo še ravnino $y = 0$ in izrazimo ta vektor s kartezičnima komponentama E_x (pravokotno na smer homogenega polja daleč od krogle) in E_z (v smeri homogenega polja). Zapis naj bo le napol v kartezični obliki, saj je praktično obdržati sferični spremenljivki r in θ . Smerna vektorja sta: $\vec{e}_r = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, $\vec{e}_\theta = (\cos \theta, 0, -\sin \theta)$. Torej sta komponenti jakosti električnega polja:

$$E_{2x} = 3E_0 \left(\frac{R}{r}\right)^3 \sin \theta \cos \theta$$

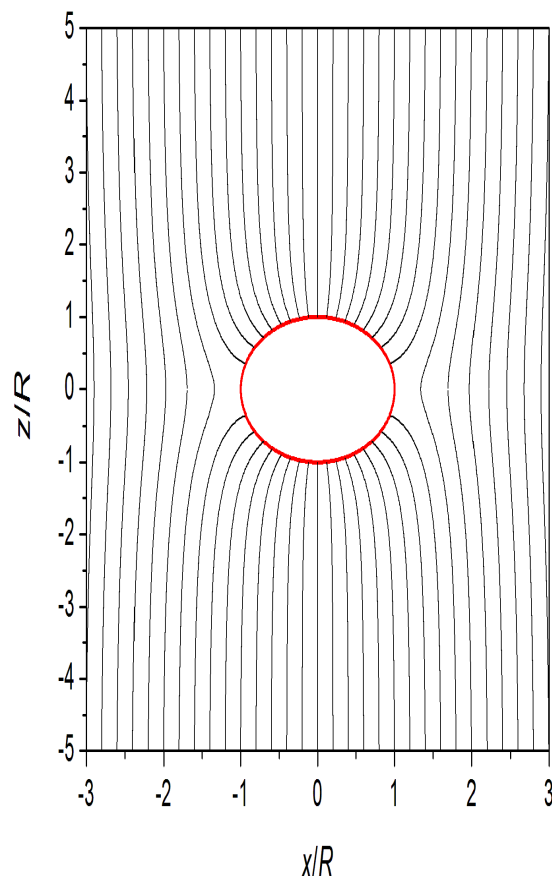
$$E_{2z} = E_0 \left[1 + \left(\frac{R}{r}\right)^3 (3\cos^2 \theta - 1) \right]$$

Zanimivo je preveriti, kako se spreminjata obe komponenti: 1) na simetrijski osi ($\theta = 0$), 2) v ekvatorialni ravnini ($\theta = \pi/2$). V prvem primeru ni nobenega presenečenja: $E_x(r, 0) = 0$, $E_z(r, 0) = E_0 \cdot [1 + 2(R/r)^3]$. V drugem primeru pa velja: $E_x(r, \pi/2) = 0$, $E_z(r, \pi/2) = E_0 \cdot [1 - (R/r)^3]$. Torej je tako v ekvatorialni ravnini kot na simetrijski osi električno polje vzporedno homogenemu polju \vec{E}_0 daleč od krogle. Kako to, če pa bi na površju krogle zaradi pravokotnosti električnega polja pričakovali, da kaže na osi x polje tudi v smeri osi x ? Preprosto: pri $r = R$ in $\theta = \pi/2$ sta obe komponenti polja enaki nič. Na »ekvatorju« krogle torej ni električnega polja.

Nazadnje upoštevajmo še $\sin \theta = x/r$ ter $\cos \theta = z/r$ (še vedno v ravnini $y = 0$) in uporabimo kartezični zapis v celoti:

$$E_{2x} = 3E_0 \frac{R^3 xz}{(x^2 + z^2)^{5/2}}$$

$$E_{2z} = E_0 \left[1 + \frac{R^3(2z^2 - x^2)}{(x^2 + z^2)^{5/2}} \right]$$



Slika 21: Silnice električnega polja okrog kovinske krogle. Opomba: Črke in številke so nekoliko popačene, ker smo morali dodatno raztegniti sliko v navpični smeri, da je krožnica res krožnica.

Slika 21 prikazuje silnice električnega polja v poljubni ravnini (2D-prikaz), ki vsebuje simetrijsko os sistema. Silnice rišemo na osnovi zadnjega para enačb. Najbolj ukrivljene so tiste silnice, ki so pri večjih absolutnih vrednostih koordinate z , ko so že praktično poravnane, od osi z oddaljene za okrog $1,5 R$. Kot zanimivost naj omenimo, da smo pri programiranju problema silnice računali le za četrti kvadrant ($x > 0, z < 0$) na sliki, saj smo lahko za druge tri kvadrante upoštevali simetrijo. Pri računanju silnic smo začeli pri $z = -5R$ (kar je že dovolj daleč od krogle) in pri različnih vrednostih x za različne silnice. Račun se je končal, ko je silnica dosegla kroglo (rdečo krožnico na sliki) ali pa os $z = 0$. Med silnicami na sliki je razkorak spodaj enak $\Delta x = 0,2 R$. S slike je razvidno, da se na krogli končajo silnice, ki so spodaj oddaljene od geometrijske osi do razdalje $1,6 R$, silnice od $1,8 R$ pa se zvezno nadaljujejo v zgornja dva kvadranta. S poskušanjem smo ugotovili, da je natančnejša meja med obema vrstama silnice pri spodnji razdalji od osi $\approx 1,705 R$. Sicer pa se vse silnice ukrivijo navznoter – proti krogli; edino par silnic, ki poteka po osi z , ostane seveda popolnoma raven. ♠

♥ Računski zgled 3.18

Z uporabo Greenove funkcije G formalno rešite Poissonovo enačbo v elektrostatiki: $\nabla^2 \varphi = -\rho/\epsilon_0$. Pri tem je φ električni potencial, ρ pa gostota električnega naboja, ki je neko podano skalarno polje. Greenova funkcija se pojavlja kot jedro pri izrazu potenciala z integralom [8]:

$$\varphi(\vec{r}) = \int G(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}') dV'$$

Pri tem gre integral po celem prostoru (praktično pa po tistem delu prostora, kjer je porazdeljen naboj). Razlikovati moramo tudi med lokalno spremenljivko \mathbf{r} za lego, kjer iščemo potencial, in integracijsko spremenljivko \mathbf{r}' . Greenova funkcija je soda pri zamenjavi predznaka argumenta. Navodilo: na zgornjo integralsko enačbo delujte z Laplaceovim operatorjem (ta naj deluje na spremenljivko \mathbf{r} in ne na \mathbf{r}'), upoštevajte pa še znano zvezo s 3D Diracovo funkcijo delta: $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(\mathbf{r})$, kjer je r velikost krajevnega vektorja \mathbf{r} .

Če delujemo z Laplaceovim operatorjem na φ , ta operator komutira z integralom, pod njim pa deluje samo na funkcijo G , ker le ta vsebuje argument \mathbf{r} :

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = \int \nabla^2 G(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}') dV' = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0}$$

Nazadnje smo upoštevali še Poissonovo enačbo. Bodimo posebej pozorni na to, da ima ρ v integralu argument \mathbf{r}' , ρ na koncu enačbe pa argument \mathbf{r} . Če naj bo ta integralska enačba izpolnjena za poljubno funkcijo ρ , mora biti faktor pred ρ v integralu očitno sorazmeren s 3D delta funkcijo (glede na njeno definicijo):

$$\nabla^2 G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{\epsilon_0} \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$$

Potem iz zveze $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(\mathbf{r})$ dobimo Greenovo funkcijo samo:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Končno lahko zapišemo formalno integralsko rešitev Poissonove enačbe:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV'$$

Greenova funkcija v splošnem je lahko funkcija dveh argumentov posebej, \mathbf{r} in \mathbf{r}' , v našem primeru pa se zaradi simetrije izrazi kot funkcija razlike argumentov: $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. ♠

♥ Računski zgled 3.19

Z uporabo sinusne Fourierove transformacije krajevne odvisnosti temperature kot funkcije koordinate x (1D problem) in časa t rešite naslednjo nalogo o prevajanju toplote [17]. Pol neskončna tanka palica, ki leži na pozitivnem poltraku osi x ($x \geq 0$), lahko prevaja toploto samo v vzdolžni smeri. Ustrezna enačba je:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Opazujemo temperaturo palice pri pozitivnem času. Ustrezni robni in začetni pogoj sta: $T(0, t) = T_0$ za $t > 0$, $T(x, 0) = 0$ za $x > 0$. Opazimo, da gre za nezveznost $T(0, 0)$ bodisi glede na čas bodisi glede na

koordinato. Problem si morda najlaže zamislimo tako, da je v času $t = 0$ temperatura palice povsod enaka 0, tudi pri $x = 0$, potem pa »kar naenkrat« dvignemo temperaturo levega konca palice pri $x = 0$ na T_0 . Naloga ima vseeno smiselno fizikalno rešitev $T(x, t)$, razen seveda pri $x = 0, t = 0$.

Naredimo torej ustrezno transformacijo po koordinati in namesto spremenljivke x bomo uporabili spremenljivko y :

$$U(y, t) = \int_0^{\infty} T(x, t) \sin(xy) dx$$

Ker ima koordinata x enoto m, mora spremenljivki y ustrezati enota $1/m$. Ker časa nismo transformirali, ustreza parcialnemu odvodu $\partial T/\partial t$ preprosto transformiranka $\partial U/\partial t$. Tudi začetni pogoj ohrani svojo obliko: $U(y, 0) = 0$. Fourierovo transformiranko za drugi odvod po koordinati x smo že zapisali v prvem poglavju v razdelku o Fourierovi transformaciji, zato iz tega izhaja preprosta diferencialna enačba:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -ky^2 U + kyT_0$$

Čeprav smo zaradi jasnosti obdržali oznako za parcialni odvod po času, je to pravzaprav le navadna diferencialna enačba, in sicer nehomogena linearna. Zapišimo njeno splošno rešitev, bralec pa naj jo preveri sam:

$$U(y, t) = C \exp(-ky^2 t) + \frac{T_0}{y}$$

Z upoštevanjem začetnega pogoja izračunamo še konstanto C in dobimo:

$$U(y, t) = \frac{T_0}{y} [1 - \exp(-ky^2 t)]$$

Narediti moramo samo še obratno sinusno Fourierovo transformacijo:

$$T(x, t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} U(y, t) \sin(xy) dy = \frac{2T_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{y} [1 - \exp(-ky^2 t)] \sin(xy) dy$$

Izkaže se, da lahko zadnji integral zapišemo v enostavnejši obliki:

$$T(x, t) = \frac{2T_0}{\sqrt{\pi}} \int_{f(x,t)}^{\infty} \exp(-s^2) ds$$

kjer je spodnja meja integrala:

$$f(x, t) = \frac{x}{2\sqrt{kt}}$$

To lahko preverimo s primerjavo parcialnega odvoda po x in t pri obeh integralih. Še elegantnejša pa je neposredna preverba veljavnosti začetne diferencialne enačbe z odvajanjem integralov. Pokažimo to za integral v drugi obliki, saj je to tudi lepa vaja v odvajanju integrala. Ker se obe neodvisni

spremenljivki, x in t , skrivata samo v spodnji meji integrala, v funkciji $f(x, t)$, moramo odvajati posredno prek f . Če pa integral odvajamo po njegovi spodnji meji, je rezultat kar izraz pod integralom, kjer za integracijsko spremenljivko s vstavimo kar spodnjo mejo; dodati moramo še predznak minus, ker odvajamo po spodnji meji. Odvajajmo najprej po času (sam integral zaradi kratkosti označimo z I):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{2T_0}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{dI}{df} \cdot \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{2T_0}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4kt}\right) \cdot \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{2\sqrt{kt}^{3/2}}\right)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_0 x}{2\sqrt{\pi k t^3}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4kt}\right)$$

Podobno odvajamo najprej prvič po koordinati, uredimo in spet odvajamo:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{2T_0}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{dI}{df} \cdot \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{2T_0}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4kt}\right) \cdot \left(\frac{1}{2\sqrt{kt}}\right)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{T_0}{\sqrt{\pi k t}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4kt}\right)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_0 x}{2k\sqrt{\pi k t^3}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4kt}\right)$$

Ta izraz se razlikuje od časovnega odvoda samo po faktorju k v imenovalcu, tako da je diferencialna enačba res izpolnjena. Zlahka preverimo še oba pogoja. Ko vstavimo $x = 0$, je tudi funkcija f v spodnji meji integrala enaka nič, pa dobimo znan določeni integral z vrednostjo $\pi^{1/2}/2$, tako da je res $T = T_0$. Vstavitev vrednosti časa $t = 0$ je bolj dvomljiva; spodnja meja f postane neskončna, vendar ne moremo kar tako sklepati, da je spodnja neskončna meja enaka zgornji neskončni meji. Mislimo pa si, da je to res, tako da je integral res enak nič.

Naj omenimo še, da če bo bralec poskusil podobno preveritev diferencialne enačbe s prvotnim določenim integralom s spodnjo mejo 0, mora odvajati drugače. Tu sta namreč x in t le parametra v funkciji pod integralom, tako da po odvajanju integral ostane. V tem primeru dobimo (navidezno!) razliko pri odvajanju po času in dvakratnim odvajanjem po koordinati, ta razlika pa se pojavi zaradi enke – prvega člena v oglatem oklepaju. Vendar pa ta integral znamo rešiti, zato bomo lahko interpretirali dobljeno razliko:

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{1}{y} \sin(xy) dy = \frac{\pi}{2}$$

Pisali smo integral brez faktorja $2T_0/\pi$. Očitno je integral konstanten, zato so njegovi odvodi po spremenljivkah x in t enaki nič. Pri drugem členu z eksponentno funkcijo pa se časovni odvod in drugi krajevni odvod zares ujemata do faktorja k . ♠

♥ Računski zgled 3.20

Naloga je podobna prejšnji, le da si bomo tokrat pomagali z Laplaceovo transformacijo časovne odvisnosti temperature kot funkcije koordinate x (1D problem) in časa t [17]. Tanka palica, ki naj spet leži na osi x , ima zdaj končno dolžino a ($0 \leq x \leq a$). Toploto lahko prevaja samo v vzdolžni smeri:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Začetni pogoj je homogena temperatura za celo palico: $T(x, 0) = T_0$. Robna pogoja pri pozitivnem času pa sta zdaj dva: $\partial T/\partial x(0, t) = 0$ (levi konec palice je toplotno izoliran) in $T(a, t) = T_1$ (desni konec palice držimo pri stalni temperaturi, ki je različna od začetne temperature).

Najprej spravimo enačbo v napol brezdimenzijsko obliko, kjer le za temperaturo obdržimo enoto kelvin. Uvedba brezdimenzijske koordinate je očitna: $x \rightarrow x/a$, tako da je desni konec palice pri $x = 1$. Hkrati vpeljemo takšen brezdimenzijski čas, da se na desni strani znebimo konstante k z enoto m^2/s : $t \rightarrow t/t_0$, kjer je referenčni čas $t_0 = a^2/k$. Enačba glede na brezdimenzijski čas in koordinato je torej:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Naredimo Laplaceovo transformacijo po času in namesto spremenljivke t bomo uporabili spremenljivko z :

$$U(x, z) = \int_0^{\infty} T(x, t) \exp(-zt) dt$$

Ker ima čas t enoto s, mora spremenljivki z ustrezati enota $1/\text{s}$. Ker koordinate nismo transformirali, ustreza parcialnemu drugemu odvodu $\partial^2 T/\partial x^2$ preprosto transformiranka $\partial^2 U/\partial x^2$. Za Laplaceovo transformiranko za prvi odvod po času t uporabimo tretje pravilo v prvem poglavju v razdelku o Laplaceovi transformaciji, $L(f'(t)) = -f(0) + zF(z)$, zato iz tega izhaja:

$$zU - T_0 = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

Robni pogoj pri $x = 0$ za U je analogen robnemu pogoju za prvotno funkcijo T : $\partial U/\partial x(0, z) = 0$. Robni pogoj pri $x = 1$ za U pa izpeljemo s transformacijo robnega pogoja za T : $U(1, z) = L(T_1) = T_1 L(1) = T_1/z$.

Čeprav smo zaradi jasnosti obdržali oznako za drugi parcialni odvod po koordinati, je to pravzaprav le navadna diferencialna enačba drugega reda. Mislimo si, da je pri tej enačbi z pozitivna konstanta, zato je njena splošna rešitev:

$$U(x, z) = C_1 \cosh(x\sqrt{z}) + C_2 \sinh(x\sqrt{z}) + \frac{T_0}{z}$$

Kot rešitvi homogenega dela diferencialne enačbe, to je brez člena T_0 , bi sicer lahko vzeli obe eksponentni funkciji, vendar sta hiperbolični funkciji \cosh in \sinh prikladnejši, ker je ena soda, druga pa liha. Pri odvodu $\partial U / \partial x(0, z)$ je v splošnem od nič različen le člen s konstanto C_2 , zato mora biti zaradi ustreznega robnega pogoja $C_2 = 0$. Za drugi robni pogoj, pri $x = 1$, pa velja:

$$C_1 \cosh(\sqrt{z}) + \frac{T_0}{z} = \frac{T_1}{z}$$

Izrazimo C_1 in spet zapišemo U :

$$U(x, z) = \frac{T_1 - T_0}{z} \cdot \frac{\cosh(x\sqrt{z})}{\cosh(\sqrt{z})} + \frac{T_0}{z}$$

Narediti moramo samo še obratno Laplaceovo transformacijo glede na čas. Postopek ni preprost, radovedni bralec pa si ga lahko ogleda v viru (Suhadolc 1994). Tu navedimo le končno rešitev v obliki vrste:

$$T(x, t) = T_1 + \frac{4(T_1 - T_0)}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n-1} \exp\left(-\frac{(2n-1)^2 \pi^2 t}{4}\right) \cos \frac{(2n-1)\pi x}{2}$$

Nazadnje se vrnimo k »fizikalni« koordinati in času:

$$T(x, t) = T_1 + \frac{4(T_1 - T_0)}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n-1} \exp\left(-\frac{(2n-1)^2 \pi^2 k t}{4a^2}\right) \cos \frac{(2n-1)\pi x}{2a}$$

SKLOPLJENI SISTEM DIFERENCIALNIH ENAČB

♥ Računski zgled 4.1

Zapišite drugi Newtonov zakon za medsebojno silo dvojice teles. Sile iz okolice zanemarimo. Telesi imata masi m_1 in m_2 , telo 1 deluje na telo 2 s centralno silo \mathbf{F} , telo 2 na telo 1 pa seveda z nasprotno enako silo $-\mathbf{F}$. Namesto s krajevnima vektorjema teles \mathbf{r}_1 in \mathbf{r}_2 glede na neki laboratorijski koordinatni sistem računajte z vektorjema $\mathbf{r}^* = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ in $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$. Prvi vektor podaja masno središče para teles, drugi pa njuno relativno lego [19–20].

Najprej se prepričajmo, da je \mathbf{r}^* linearna funkcija časa, to je, $\mathbf{a}^* = 0$, tako da upoštevamo $\mathbf{a}_1^* = -\mathbf{F}/m_1$ in $\mathbf{a}_2^* = \mathbf{F}/m_2$:

$$\bar{\mathbf{a}}^* = \frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}^*}{dt^2} = \frac{m_1 \bar{\mathbf{a}}_1 + m_2 \bar{\mathbf{a}}_2}{m_1 + m_2} = \frac{-\bar{\mathbf{F}} + \bar{\mathbf{F}}}{m_1 + m_2} = 0$$

$$\bar{\mathbf{v}}^* = \bar{\mathbf{v}}_0 + \int \bar{\mathbf{v}} dt = \bar{\mathbf{v}}_0$$

$$\mathbf{r}^* = \bar{\mathbf{r}}_0 + \bar{\mathbf{v}}_0 t$$

Težišče sistema se giblje premo enakomerno, če so »zunanje« sile zanemarljive.

Obravnavajmo še spreminjanje vektorja \mathbf{r} , to je, enačbo za ustrezni pospešek:

$$\bar{\mathbf{a}} = \frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}}{dt^2} = \bar{\mathbf{a}}_2 - \bar{\mathbf{a}}_1 = \frac{\bar{\mathbf{F}}}{m_2} - \frac{(-\bar{\mathbf{F}})}{m_1} = \frac{\bar{\mathbf{F}}(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}$$

Vpeljemo lahko reducirano (efektivno) maso:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

in zakon »gibanja« relativnega krajevnega vektorja med telesoma elegantno zapišemo:

$$\bar{\mathbf{a}} = \frac{\bar{\mathbf{F}}}{\mu}$$

Takšna obravnava je primerna pri gravitacijski in električni sili, ki sta odvisni od razdalje med telesoma. ♠

♥ Računski zgled 4.2

Imamo kaskado N valjastih posod z dotoki in odtoki vode kot pri zgledu 1.6, razporejenih od zgoraj navzdol, tako da se i -ta posoda prazni v $(i + 1)$ -to posodo. Prva (zgoranja) posoda nasprotno od drugih nima dotoka. Ploščino osnovne ploskve i -te posode označimo s $S_{i,OP}$, ploščino njene luknjice pa z $S_{i,LUK}$. V računu uporabimo naslednja razmerja ploščin: $\alpha_i = S_{i,OP}/S_{i,LUK} \gg 1$ (razmerje ploščin osnovne ploskve in efektivne luknjice odtoka za isto posodo) in $\beta_i = S_{i,OP}/S_{i-1,OP}$ (razmerje ploščin efektivne luknjice odtoka za sosednji posodi). Ker prva posoda nima predhodnice, zanjo vzamemo kar $\beta_1 = 1$. V trenutku $t = 0$ pa je višina gladine vode v i -ti posodi enaka h_{0i} . Kako se s časom spreminjajo višine gladine vode v vseh posodah?

Obravnavajmo spreminjanje prostornine vode v i -ti posodi ($i > 1$). Trenutna višina vode v njej je h_i . Zgoraj priteče v posodo ravno toliko vode, kot jo izteče iz višje posode (indeks $i - 1$) skozi njeno luknjico, spodaj pa odteka voda skozi luknjico (efektivnega) prereza $S_{i,LUK}$ s hitrostjo $v = (2gh_i)^{1/2}$. Zato velja za prostornino vode v tej posodi diferencialna enačba:

$$\frac{dV_i}{dt} = S_{i-1,LUK} \cdot \sqrt{2gh_{i-1}} - S_{i,LUK} \cdot \sqrt{2gh_i}$$

$$S_{i,OP} \frac{dh_i}{dt} = S_{i-1,LUK} \cdot \sqrt{2gh_{i-1}} - S_{i,LUK} \cdot \sqrt{2gh_i}$$

$$\frac{dh_i}{dt} = \frac{1}{\alpha_i} \left[\frac{1}{\beta_i} \cdot \sqrt{2gh_{i-1}} - \sqrt{2gh_i} \right]$$

Dobili smo sklopljeni sistem NDE. Enačba velja tudi za prvo posodo, $i = 1$, če vzamemo kar $h_0 = 0$ (njena »predhodna« posoda je prazna). Vendar pa nivo vode v prvi posodi ni odvisen od nivojev v drugih posodah in lahko takoj uporabimo rešitev iz računskega zgleda 1.6:

$$h_1(t) = h_{01} \left[1 - \frac{t}{T_1} \right]^2$$

kjer je čas praznjenja te posode:

$$T_1 = \alpha_1 \cdot \sqrt{\frac{2h_{01}}{g}}$$

Podobno časovno parametrizacijo uporabimo tudi za druge posode:

$$T_i = \alpha_i \cdot \sqrt{\frac{2h_{0i}}{g}}$$

V tolikšnem času bi se izpraznila i -ta posoda, če ne bi bilo dotoka vode vanjo iz višje posode.

Potem sistem NDE-enačb rešujemo po vrsti, najprej za drugo posodo, ker lahko v enačbo že vstavimo rešitev za prvo posodo:

$$\frac{dh_2}{dt} = \frac{1}{\alpha_2} \left[\frac{1}{\beta_2} \cdot \sqrt{2gh_1} - \sqrt{2gh_2} \right]$$

$$\frac{dh_2}{dt} = \frac{\sqrt{2g}}{\alpha_2} \left[\frac{1}{\beta_2} \cdot \sqrt{h_{01}} \cdot \left(1 - \frac{t}{T_1} \right) - \sqrt{h_2} \right]$$

Uvedemo brezdimenzijski spremenljivki $x = t/T_2$ in $y = h_2/h_{02}$, pa dobimo enačbo:

$$\frac{dy}{dx} = 2 \left[k \left(1 - \frac{T_2}{T_1} x \right) - \sqrt{y} \right]$$

s koeficientom $k = (1/\beta_2)(h_{01}/h_{02})^{1/2}$. To in enačbe za druge posode moramo reševati numerično. ♠

♥ Računski zgled 4.3

Imamo zaporedje radioaktivnih razpadov jeder $A \rightarrow B \rightarrow C$. Zadnje jedro, C, je stabilno, razpadna časa za zaporedna razpada $A \rightarrow B$ in $B \rightarrow C$ pa sta τ_{AB} in τ_{BC} . V času $t = 0$ obstaja N_0 jeder A, medtem ko jeder B in C ni. Značilna NDE za časovno odvisnost števila jeder samo zaradi razpada je: $dN/N = -dt/\tau$. Kako se s časom spreminjajo števila jeder N_A , N_B in N_C ?

Zapišimo diferencialno enačbo samo zaradi razpada drugače: $dN/dt = -N/\tau$. Jedra A samo razpadajo, jedra B nastajajo iz jeder A in hkrati razpadajo, jedra C pa samo nastajajo iz jeder B. Zato so ustrezne enačbe:

$$\frac{dN_A}{dt} = -\frac{N_A}{\tau_{AB}}$$

$$\frac{dN_B}{dt} = -\frac{dN_A}{dt} - \frac{N_B}{\tau_{BC}} = \frac{N_A}{\tau_{AB}} - \frac{N_B}{\tau_{BC}}$$

$$\frac{dN_C}{dt} = -\frac{dN_B}{dt} = \frac{N_B}{\tau_{BC}} - \frac{N_A}{\tau_{AB}}$$

Prva enačba ni sklopljena z drugima dvema in jo takoj rešimo, vključno z začetnim pogojem:

$$N_A = N_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right)$$

Na vrsti je druga enačba:

$$\frac{dN_B}{dt} = \frac{N_0}{\tau_{AB}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right) - \frac{N_B}{\tau_{BC}}$$

To je nehomogena linearna diferencialna enačba prvega reda, ki jo zapišemo nekoliko drugače:

$$\frac{dN_B}{dt} + \frac{N_B}{\tau_{BC}} = \frac{N_0}{\tau_{AB}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right)$$

Rešitev homogenega dela enačbe (brez desne strani) je:

$$N_{BH} = C_{BH} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{BC}}\right)$$

Neznano konstanto smo označili s C_{BH} . Za partikularno rešitev nehomogene enačbe seveda deluje nastavek $N_{BP} = C_{BP} \exp(-t/\tau_{AB})$. Vstavimo ga v celotno enačbo:

$$-\frac{C_{BP}}{\tau_{AB}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right) + \frac{C_{BP}}{\tau_{BC}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right) = \frac{N_0}{\tau_{AB}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right)$$

Tako lahko izračunamo koeficient C_{BP} :

$$C_{BP} = \frac{N_0}{\tau_{AB}/\tau_{BC} - 1}$$

Celotna rešitev nehomogene enačbe je $N_B = N_{BH} + N_{BP}$ in vključuje oba eksponentna faktorja:

$$N_B = C_{BH} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{BC}}\right) + \frac{N_0}{\tau_{AB}/\tau_{BC} - 1} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right)$$

Nazadnje pri tej enačbi izračunamo še neznan koeficient C_{BH} glede na pogoj $N_B(0) = 0$, torej $C_{BH} = -C_{BP}$. Končna rešitev je:

$$N_B = \frac{N_0}{\tau_{AB}/\tau_{BC} - 1} \left[\exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right) - \exp\left(-\frac{t}{\tau_{BC}}\right) \right]$$

Ta rešitev je vedno pozitivna, kot mora biti, ne glede na vrednosti obeh razpadnih časov. Diferencialne enačbe za N_C pa nam ni treba rešiti, ker lahko o številu jeder C sklepamo neposredno iz števil N_A in N_B . Če jedra B ne bi razpadala, bi jih bilo ravno toliko, kolikor je razpadlo jeder A: $N_B' = N_0 - N_A = N_0(1 - \exp(-t/\tau_{AB}))$. Ker pa razpadajo v jedra C, je jeder B manj in iz razlike izračunamo število nastalih jeder C: $N_C = N_B' - N_B$. Rezultat je:

$$N_C = N_0 \left[1 - \frac{(\tau_{AB}/\tau_{BC}) \exp\left(-\frac{t}{\tau_{AB}}\right) - \exp\left(-\frac{t}{\tau_{BC}}\right)}{\tau_{AB}/\tau_{BC} - 1} \right]$$

Na sliki 22 so prikazani grafi za primere $\tau_{AB}/\tau_{AC} = 10, 2, 1,01, 0,5$ in $0,1$. V limiti $t \rightarrow \infty$ ostanejo samo jedra C. Opomba: v primeru $\tau_{AB} = \tau_{BC}$ moramo NDE za N_B reševati drugače (partikularna rešitev!).

Za vajo izračunajmo še maksimum N_B . Časovni odvod $dN_B/dt = 0$ in rešitev je:

$$t_{\max} = \frac{\ln(\tau_{AB}/\tau_{BC})}{1/\tau_{BC} - 1/\tau_{AB}}$$

$$N_{B\max} = N_0 (\tau_{BC}/\tau_{AB}) \exp(-t_{\max}/\tau_{AB})$$

Zapišimo čas maksimuma lepše, če uporabimo simbol $x = \tau_{AB}/\tau_{BC}$:

$$t_{\max} = \tau_{AB} \cdot \frac{\ln x}{x-1}$$

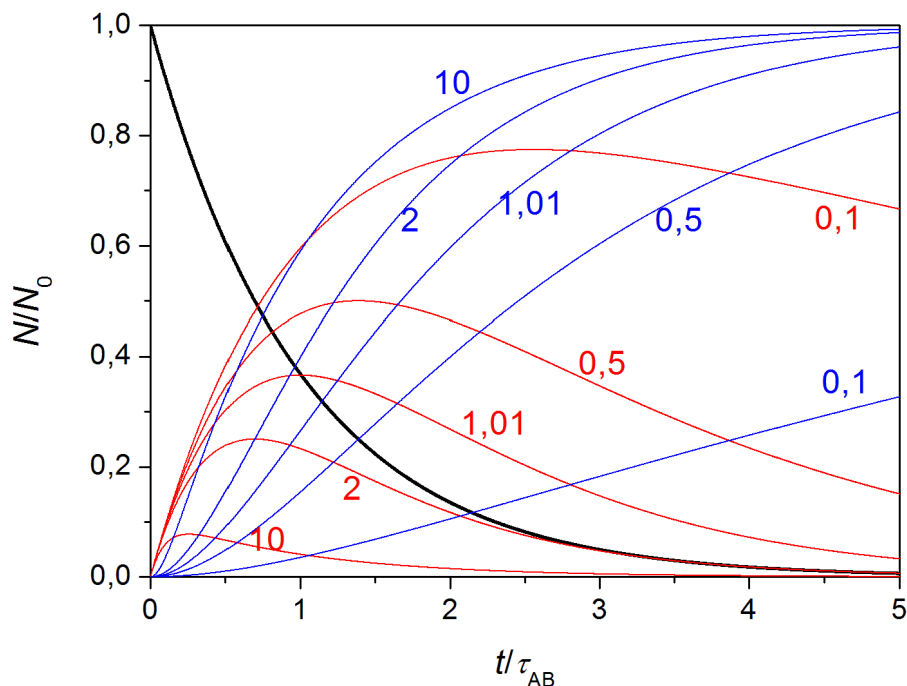
Rešitev za števili jeder N_B in N_C v primeru $x = 1$ nismo zapisali, čeprav bi lahko poskusili kar z limitnim preходом $x \rightarrow 1$, ne da bi reševali diferencialne enačbe posebej za ta primer. Kako pa je z maksimumom N_B v primeru $x = 1$? Čas t_{\max} poiščemo z limitnim preходом in L'Hospitalovim pravilom:

$$t_{\max}(x=1) = \tau_{AB} \cdot \lim_{x \rightarrow 1} \frac{\ln x}{x-1} = \tau_{AB} \cdot \lim_{x \rightarrow 1} \frac{1/x}{1} = \tau_{AB}$$

Temu ustreza višina maksimuma:

$$N_{B\max}(x=1) = N_0/e \approx 0,37 N_0$$

S slike je razvidno, da primer $x = 1$ ne pomeni nič posebnega glede fizikalnega dogajanja. Čim manjši je x (to je, čim večji je razpadni čas τ_{BC}), tem več časa vztraja sistem pri znatnem številu jeder B (rdeče krivulje). Jedra B tedaj »počasi« razpadajo v jedra C.



Slika 22: Grafi $N_A(t)$ (črna krivulja), $N_B(t)$ (rdeče krivulje) in $N_C(t)$ (modre krivulje), normalizirani na začetno število N_0 jeder A in razpadni čas τ_{AB} ♠

♥ Računski zgled 4.4

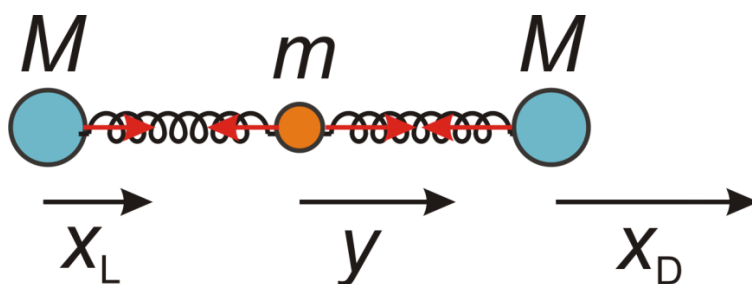
Nihanje atomov v ravni molekuli CO_2 obravnavamo z mehanskim modelom. Na sredini je ogljikov atom z maso m , levo in desno od njega pa sta kisikova atoma z maso po M . Med ogljikovim in vsakim kisikovim atomom je vijačna vzmet s koeficientom k . Ravnovesna razdalja C – O je a (ta podatek pa v računu sploh ne igra nobene vloge) in to je hkrati dolžina nenapete vzmeti. Obravnavajte linearno nihanje teh atomov.

Označimo odmik levega kisikovega atoma od ravnovesne lege v desno z x_L , odmik desnega kisikovega atoma v desno je x_D , odmik ogljikovega pa y . Za lažjo obravnavo enačb si mislimo naraščajoče odmike v desno: $x_L < y < x_D$. Tedaj sta obe vzmeti raztegnjeni, tako da se skušata zaradi sile vzmeti spet skrčiti in delujeta z ustreznimi silami na atome (slika 23). Zapišimo drugi Newtonov zakon za vse tri atome:

$$M\ddot{x}_L = k(y - x_L)$$

$$m\ddot{y} = -k(y - x_L) + k(x_D - y) = k(x_L + x_D - 2y)$$

$$M\ddot{x}_D = k(y - x_D)$$



Slika 23: Molekula CO_2 kot sistem treh teles in dveh vzmeti; prikazani so odmiki v desno. Vsi trije odmiki hkrati v desno so dovoljeni, če poleg nihanja vključimo še translacijo molekule. Sile vzmeti na telesa so prikazane z rdečimi puščicami.

Pri kisikovem atomu smo morali upoštevati obe vzmeti: leva ga vleče v levo (negativna sila), desna pa v desno (pozitivna sila). Predznaki v enačbah so pravilni, če je pri odmiku, ki ustreza pospešku v isti enačbi, negativen predznak. Pričakujemo, da nihajo vsi trije atomi z enako frekvenco, a z različno amplitudo in fazo. Najbolj praktično je odmike zapisati kompleksno: $x_L = A \exp(i\omega t)$, $y = B \exp(i\omega t)$, $x_D = C \exp(i\omega t)$, pri čemer so lahko kompleksne tudi amplitude A , B in C . Še pred uporabo teh nastavkov za odmike vse tri enačbe delimo z ustrežno maso in definiramo: $\omega_M = (k/M)^{1/2}$, $\omega_m = (k/m)^{1/2}$; to so krožne frekvence za vzmetno nihalo s koeficientom vzmeti k in maso M ali m . Kisikova atoma imata večjo maso od ogljikovega, $M > m$, zato velja $\omega_M < \omega_m$. Tri diferencialne enačbe postanejo navadne enačbe za koeficiente A , B in C :

$$-\omega^2 A = \omega_M^2 (B - A)$$

$$-\omega^2 B = \omega_m^2 (A + C - 2B)$$

$$-\omega^2 C = \omega_M^2 (B - C)$$

To je sistem treh homogenih linearnih enačb, ki jih prepisemo v matematično jasnejšo obliko:

$$(\omega^2 - \omega_M^2)A + \omega_M^2 B + 0 = 0$$

$$\omega_m^2 A + (\omega^2 - 2\omega_m^2)B + \omega_m^2 C = 0$$

$$0 + \omega_M^2 B + (\omega^2 - \omega_M^2)C = 0$$

V resnici je poleg koeficientov A , B in C še neznan tudi krožna frekvenca ω , ki pa jo v tem sistemu enačb gledamo kot parameter in ne kot neznanico. Homogeni sistem linearnih enačb ima od nič različne rešitve samo, če je determinanta matrike sistema enaka nič:

$$\det \begin{bmatrix} \omega^2 - \omega_M^2 & \omega_M^2 & 0 \\ \omega_m^2 & \omega^2 - 2\omega_m^2 & \omega_m^2 \\ 0 & \omega_M^2 & \omega^2 - \omega_M^2 \end{bmatrix} = 0$$

Dobimo enačbo tretje stopnje za neznanico ω^2 :

$$\omega^2 [\omega^4 - 2(\omega_M^2 + \omega_m^2)\omega^2 + \omega_M^2(\omega_M^2 + 2\omega_m^2)] = 0$$

Prva rešitev, $\omega^2 = 0$, pomeni samo translacijo celotne molekule, zato ni zanimiva. Hitro se namreč prepričamo, da ji ustrezajo enaki premiki: $A = B = C$. Zapišimo drugi dve rešitvi, ki resnično pomenita nihanje in se izkažeta za zelo enostavni:

$$\omega_1^2 = \omega_M^2$$

$$\omega_2^2 = \omega_M^2 + 2\omega_m^2$$

Ker pa je krožna frekvenca po definiciji pozitivna, sta končni rešitvi:

$$\omega_1 = \omega_M$$

$$\omega_2 = \sqrt{\omega_M^2 + 2\omega_m^2}$$

Fizikalna interpretacija obeh rešitev je preprosta, če vstavimo ti frekvenci v zgornji sistem enačb in izrazimo zveze med koeficienti. V prvem primeru, za $\omega = \omega_1 = \omega_M$, ugotovimo: $C = -A$, $B = 0$. To pomeni, da ogljikov atom miruje (zato v enačbi za to krožno frekvenco ni mase tega atoma), kisikova pa nihata v nasprotni fazi; to je fizikalno smiselno, saj ostaja pri takšnem nihanju težišče molekule pri miru. V drugem primeru, $\omega = \omega_2$, pa nihajo vsi trije atomi: $C = A$, $B = -2(\omega_m^2/\omega_M^2)A = -2(M/m)A$. Kisikova atoma nihata z enako fazo, ogljikov atom pa gre v nasprotno smer in njegov odmik ima večjo amplitudo. Spet ostaja težišče molekule pri miru: $AM + Bm + CM = 0$.

Čprav lastnih frekvenc ω_1 in ω_2 ne moremo izračunati direktno, ker moramo poznati koeficient vzmeti k oziroma ustrezne medatomske sile pa je razmerje obeh frekvenc neodvisno od k :

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} = \sqrt{1 + 2 \frac{\omega_m^2}{\omega_M^2}} = \sqrt{1 + 2 \frac{M}{m}}$$

Razmerje frekvenc, ki ga lahko preverimo eksperimentalno, npr. z absorpcijo elektromagnetnega valovanja primernih valovnih dolžin, je odvisno le od razmerja znanih mas atomov obeh vrst:

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} = \sqrt{1 + 2 \cdot \frac{16}{12}} = 1,91 \spadesuit$$

♥ Računski zgled 4.5

Sklopljeno nihanje atomov v kristalni mreži in hkrati longitudinalno komponento valovanja kot zvok prikažemo s preprostim 1D-modelom [22]. Z njim obravnavamo N enakih atomov z maso m z ravnovesno medsebojno razdaljo a . Med sosednjima atomoma je vijačna vzmet s koeficientom k . Umetno privzamemo, da sta z vzmetjo povezana tudi prvi (najbolj levi) in zadnji (najbolj desni) atom. Gre bolj za matematično poenostavitev, ki sicer zaradi velikega števila N nima nobenega fizikalnega vpliva na sistem. Obravnavajte linearno nihanje teh atomov in hkrati longitudinalni val ter izrazite zvočno hitrost.

Označimo odmik j -tega atoma od ravnovesne lege v desno z x_j . Namesto nastavka za nihanje kot pri prejšnjem zgledu uporabimo nastavek za longitudinalni ravni val, najprej v zveznem približku: $\Delta x = A \exp[i(\omega t - qx)]$. Prehod k diskretni sliki ali nihanju posameznih atomov naredimo s substitucijo $x \rightarrow x_j = (j-1)a$, če je prvi atom pri $x = 0$. Torej je nastavek v diskretnem modelu: $x_j = A \exp[i(\omega t - q(j-1)a)]$. Newtonov zakon pa pove:

$$m\ddot{x}_j = -k(x_j - x_{j-1}) + k(x_{j+1} - x_j) = k(x_{j+1} + x_{j-1} - 2x_j)$$

Uporabimo omenjeni nastavek za x_j , krajšamo skupni faktor A , pa tudi časovni del eksponentne funkcije in dobimo:

$$-m\omega^2 \exp[-iq(j-1)a] = k\{\exp[-iqja] + \exp[-iq(j-2)a] - 2\exp[-iq(j-1)a]\}$$

Krajšamo pa lahko tudi $\exp[-iq(j-1)a]$, enačbo pa delimo še z $-m$:

$$\omega^2 = -\frac{k}{m}\{\exp[-iqa] + \exp[iqa] - 2\}$$

ali

$$\omega^2 = \frac{2k}{m}\{1 - \cos[qa]\} = \frac{4k}{m}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

Ta problem je v matematičnem smislu drugačen kot problem nihanja molekule CO_2 . Zdaj izrazimo krožno frekvenco kot funkcijo valovnega števila q :

$$\omega = 2\sqrt{\frac{k}{m}}\sin\left(\frac{qa}{2}\right) = 2\omega_0\sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

Uporabili smo krožno frekvenco enostavnega vzmetnega nihala: $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$. Fazna hitrost valovanja je:

$$c = \frac{\omega}{q} = \frac{2\omega_0}{q} \cdot \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

Grupna (skupinska) hitrost je:

$$c_g = \frac{d\omega}{dq} = \omega_0 a \cdot \cos\left(\frac{qa}{2}\right)$$

V primeru dolgih valov ali majhnega valovnega vektorja $q = 2\pi/\lambda$ velja $qa/2 \ll 1$ in se fazna in grupna hitrost ujemata (ni disperzije):

$$c = c_g \approx \omega_0 a$$

Kako bi to izrazili še drugače, z makroskopskimi parametri snovi, namesto s tremi mikroskopskimi parametri m , k in a (m = masa atoma, k = medatomska vez, podana kot konstanta vzmeti, a = ravnovesna razdalja med sosednjima atomoma)? Povedano drugače: kako bi se vrnil k zvezni, makroskopski sliki valovanja v snovi, s katero smo reševanje problema pravzaprav začeli? Namesto vzmeti si mislimo kar ravno tanko palico s prerezom S in dolžino a . Youngov modul palice je E , Hookov zakon zanjo pa je: $F = kx = ESx/a$. Temu ustreza konstanta vzmeti $k = ES/a$. Namesto da bi bila masa m zbrana v kroglicah (atomih) med vzmetmi, je enakomerno porazdeljena kar po tanki palici, ki hkrati deluje kot vzmet: $m = \rho V = \rho Sa$. Zložimo vse skupaj za dolge valove:

$$c = \omega_0 a = \sqrt{\frac{k}{m}} \cdot a = \sqrt{\frac{ES/a}{\rho Sa}} \cdot a = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

To je hitrost zvoka v trdni snovi. ♠

Med sisteme sklopljenih diferencialnih enačb spadajo tudi vektorske diferencialne enačbe, kjer je več komponent vektorja odvisnih od neke neodvisne spremenljivke, hkrati pa se te komponente v enačbah prepletajo. V naslednjih dveh zgledih obravnavamo gibanje v dveh dimenzijah.

♥ Računski zgled 4.6

V koordinatnem sistemu (x, y) teče reka s konstantno hitrostjo $\mathbf{c} = (0, c)$ vzporedno z osjo y , njena bregova pa sta pri $x = 0$ in $x = a$ (a = širina reke). Človek v čolnu začne svoje gibanje po reki v začetni točki na desnem bregu, na osi x : $T_0(a, 0)$, njegov cilj pa je priti do levega brega (kjerkoli na osi y). Vendar pa je njegovo gibanje posebno: čoln namreč usmerja tako, da je vedno obrnjen proti izhodišču koordinatnega sistema, njegova relativna hitrost glede na rečni tok pa je konstantna in enaka v_0 . Kje in pri katerih pogojih bo pristal ob levem bregu?

Najprej izrazimo komponenti relativne hitrosti čolna glede na rečni tok. Ker je čoln vedno obrnjen proti izhodišču, kjer koli se nahaja, sta obe komponenti negativni: $v_{rx} = -v_0 \cos \varphi$, $v_{ry} = -v_0 \sin \varphi$. Pri tem je φ azimut, katerega kotni funkciji lahko izrazimo s koordinatama točke, kjer se nahaja čoln, zato velja:

$$v_{rx} = -v_0 \cdot \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

$$v_{ry} = -v_0 \cdot \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

Resnični vektor hitrosti čolna glede na mirujoča bregova je vsota hitrosti rečnega toka in relativne hitrosti čolna glede na tok:

$$v_x = \frac{dx}{dt} = -v_0 \cdot \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

$$v_y = \frac{dy}{dt} = c - v_0 \cdot \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

To je sklopljen sistem dveh diferencialnih enačb prvega reda. Najlaže ga rešimo tako, da enačbi delimo med seboj:

$$\frac{v_y}{v_x} = \frac{dy}{dx} = y' = \frac{v_0 y - c\sqrt{x^2 + y^2}}{v_0 x}$$

Problem sistema dveh diferencialnih enačb nam je tako uspelo pretvoriti v precej lažji problem NDE za funkcijo $y(x)$. Imamo pa v matematičnem smislu še nekaj novega – homogeno diferencialno enačbo: obe spremenljivki se pojavita tako v števcu kot imenovalcu v enaki (prvi) potenci. Takšne enačbe rešujemo v splošnem z nastavkom $y(x) = x \cdot u(x)$, kjer iščemo novo funkcijo $u(x)$. Najprej izrazimo odvod odvisne spremenljivke y z novo funkcijo: $y'(x) = u(x) + xu'(x)$. Vstavimo to v zgornjo enačbo brez pisanja argumenta x pri odvisni spremenljivki:

$$u + xu' = \frac{v_0 xu - c\sqrt{x^2 + (xu)^2}}{v_0 x}$$

Enačba se poenostavi v

$$xu' = -\frac{c}{v_0} \sqrt{1 + u^2}$$

Pišimo $u' = du/dx$ in ločimo spremenljivki, pa še integrirajmo:

$$\int_0^u \frac{du}{\sqrt{1 + u^2}} = -\frac{c}{v_0} \int_a^x \frac{dx}{x}$$

V začetni točki je namreč $x = a, y = 0 \rightarrow u = 0$. Integrirajmo do konca:

$$\ln\left(u + \sqrt{1 + u^2}\right) \Big|_0^u = -\frac{c}{v_0} \ln x \Big|_a^x$$

$$\ln\left(u + \sqrt{1+u^2}\right) = -\frac{c}{v_0} \ln \frac{x}{a}$$

$$u + \sqrt{1+u^2} = \left(\frac{x}{a}\right)^{-c/v_0}$$

$$\frac{y}{x} + \sqrt{1+(y/x)^2} = \left(\frac{x}{a}\right)^{-c/v_0}$$

$$y + \sqrt{x^2 + y^2} = a^{c/v_0} x^{1-c/v_0}$$

Nismo sicer dobili popolnega opisa gibanja, torej funkcij $x(t)$ in $y(t)$, temveč le implicitno podan tir gibanja $y(x)$, kar pa nam zadostuje. Izračunajmo limito desne strani enačbe v primeru $x \rightarrow 0$. Limita je odvisna od eksponenta $1 - c/v_0$. V primeru $v_0 > c$ (čoln je hitrejši od rečnega toka) je ta eksponent pozitiven in limita je nič, torej tudi $y = 0$ na levi strani enačbe; čoln pristane v izhodišču koordinatnega sistema. V mejnem primeru, $v_0 = c$, je limita na desni strani enačbe enaka a , zato mora za y veljati $y = a/2$. V primeru $v_0 < c$ (čoln je počasnejši od rečnega toka) je eksponent negativen in limita je neskončna, torej tudi $y = \infty$ na levi strani enačbe; človeku s čolnom ne uspe doseči levega brega reke. Na sliki 24 so prikazani grafi tirov gibanja v brezdimenzijski obliki ($a = 1$) pri petih različnih razmerjih c/v_0 . Pri računanju točk za grafe si pomagamo s parametričnim zapisom koordinat x in y , za parameter pa uporabimo kar zgoraj definirano spremenljivko u :

$$u + \sqrt{1+u^2} = \left(\frac{x}{a}\right)^{-c/v_0}$$

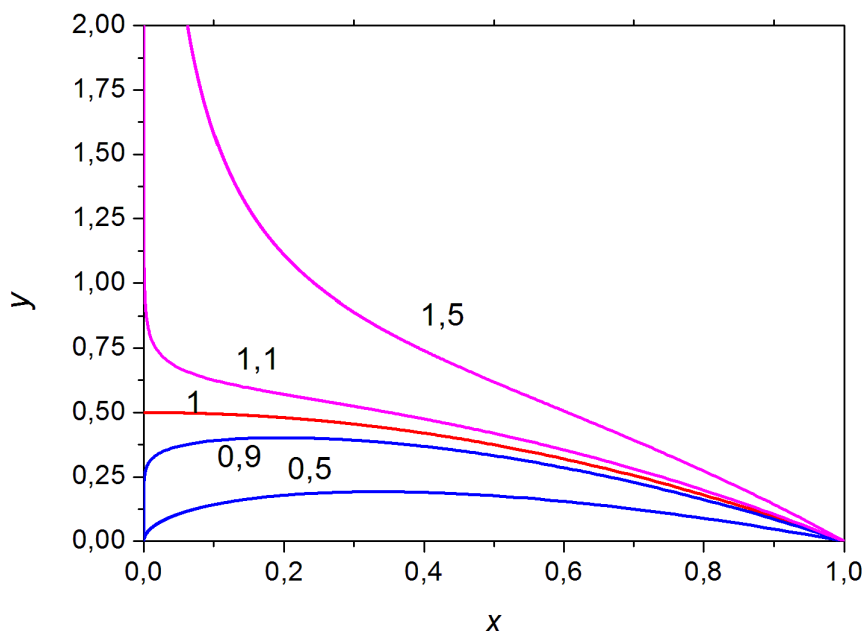
iz česar izhajata enačbi za koordinati:

$$x = a \cdot \left(u + \sqrt{1+u^2}\right)^{-v_0/c}$$

$$y = ux = au \cdot \left(u + \sqrt{1+u^2}\right)^{-v_0/c}$$

Ker ni zveznega prehoda, kje bo čoln pristal, ko spreminjamo razmerje c/v_0 , temveč so samo opisane tri možnosti, je vedenje funkcij $y(x)$ za $c/v_0 \approx 1$ (z izjemo funkcije z natančnim razmerjem 1, mejni primer, rdeča črta na sliki) v bližini $x = 0$ precej nenavadno in divje: grafi se zelo ukrivijo (skoraj prelomijo), in sicer proti izhodišču ali pa proti neskončni vrednosti za y . Že funkciji za $c/v_0 = 0,9$ in $1,1$ na sliki sta močno ukrivljeni (pogled morda zavaja, a npr. funkcija za $c/v_0 = 0,9$ močno »zavije« proti izhodišču in čoln ne pristane npr. pri $y = 0,25$, kot se zdi).

V primeru $v_0 < c$ mora človek izbrati preprostejšo strategijo, npr. da je čoln ves čas usmerjen pravokotno na smer toka reka (opis gibanja je tedaj zelo preprost). Tako bo dosegel levi breg v najkrajšem mogočem času, res pa ga bo tok odnesel nekam na os y , proč od izhodišča.



Slika 24: Tiri gibanja $y(x)$ za različne vrednosti c/v_0 ♠

♥ Računski zgled 4.7

V kemijski reakciji snovi A in B reagirata v snovi C in D, kar zapišemo kot $A + B \rightarrow C + D$. To hkrati pomeni, da iz enega mola snovi A in enega mola snovi B nastane po en mol snovi C in D. Število molov kemijskih komponent označimo z enakimi črkami, le da so nagnjene: A, B, C in D. Zanima nas časovna odvisnost teh količin (dinamika sistema). Dinamiko opišemo s preprostim sistemom navadnih diferencialnih enačb prvega reda:

$$\dot{A} = \dot{B} = -k_1 AB + k_2 CD$$

$$\dot{C} = \dot{D} = -\dot{A}$$

Enakost absolutnih vrednosti časovnih odvodov vseh količin je posledica tega, ker vse snovi vstopajo ali izstopajo iz reakcije npr. s po enim molom. Rešite ta sistem v splošnem, posebej pa v primeru $A(0) = B(0) = A_0$, $C(0) = D(0) = 0$.

Ker so vsi odvodi enaki ali nasprotno enaki, se ustrezne količine razlikujejo samo za konstantni člen. Tako lahko zapišemo: $B = A + c_1$, $C = -A + c_2$, $D = -A + c_3$. Konstante c_1 , c_2 in c_3 so odvisne od začetnih pogojev, pri reševanju problema pa bomo prišli še do ene konstante. Namesto 4 enačb imamo torej samo eno enačbo za neznanke A:

$$\dot{A} = \frac{dA}{dt} = -k_1 A(A + c_1) + k_2 (-A + c_2)(-A + c_3)$$

To je enačba z ločljivima spremenljivkama A in t, ki ju hitro ločimo in enačbo že integriramo:

$$\int \frac{dA}{aA^2 + bA + c} = t + c_4$$

Na desni strani smo takoj integrirali po času in dodali še četrto konstanto. Koeficienti kvadratne funkcije v imenovalcu pod integralom na levi strani enačbe pa so: $a = k_2 - k_1$, $b = -k_1c_1 - k_2(c_2 + c_3)$, $c = k_2c_2c_3$. Rešitev integrala je odvisna od predznaka diskriminante $D = b^2 - 4ac$. Izkaže se, da je v primeru $D < 0$ rešitev nesmiselna, saj bi pri integriranju dobili arkus tangens, oziroma po obratu bi bila spremenljivka A povezana s tangensom časa, torej periodična v času in v diskretnih časih celo neskončna. Smiselna je torej samo rešitev pri pozitivni diskriminanti, ko lahko imenovalac razcepimo in pridemo da logaritmskih rešitev. Rešitev za $D > 0$ je torej:

$$\frac{1}{\sqrt{D}} \ln \frac{2aA + b - \sqrt{D}}{2aA + b + \sqrt{D}} = t + c_4$$

Enačbo lahko obrnemo:

$$A = \frac{1}{2a} \left[-b + \sqrt{D} \cdot \coth \left(\frac{\sqrt{D}}{2} (t + c_4) \right) \right]$$

Bodimo za zdaj še splošni in zapišimo $A(0) = A_0$, $B(0) = B_0$, $C(0) = C_0$, $D(0) = D_0$. Konstanto c_4 takoj izračunamo iz prejšnjega izraza, če vstavimo $t = 0$ in $A = A_0$. Vendar moramo še prej upoštevati $c_1 = B_0 - A_0$, $c_2 = C_0 + A_0$ in $c_3 = D_0 + A_0$. Od teh parametrov sta namreč odvisna tudi b in D . Šele potem izrazimo c_4 :

$$c_4 = \frac{1}{\sqrt{D}} \ln \frac{2aA_0 + b - \sqrt{D}}{2aA_0 + b + \sqrt{D}}$$

Obravnavajmo zdaj poseben zgled: $A(0) = B(0) = A_0$, $C(0) = D(0) = 0$. Tedaj velja: $c_1 = 0$, $c_2 = c_3 = A_0$. Tedaj so parametri: $a = k_2 - k_1$, $b = -2k_2A_0$, $c = k_2A_0^2$, $D = 4k_1k_2A_0^2$. ♠

♥ Računski zgled 4.8

V najenostavnejšem modelu (Lotka in Volterra) interakcije med populacijama dveh različnih živalskih vrst (naj bodo to jeleni kot plen in volkovi kot plenilci) ne upoštevamo drugih naravnih omejitev, kot je npr. omejena zaloga hrane za jelene. Model dobro drži, če jelenov v nekem okolju ni preveč. Trenutno število jelenov naj bo J , volkov pa V . Ustrezni diferencialni enačbi prvega reda za časovni odvisnosti J in V sta:

$$\dot{J} = k_1J - k_{12}JV$$

$$\dot{V} = -k_2V + k_{21}JV$$

Enačbi sta nelinearni in model nekoliko spominja na prejšnji zgled za kemijsko reakcijo. Konstante k_1 , k_2 , k_{12} in k_{21} so pozitivne. Prvi člen na desni strani enačbe za odvod dJ/dt torej pomeni, da bi populacija jelenov brez volkov naraščala eksponentno, medtem ko ustrezni negativni člen $-k_{12}JV$ pri volkovih pomeni, da volkovi brez jelenov eksponentno hitro izumrejo. Člena s konstantama k_{12} in k_{21} se pojavita, ker volkovi plenijo jelene. Poiščite neničelno stacionarno rešitev zgornjega sistema enačb. Potem predvidite majhna odmika obeh populacij od stacionarnih vrednosti, enačbi linearizirajte in rešite v splošnem. Ugotovite funkcijsko obliko diagrama $V(J)$.

Stacionarno rešitev dobimo, če postavimo oba časovna odvoda na vrednost 0. Stacionarni vrednosti označimo z zvezdico. V prvi enačbi krajšamo J in dobimo za volkove: $V^* = k_1/k_{12}$. V drugi enačbi krajšamo V in dobimo za jelene: $J^* = k_2/k_{21}$. Namesto s spremenljivkama J in V v splošnem zdaj raje računamo z obema odmikom, x in y , kjer velja: $J = J^* + x$, $V = V^* + y$. Predpostavimo $x \ll J^*$ in $y \ll V^*$. Vstavimo to v diferencialni enačbi:

$$\dot{x} = k_1(J^* + x) - k_{12}(J^* + x)(V^* + y)$$

$$\dot{y} = -k_2(V^* + y) + k_{21}(J^* + x)(V^* + y)$$

Pri odvodih na levi strani enačb smo upoštevali, da sta J^* in V^* konstanti, s časom pa se spreminjata x in y . Zmnožimo vse na desni strani enačb. Zanemarimo lahko člen s produktom xy , ki je najmanjši. Upoštevamo še da se v prvi enačbi izničita člena k_1J^* in $-k_{12}J^*V^*$, v drugi enačbi pa člena $-k_2V^*$ in $k_{21}J^*V^*$, saj je ravno to pogoj za stacionarnost rešitve z J^* in V^* , ki smo jo že upoštevali zgoraj. Pri členih, ki nam potem ostanejo, upoštevamo še zvezi $V^* = k_1/k_{12}$ in $J^* = k_2/k_{21}$. Tako nazadnje dobimo kar enostaven sistem enačb, ki ga zapišemo v matrični obliki:

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{k_{12}}{k_{21}} \cdot k_2 \\ \frac{k_{21}}{k_{12}} \cdot k_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Lastni vrednosti matrike sistema povesta, kako se vede sistem pri različnih začetnih pogojih. Če bi bili obe lastni vrednosti negativni, potem bi bili $V^* = k_1/k_{12}$ in $J^* = k_2/k_{21}$, stabilni (atraktor), to je, ne glede na začetna odmika x_0 in y_0 . damo da sta dovolj majhna, bi s časom konvergirala proti 0. V našem primeru pa ni taka, saj se lahko bralec hitro prepriča, da sta lastni vrednosti imaginarni. Gre torej za dinamično ravnovesje: vrednosti x in y nihata okrog vrednosti 0. Zato je smiselno poskusiti s kotnima funkcijama: $x = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$, $y = C \cos(\omega t) + D \sin(\omega t)$. Zavedati se moramo, da niso neznanke samo delne amplitude A , B , C in D , temveč tudi krožna frekvenca ω . Bralec naj sam vstavi ta nastavek v zgornji sistem enačb v matričnem zapisu, izenači posebej koeficiente pri kosinusu in sinusu, pa bo dobil tele 4 enačbe: 1) $\omega A = (k_{12}k_2/k_{21})D$, 2) $\omega B = -(k_{12}k_2/k_{21})C$, 3) $-\omega C = (k_{21}k_1/k_{12})B$, 4) $\omega D = (k_{21}k_1/k_{12})A$. Delimo npr. prvo enačbo s četrto, pa takoj odpravimo neznanke A in D in izračunamo krožno frekvenco: $\omega^2 = k_1k_2$. Enak rezultat bi dobili s kombiniranjem druge in tretje enačbe. Nazadnje eksplicitno izrazimo še zvezo med A in D ter zvezo med B in C : $D = (k_1/k_2)^{1/2}(k_{21}/k_{12})A$ in $C = -(k_2/k_1)^{1/2}(k_{12}/k_{21})B$. Za dve konstanti (izbrali smo A in B) moramo v splošnem pustiti poljubni vrednosti, saj potrebujemo za rešitev problema še dva začetna pogoja (npr. vrednosti x in y v času $t = 0$). Zapišimo celotno rešitev za majhne odmike x in y , to je majhni amplitudi A in B :

$$J = \frac{k_2}{k_{21}} + A \cos(\sqrt{k_1k_2} \cdot t) + B \sin(\sqrt{k_1k_2} \cdot t)$$

$$V = \frac{k_1}{k_{12}} - \sqrt{\frac{k_2}{k_1}} \cdot \frac{k_{12}}{k_{21}} B \cos(\sqrt{k_1k_2} \cdot t) + \sqrt{\frac{k_1}{k_2}} \cdot \frac{k_{21}}{k_{12}} A \sin(\sqrt{k_1k_2} \cdot t)$$

Če eliminiramo čas, dobimo enačbo elipse za funkcijo $V(J)$. Najlepše to ugotovimo, če izberemo $B = 0$. S tem ne izgubimo pri splošnosti, saj lahko to dosežemo s primerno izbiro trenutka $t = 0$. Prepišimo poenostavljeni enačbi za premika x in y :

$$x = A \cos(\sqrt{k_1 k_2} \cdot t)$$

$$y = \sqrt{\frac{k_1}{k_2}} \cdot \frac{k_{21}}{k_{12}} A \sin(\sqrt{k_1 k_2} \cdot t)$$

Po eliminaciji časa res dobimo: $x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$, kjer sta polosi $a = A$ in $b = (k_1/k_2)^{1/2}(k_{21}/k_{12})A$. Še več, poznamo obhodni čas za kroženje fazne točke po tej elipsi: $t_0 = 2\pi/\omega = 2\pi/(k_1 k_2)^{1/2}$. Kroženje je v pozitivni smeri – nasprotno od urinega kazalca. ♠

♥ Računski zgled 4.9

To je problem sklopljenega sistema parcialnih diferencialnih enačb. V resonatorju, to je v kovinski škatli z robovi a , b in c , je stojno elektromagnetno valovanje (EMV). Valovni enačbi za obe polji (jakost električnega in gostota magnetnega polja) sta:

$$\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial t^2} = c^2 \cdot \nabla^2 \bar{E}$$

$$\frac{\partial^2 \bar{B}}{\partial t^2} = c^2 \cdot \nabla^2 \bar{B}$$

Zapišite najprej splošno rešitev za obe polji. Potem upoštevajte robne pogoje za električno polje: ob kovinski steni je od nič različna le njegova komponenta, ki je pravokotna na steno. Upoštevajte še Maxwellove enačbe, da povežete med seboj vse komponente obeh polj. Zaradi praktičnosti izberite kartezični koordinatni sistem tako, da ležijo koordinate točk znotraj resonatorja v območju $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, $0 \leq z \leq c$.

Podrobneje analizirajmo le funkcijski razcep komponente E_x celotnega EMV, saj je račun za druge komponente analogen: $E_x = X(x)Y(y)Z(z)T(t)$. Iščemo vse štiri funkcije neodvisnih spremenljiv in ustrezen PDE je:

$$XYZ\ddot{T} = c^2 \cdot (X''YZ + XY''Z + XYZ'')$$

Njena splošna rešitev je preprosta:

$$X = A \cos(k_x x) + B \sin(k_x x)$$

$$Y = C \cos(k_y y) + D \sin(k_y y)$$

$$Z = E \cos(k_z z) + F \sin(k_z z)$$

$$T = G \cos(\omega t) + H \sin(\omega t)$$

kjer velja značilna zveza med krožno frekvenco in valovnim vektorjem: $\omega^2 = c^2 k^2 = c^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$. Pravzaprav bi lahko že takoj na začetku za najsplošnejšo rešitev uporabili manj prostih konstant, ko smo jih zapisali. Ampak s tem se nam ni treba ukvarjati, ker lahko splošni nabor rešitev takoj skrčimo. Prvič, konstanti G in H v časovnem delu funkcije sta določeni z začetnimi pogoji. V fizikalnem smislu

ne izgubimo ničesar pri splošnosti, če izberemo $G = 0$, $H = 1$. Dalje, robni pogoji (pravokotnost električnega polja na mejne ploskve) zahtevajo za komponento E_x enačbe: $E_x(y = 0) = E_x(y = b) = E_x(z = 0) = E_x(z = c) = 0$. V vsakem od teh skrajšanih zapisov sta drugi dve kartezični koordinati poljubni, ker gre za celotno ploskev. To pa najprej pomeni: $C = E = 0$. Druga dva pogoja sta: $k_y b = n_1 \pi$, $k_z c = n_2 \pi$, kjer sta n_1 in n_2 poljubni naravni števili (nič ne pridobimo pri splošnosti, če gledamo vsa cela števila). Rešitev za vse tri komponente jakosti električnega polja lahko zdaj zapišemo takole:

$$E_x = [A_x \cos(k_x x) + B_x \sin(k_x x)] \sin\left(\frac{n_1 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

$$E_y = \sin\left(\frac{n_3 \pi x}{a}\right) [A_y \cos(k_y y) + B_y \sin(k_y y)] \sin\left(\frac{n_4 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

$$E_z = \sin\left(\frac{n_5 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_6 \pi y}{b}\right) [A_z \cos(k_z z) + B_z \sin(k_z z)] \sin(\omega t)$$

Vendar pa gre seveda pri vseh treh komponentah polja za isti valovni vektor $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, sicer vektorske enačbe za električno poljsko jakost ne moremo zadovoljiti. Zaradi večje urejenosti preimenujemo števila n_1 , n_2 in n_3 in enačbe prepisemo:

$$E_x = \left[A_x \cos\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) + B_x \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \right] \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

$$E_y = \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \left[A_y \cos\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) + B_y \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \right] \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

$$E_z = \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \left[A_z \cos\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) + B_z \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) \right] \sin(\omega t)$$

V splošnem so v oglatih oklepajih dovoljeni kosinusni in sinusni členi. Da poenostavimo nadaljnjo obravnavo, obdržimo le kosinusne člene, konstante pri teh členih pa preimenujemo:

$$E_x = E_{x0} \cos\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

$$E_y = E_{y0} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

$$E_z = E_{z0} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \cos\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) \sin(\omega t)$$

Vendar pa mora biti divergenca jakosti električnega polja enaka nič, saj v vakuumu v resonatorju ni električnih nabojev. Iz te enakosti izhaja enačba:

$$\frac{n_1\pi}{a} E_{x0} + \frac{n_2\pi}{b} E_{y0} + \frac{n_3\pi}{c} E_{z0} = 0$$

tako da je ena od treh komponent vektorske amplitude polja, E_{x0} , E_{y0} ali E_{z0} , določena z drugima dvema. Da izračunamo gostoto magnetnega polja, nam ni treba začeti z diferencialno enačbo zgoraj, temveč si pomagamo z Maxwellovo enačbo:

$$\nabla \times \vec{E} = \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

Če pri časovnem delu funkcij za komponente gostote magnetnega polja namesto sinusne funkcije vzamemo kosinusno in izvedemo operator rotorja nad komponentami električne poljske jakosti, dobimo izraze:

$$B_x = B_{x0} \sin\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right) \cos\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right) \cos(\omega t)$$

$$B_y = B_{y0} \cos\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right) \cos\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right) \cos(\omega t)$$

$$B_z = B_{z0} \cos\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right) \cos(\omega t)$$

kjer so komponente vektorske amplitude gostote magnetnega polja enake: $B_{x0} = (n_3\pi E_{y0}/c - n_2\pi E_{z0}/b)/\omega$, $B_{y0} = (n_1\pi E_{z0}/a - n_3\pi E_{x0}/c)/\omega$ in $B_{z0} = (n_2\pi E_{x0}/b - n_1\pi E_{y0}/a)/\omega$. Enostavno se da preveriti, da sta si vektorski amplitudi $\mathbf{E}_0 = (E_{x0}, E_{y0}, E_{z0})$ in $\mathbf{B}_0 = (B_{x0}, B_{y0}, B_{z0})$ med seboj pravokotni. Z malo več računanja, z upoštevanjem zgornje enačbe, da je divergenca jakosti električnega polja enaka nič, pa se da dokazati tudi zvezo med velikostma polj: $B_0 = E_0/c$. Glede zadnjih dveh lastnosti se stojni EMV v resonatorju ujema s potujočim EMV. Razlika med njima pa je, da v resonatorju glede časovnega dela električno in magnetno polju v izbrani točki nista v isti fazi. ♠

VARIACIJSKI RAČUN

Variacijski račun v splošnem

V najenostavnejšem primeru variacijskega računa je naloga poiskati funkcijo $y(x)$, tako da doseže ekstrem (minimum ali maksimum) naslednji integral [12, 18, 23]:

$$I = \int f(x, y(x), y'(x)) dx \quad (5.1)$$

Pri tem je funkcija f pod integralom dana funkcija treh spremenljivk: neodvisne, odvisne in odvoda odvisne spremenljivke po neodvisni. Čeprav smo zapisali nedoločeni integral, gre v značilnih fizikalnih nalogah največkrat za določeni integral, ni pa nujno, da sta integracijski meji znani vnaprej. Integral (5.1) ima ekstremno vrednost glede na vse mogoče, navadno gladke, funkcije, če velja za funkcijo $y(x)$ naslednja enačba:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) = \frac{\partial f}{\partial y} \quad (5.2)$$

Imenujemo jo Euler-Lagrangeeva enačba (ELE). Razen v izjemnih primerih, kot bomo spoznali v nadaljevanju, je to enačba drugega reda, saj pridemo do drugega odvoda $y''(x)$ pri odvajanju odvoda $y'(x)$ po spremenljivki x na levi strani enačbe. Pri parcialnih odvodih $\partial f / \partial y$ in $\partial f / \partial y'$ moramo na funkciji y in y' najprej gledati kot na neodvisni spremenljivki in šele pri popolnem dovodu d/dx upoštevamo njuno odvisnost od neodvisne spremenljivke.

Preidimo k večdimenzionalnemu problemu. Vzemimo, da je naša naloga izračunati funkcijo dveh spremenljivk $z(x, y)$, tako da dosežemo ekstrem dvojnega integrala:

$$I = \iint f(x, y, z(x, y), \partial z(x, y) / \partial x, \partial z(x, y) / \partial y) dx dy \quad (5.3)$$

Zdaj je funkcija f pod integralom dana funkcija petih spremenljivk. Ustrezni ELE za funkcijo $z(x, y)$ je PDE v splošnem drugega reda:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial z / \partial x)} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial z / \partial y)} \right) = \frac{\partial f}{\partial z} \quad (5.4)$$

Enačbe lahko posplošimo na probleme s funkcijo več kot dveh spremenljivk.

Druga mogoča posplošitev naloge v zvezi z integralom (5.1) pa je, da je funkcija f odvisna od več odvisnih spremenljivk, neodvisna pa je ena sama. Na primer iščemo neznani funkciji $y_1(x)$ in $y_2(x)$, tako da doseže ekstrem naslednji integral:

$$I = \int f(x, y_1(x), y_1(x), y_1'(x), y_2'(x)) dx \quad (5.5)$$

V tem primeru rešujemo namesto enega ELE sklopljen sistem dveh takšnih enačb:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y_1'} \right) = \frac{\partial f}{\partial y_1} \quad (5.6 \text{ a})$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y_2'} \right) = \frac{\partial f}{\partial y_2} \quad (5.6 \text{ b})$$

Podobno velja, če imamo več kot dve odvisni spremenljivki.

Seveda pa v fiziki niso izjemni primeri kombinirane posplošitve, kjer je več neodvisnih in prav tako več odvisnih spremenljivk. Tedaj moramo reševati sklopljen sistem PDE. Na primer, tri neodvisne spremenljivke so kartezične koordinate x , y in z , sklopljenih šest funkcij pa so komponente dveh vektorskih polj $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ in $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, kjer je krajevni vektor $\mathbf{r} = (x, y, z)$, polji pa sta jakost električnega in gostota magnetnega polja. To je takrat, ko geometrija fizikalnega sistema nima kake posebne simetrije in zato ne moremo skržiti števila neodvisnih in odvisnih spremenljivk.

Obravnavajmo še poseben zgled robnih pogojev v eni dimenziji v zvezi z integralom (5.1). Vzemimo integracijski interval z mejama $x = a$ in $x = b$. Če sta vrednosti iskane funkcije $y(x)$ v mejnih točkah, to je $y(a)$ in $y(b)$, predpisani vnaprej, potem pri reševanju enačbe (5.2) ni nič posebnega. Najprej rešimo NDE drugega reda v splošnem in dobimo še dve nedoločeni konstanti, ki ju izračunamo kasneje z upoštevanjem obeh robnih pogojev. V fiziki pa so pogosti tudi primeri, ko minimiziramo prosto energijo F , ki poleg integrala (5.1) vsebuje še znani funkciji vrednosti odvisne spremenljivke v obeh mejnih točkah:

$$F = \int_a^b f(x, y(x), y'(x)) dx + g_1(y(a)) + g_2(y(b)) \quad (5.7)$$

V tem primeru se izkaže, da ELE v notranjosti intervala ostane enak kot prej, (5.2), le robni enačbi sta nekoliko bolj zapleteni. Izpeljimo ju, saj je to hkrati prikaz izpeljave enačbe (5.2). Osnova izpeljave je variacija proste energije F : namesto funkcije $y(x)$, ki jo minimizira, vstavimo v izraz (5.7) nekoliko spremenjeno funkcijo $y(x) + h(x)$, kjer si mislimo, da so vrednosti prištete funkcije $h(x)$ v vseh točkah majhne. Nova vrednost proste energije F je:

$$F_1 = \int_a^b f(x, y(x) + h(x), y'(x) + h'(x)) dx + g_1(y(a) + h(a)) + g_2(y(b) + h(b))$$

Zaradi spremenjenih vrednosti spremenljivk funkcij f , g_1 in g_2 uporabimo posplošeni Taylorjev razvoj do linearnega člena:

$$f(x, y + h, y' + h') \approx f(x, y, y') + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot h + \frac{\partial f}{\partial y'} \cdot h'$$

$$g_1(y(a) + h(a)) = g_1(y(a)) + \frac{\partial g_1}{\partial y}(a) \cdot h(a)$$

$$g_2(y(b) + h(b)) = g_1(y(b)) + \frac{\partial g_1}{\partial y}(b) \cdot h(b)$$

Vstavimo vse tri razvoje v izraz za F_1 in ugotovimo, da se prvi členi ravno seštejejo v ekstremno vrednost F za funkcijo $y(x)$. Če torej zapišemo »variacijo« (majhno spremembo) proste energije δF kot razliko $F_1 - F$, dobimo izraz:

$$\delta F = \int_a^b \left[\frac{\partial f}{\partial y} h + \frac{\partial f}{\partial y'} h' \right] dx + \frac{\partial g_1}{\partial y}(a) h(a) + \frac{\partial g_2}{\partial y}(b) h(b)$$

Da pisava ni bila predolga, pri integralu nismo poudarili eksplicitne odvisnosti od neodvisne spremenljivke x , pri drugih dveh členih pa smo pokazali, da se računata v točkah a in b . Pri drugem členu v integralu uporabimo metodo per partes:

$$\delta F = \int_a^b \left[\frac{\partial f}{\partial y} h - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) h \right] dx + \left[\left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) h \right]_a^b + \frac{\partial g_1}{\partial y}(a) h(a) + \frac{\partial g_2}{\partial y}(b) h(b)$$

Sklepajmo naprej na kratko. Če gre za ekstrem F , potem je znano, da je variacija δF v limiti »majhnih« h enaka nič, pri čemer pa je h poljubna funkcija. Prvi člen z integralom mora biti sam enak nič; ker lahko v integralu h izpostavimo in je h poljuben, je edina možnost: $\partial f / \partial y - d/dx(\partial f / \partial y') = 0$, in to je enačba (5.2). Ostanajo le še 4 členi v robnih točkah, ki jih razvrstimo drugače:

$$\left[\frac{\partial g_1}{\partial y}(a) - \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right)(a) \right] h(a) + \left[\frac{\partial g_2}{\partial y}(b) + \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right)(b) \right] h(b)$$

Ker lahko vrednosti funkcij variiramo pri $x = a$ in pri $x = b$ neodvisno pri poljubnem h , morata veljati robni enačbi:

$$\left[\frac{\partial g_1}{\partial y} - \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right](a) = 0 \tag{5.8 a}$$

$$\left[\frac{\partial g_2}{\partial y} + \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right](b) = 0 \tag{5.8 b}$$

♥ Računski zgled 5.1

Svetlobni žarek gre v ravnini (x, y) skozi plast snovi, v kateri se lomni količnik n spreminja le v smeri osi x . Z načelom najkrajšega časa potovanja žarka med točkama $T_1(x_1, y_1)$ in $T_2(x_2, y_2)$ pokažite, da velja lomni zakon.

Svetlobna hitrost v optičnem sredstvu je določena z lomnim količnikom, $c = c_0/n(x)$, kjer je c_0 svetlobna hitrost v vakuumu. Čas potovanja žarka je:

$$t = \int \frac{ds}{c} = \int \frac{nds}{c_0} = \int \frac{n\sqrt{(dx)^2 + (dy)^2}}{c_0}$$

Z integracijskima mejama se tu še nismo ukvarjali. Diferenciala dx in dy povežimo z odvodom funkcije $y(x)$: $dy = y' dx$, nato pa zapišimo integral tako, da je razvidna integracijska spremenljivka x :

$$t = \int_{x_1}^{x_2} \frac{n(x) \sqrt{1 + (y')^2}}{c_0} dx$$

Sedaj minimiziramo ta integral, ki ga lahko pišemo brez c_0 :

$$I = \int_{x_1}^{x_2} n(x) \sqrt{1 + (y'(x))^2} dx$$

V splošnem minimizacija integrala vodi do ELE drugega reda (5.2). Ker pa v našem primeru funkcija f ne vsebuje eksplicitno spremenljivke y , se enačba poenostavi v enačbo prvega reda:

$$\frac{\partial f}{\partial y'} = C$$

V našem primeru je ta enačba:

$$n(x) \cdot \frac{y'(x)}{\sqrt{1 + (y'(x))^2}} = C$$

Označimo $y' = \tan \varphi$, kjer je φ naklonski kot tangente proti vodoravnici:

$$n(x) \cdot \frac{\tan \varphi}{\sqrt{1 + \tan^2 \varphi}} = C$$

$$n(x) \cdot \sin \varphi = C$$

To je lomni zakon v obliki, kot smo jo zapisali pri zvezno spreminjajočem se lomnem količniku po debelini plasti. ♠

♥ Računski zgled 5.2

Dokažite, da ima od vseh konveksnih likov z vnaprej danim obsegom največjo ploščino prav krog.

To je težja naloga iz dveh razlogov: 1) enačbo meje lika v ravnini moramo namesto s kartezičnima koordinatama zapisati parametrično, da pravilno opišemo sklenjeno krivuljo, b) gre za vezani ekstrem, ker je obseg konstanten.

Najuporabnejši je polarni zapis $r = r(\varphi)$ z navadnim pomenom: $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$. Naša naloga je torej poiskati funkcijo $r(\varphi)$; natančneje: dokazati, da je konstantna. Ploščinski element v polarnem zapisu je $dS = \rho d\rho d\varphi$, kjer je $0 \leq \rho \leq r(\varphi)$. V geometrijskem smislu si ta element zamišljamo kot ozek lok, del zelo tankega kolobarja s polmerom ρ , debelino $d\rho$ in središčnim kotom $d\varphi$. Je pa dobra vaja, če izpeljemo ploščinski element analitično, kot se to naredi pri pretvorbi med dvema 2D koordinatnima sistemoma:

$$dS = \frac{\partial(x, y)}{\partial(\rho, \varphi)} \cdot d\rho d\varphi = \text{abs} \begin{pmatrix} \partial x / \partial \rho & \partial x / \partial \varphi \\ \partial y / \partial \rho & \partial y / \partial \varphi \end{pmatrix} \cdot d\rho d\varphi$$

$$dS = |\partial x / \partial \rho \cdot \partial y / \partial \varphi - \partial x / \partial \varphi \cdot \partial y / \partial \rho| \cdot d\rho d\varphi$$

Upoštevajmo $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, parcialno odvajajmo, vstavimo odvode v determinanto in res ugotovimo: $dS = \rho d\rho d\varphi$. Vendar pa lahko ta ploščinski element takoj integriramo po spremenljivki ρ in izračunamo $dS = r^2 d\varphi / 2$. Tudi ta ploščina ima jasen geometrijski pomen: to je ploščina ozkega enakokrakega trikotnika (krožni izsek je skoraj trikotnik) s stranico $ds = r d\varphi$ in višino r . S tem smo že nakazali, kako izračunamo ploščino lika:

$$S = \int dS = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} r^2(\varphi) d\varphi$$

Pri obsegu moramo biti previdni, saj izraz $ds = r d\varphi$ tu ni ustrezen. Pri ploščini ozkega lika (pa naj ga gledamo kot trikotnik ali krožni izsek) namreč oblika krivulje $r(\varphi)$ na robu lika ni pomembna, pri velikosti odseka ds pri računu obsega pa je ta oblika vsekakor odločilna. Pomagamo si z dosledno matematično izpeljavo:

$$ds = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} = \sqrt{\left(\frac{dx}{d\varphi}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\varphi}\right)^2} \cdot d\varphi$$

Pozor: tu spet uporabimo $x = r(\varphi) \cdot \cos \varphi$, $y = r(\varphi) \cdot \sin \varphi$. Rezultat je:

$$ds = \sqrt{(r')^2 + r^2} \cdot d\varphi$$

Šele zdaj lahko pravilno zapišemo obseg:

$$o = \int ds = \int_0^{2\pi} \sqrt{(r')^2 + r^2} \cdot d\varphi$$

Pri minimizaciji ploščine moramo upoštevati vnaprej določen obseg, tako da moramo formalno minimizirati količino $I = S - \lambda o$, kjer je λ primerna konstanta, ki se pri takšnih problemih določi kasneje. Minimiziramo torej integral:

$$I = \int_0^{2\pi} \left[\frac{1}{2} r^2 - \lambda \sqrt{(r')^2 + r^2} \right] \cdot d\varphi$$

Zdaj v funkciji pod integralom manjka eksplicitna odvisnost od neodvisne spremenljivke φ . Zato bi lahko z matematično zvijačo tudi reševanje te naloge poenostavili kot pri zgledu 5.1, vendar vseeno računajmo naprej kot navadno:

$$\frac{\partial f}{\partial r'} = -\lambda \cdot \frac{r'}{\sqrt{(r')^2 + r^2}}$$

$$\frac{d}{d\varphi} \left(\frac{\partial f}{\partial r'} \right) = -\lambda \cdot \frac{r'' \cdot \sqrt{(r')^2 + r^2} - r' \cdot \frac{r' r'' + r r'}{\sqrt{(r')^2 + r^2}}}{(r')^2 + r^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial r} = r - \lambda \cdot \frac{r}{\sqrt{(r')^2 + r^2}}$$

Dobimo dokaj zapleten NDE:

$$-\lambda \cdot \frac{r'' \cdot \sqrt{(r')^2 + r^2} - r' \cdot \frac{r' r'' + r r'}{\sqrt{(r')^2 + r^2}}}{(r')^2 + r^2} = r - \lambda \frac{r}{\sqrt{(r')^2 + r^2}}$$

Vendar, če predpostavimo krožnico, ali res deluje nastavek za konstantni polmer: $r = R$? Tedaj velja $r' = r'' = 0$ in se enačba močno poenostavi:

$$0 = R - \lambda$$

Enačba je izpolnjena, če postavimo $\lambda = R$. Torej je krožnica res ena od rešitev diferencialne enačbe za $r(\varphi)$, precej težje pa bi bilo dokazati, da gre res za maksimum ploščine. ♠

♥ Računski zgled 5.3

Dokažite enačbo verižnice, to je, da ima nenapeta verižica ali vrvica z enakomerno porazdeljeno maso, ki se pobesi zaradi lastne teže, obliko hiperboličnega kosinusa. Minimizarati je treba potencialno energijo verižice, kar pomeni enako kot minimizarati višino njenega težišča. Konca verižice naj bosta na enaki višini.

Tu gre spet za vezani ekstrem, saj je dolžina verižice vnaprej določena. Izberimo koordinatni sistem v skladu s simetrijo verižice (slika 25). Njeni robni točki T_1 in T_2 sta pri $(-a, 0)$ in pri $(+a, 0)$. Dolžina verižice je L in veljati mora $L > 2a$. Koordinata y_{\min} najnižje točke $T_3(0, y_{\min})$ ni vnaprej znana, lahko pa jo bomo izračunali kasneje. Iskana funkcijska oblika verižice naj bo $y(x)$. Njeno dolžino izrazimo podobno kot pri zgledu 5.1, samo neposredno s koordinatama x in y :

$$L = \int ds = 2 \int_0^a \sqrt{(y')^2 + 1} \cdot dx$$

Pri trirazsežnem telesu izračunamo eno od koordinat njegovega težišča po definiciji:

$$y^* = \frac{1}{m} \int y dm$$

Enako naredimo tudi pri tanki verižici, le da je delček njene mase sorazmeren z dolžinskim odsekom ds : $dm = \rho S ds$, kjer je S ploščina majhnega prereza verižice. Celotna masa verižice je $m = \rho SL$. Torej je izraz za y^* podoben kot za L :

$$y^* = \frac{2}{\rho SL} \int_0^a \rho S y \sqrt{(y')^2 + 1} \cdot dx = \frac{2}{L} \int_0^a y \sqrt{(y')^2 + 1} \cdot dx$$

Zaradi vezanega ekstrema minimiziramo integral $I = y^* - \lambda L$:

$$I = 2 \int_0^a \left(\frac{y}{L} - \lambda \right) \sqrt{(y')^2 + 1} \cdot dx$$

Spet smo naleteli na zgled, kjer v funkciji pod integralom manjka eksplicitna odvisnost od neodvisne spremenljivke x . Zato zdaj uporabimo trik z zamenjavo vlog spremenljivk: $y(x) \rightarrow x(y)$. To pomeni, da spremenimo tudi integracijsko spremenljivko: $dx = (dx/dy)dy \equiv x'dy$. Hkrati pa velja $y' = 1/x'$, pri čemer nam je jasno, po kateri spremenljivki odvajamo v obeh primerih. Torej je integral:

$$I = \int f(y, y') dx = \int f(y, 1/x') x' dy$$

V našem primeru je to:

$$I = 2 \int \left(\frac{y}{L} - \lambda \right) \sqrt{(1/x')^2 + 1} \cdot x' dy = 2 \int \left(\frac{y}{L} - \lambda \right) \sqrt{1 + (x')^2} \cdot dy$$

Izpustimo nebitveno dvojko in funkcija pod integralom je:

$$f = \left(\frac{y}{L} - \lambda \right) \sqrt{1 + (x')^2}$$

Ker manjka (nova) odvisna spremenljivka x , se diferencialna enačba poenostavi v enačbo prve stopnje podobno kot v zgledu 5.1, $\partial f / \partial x' = C$:

$$\left(\frac{y}{L} - \lambda \right) \frac{x'}{\sqrt{1 + (x')^2}} = C$$

Nadaljujemo lahko iskanje funkcijske zveze $x(y)$ ali pa se vrnemo k prvotno zastavljeni funkciji $y(x)$, ponovno z zamenjavo odvoda $x' = 1/y'$. Izberimo drugo možnost:

$$\left(\frac{y}{L} - \lambda \right) \frac{1}{\sqrt{(y')^2 + 1}} = C$$

Najprej izrazimo odvod:

$$y' = \frac{dy}{dx} = \sqrt{\left(\frac{y/L - \lambda}{C} \right)^2 - 1}$$

Pa smo spet pri NDE z ločljivima spremenljivkama. Tokrat se bomo zadovoljili z nedoločenim integralom:

$$\int \frac{dy}{\sqrt{\left(\frac{y/L - \lambda}{C}\right)^2 - 1}} = \int dx$$

V integralu na levi strani enačbe bomo seveda uporabili novo spremenljivko: $z = (y/L - \lambda)/C \rightarrow dz = dy/(LC)$:

$$LC \int \frac{dz}{\sqrt{z^2 - 1}} = x + D$$

Integral na levi strani enačbe je naš stari znanec – inverzni hiperbolični kosinus:

$$\int \frac{dz}{\sqrt{z^2 - 1}} = \operatorname{ar} \cosh z = \ln(z + \sqrt{z^2 - 1})$$

Tako izhaja:

$$\operatorname{ar} \cosh\left(\frac{y/L - \lambda}{C}\right) = \frac{x + D}{LC}$$

$$\frac{y/L - \lambda}{C} = \cosh\left(\frac{x + D}{LC}\right)$$

$$y = L \cdot \left[\lambda + C \cosh\left(\frac{x + D}{LC}\right) \right]$$

Konstante v zadnji enačbi so morda res postavljene nekoliko nerodno, a lahko zapis hitro poenostavimo. Prvič, tako funkcija \cosh kot funkcija $y(x)$ sta sodi, to pa je mogoče edino pri pogoju $D = 0$. Drugič, upoštevamo lahko desni robni pogoj, $y(a) = 0$:

$$\lambda + C \cosh\left(\frac{a}{LC}\right) = 0 \rightarrow \lambda = -C \cosh\left(\frac{a}{LC}\right)$$

Prepišimo funkcijo:

$$y = LC \cdot \left[\cosh\left(\frac{x}{LC}\right) - \left(\frac{a}{LC}\right) \cosh\left(\frac{a}{LC}\right) \right]$$

Sicer bi lahko uvedli novo konstanto $\check{C} = LC$, vendar je bolj praktično ostati pri zgornjem zapisu, kjer je fizikalna dimenzija meter vključena v znani dolžini L , medtem ko je konstanta C brez enote. In kako nazadnje izračunamo C ? S tem, da je dolžina verižice res enaka L :

$$L = 2 \int_0^a \sqrt{(y')^2 + 1} \cdot dx = 2 \int_0^a \sqrt{\sinh^2\left(\frac{x}{LC}\right) + 1} \cdot dx$$

Vendar pa je zadnji integral enostaven:

$$L = 2 \int_0^a \cosh\left(\frac{x}{LC}\right) \cdot dx = 2LC \sinh\left(\frac{x}{LC}\right) \Big|_0^a = 2LC \sinh\left(\frac{a}{LC}\right)$$

Enačba za C pa ni preprosta:

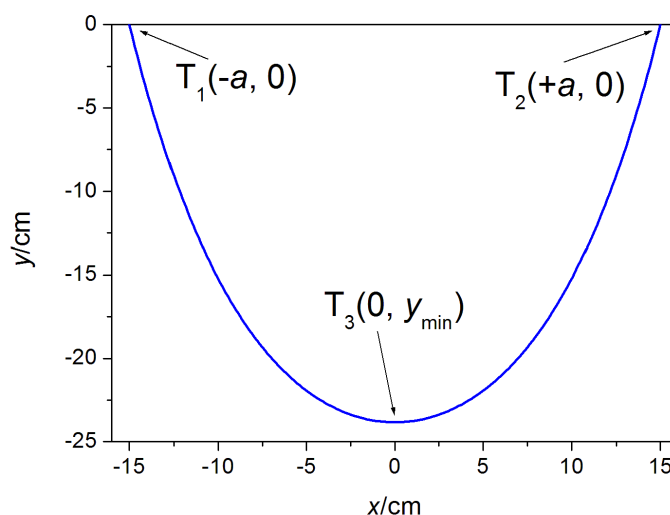
$$2C \sinh\left(\frac{a}{LC}\right) = 1$$

Uvedimo brezdimenzijski parameter $\alpha = 2a/L < 1$ in $t = 2C$ enačbo prepisimo za neznanke t :

$$t \cdot \sinh\left(\frac{\alpha}{t}\right) = 1$$

Enačbo moramo rešiti numerično za dani parameter α , na primer z enostavno metodo – bisekcijo. Nazadnje lahko izračunamo tudi najnižjo točko verižnice:

$$y_{\min} = y(0) = -LC \cdot \cosh\left(\frac{a}{LC}\right)$$



Slika 25: Verižnica: $L = 60$ cm, $a = 15$ cm ($\alpha = 1/2 \rightarrow$ bisekcija da $t \approx 0,23$) ♠

♥ Računski zgled 5.4

V pobegli radialni strukturi (v tuji literaturi je oznaka zanjo ER = escaped radial) nematičnega tekočega kristala (NTK) v valju ima direktorsko polje cilindrično simetrijo, nematski direktor pa podaja enačba:

$$\bar{n} = \sin \alpha(\rho) \bar{e}_\rho + \cos \alpha(\rho) \bar{e}_z$$

Nematski direktor je enotski vektor, ki podaja lokalno povprečno usmerjenost dolgih osi molekul [24]. Kot α , to je kot med cilindrično geometrijsko osjo in nematskim direktorjem \bar{n} , je odvisen le od cilindrične koordinate ρ , to je od razdalje točke od geometrijske osi. Enotska vektorja \bar{e}_ρ in \bar{e}_z sta lokalna smerna vektorja cilindričnega koordinatnega sistema. Velja $\alpha(0) = 0$, to je, ob geometrijski osi je nematski direktor poravnani z osjo, $\alpha(\rho)$ pa je naraščajoča funkcija, to je, z razdaljo od geometrijske

osi se povečuje tudi nagib nematskega direktorja glede na os. Valj je omejen in ima dimenziji R in h . Uporabimo gostoto proste energije [24]:

$$f = \frac{1}{2} \left\{ K_{11} (\nabla \cdot \bar{n})^2 + K_{22} (\bar{n} \cdot \nabla \times \bar{n})^2 + K_{33} |\bar{n} \times \nabla \times \bar{n}|^2 \right\}$$

Nalogo poenostavimo s približkom enakih elastičnih konstant, $K_{11} = K_{22} = K_{33} \equiv K$. Minimizirajte celotno prosto energijo F (to je integral gostote proste energije f po prostornini valja) in napišite ustrezno navadno diferencialno enačbo za funkcijo $\alpha(\rho)$.

Zapišimo najprej divergenco in rotor vektorja \mathbf{n} v cilindričnih koordinatah:

$$\nabla \cdot \bar{n} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial(\rho n_\rho)}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho} \cdot \sin \alpha + \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \cos \alpha$$

$$\nabla \times \bar{n} = -\frac{\partial n_z}{\partial \rho} \bar{e}_\varphi = \sin \alpha \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \bar{e}_\varphi$$

Skalarni produkt $\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n}$ je nič, zato odpade drugi (zvojni) člen v zavitem oklepaju v izrazu za f . Vektorski produkt pri tretjem členu pa je:

$$\bar{n} \times \nabla \times \bar{n} = [\sin \alpha \cdot \bar{e}_\rho + \cos \alpha \cdot \bar{e}_z] \times \sin \alpha \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \bar{e}_\varphi$$

$$\bar{n} \times \nabla \times \bar{n} = \sin \alpha \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot [\sin \alpha \cdot \bar{e}_z - \cos \alpha \cdot \bar{e}_\rho]$$

Torej je gostota proste energije:

$$f = \frac{1}{2} K \left\{ \left(\frac{1}{\rho} \cdot \sin \alpha + \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \cos \alpha \right)^2 + \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \sin \alpha \right)^2 \right\}$$

$$f = \frac{1}{2} K \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \sin(2\alpha) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \sin^2 \alpha \right\}$$

Celotno prosto energijo NTK v valju izračunamo s trojnim integralom:

$$F = \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^h f \cdot \rho d\rho d\varphi dz$$

$$F = \pi K h \int_0^R \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \sin(2\alpha) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \sin^2 \alpha \right\} \rho d\rho$$

Integrala po kotu in višini sta namreč elementarna. Označimo funkcijo pod integralom, vključno s faktorjem ρ , spet s f , saj ni nevarnosti za zamenjavo z gostoto proste energije, ki je ne bomo več potrebovali:

$$f = \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \sin(2\alpha) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \sin^2 \alpha \right\} \rho$$

Nadaljujemo standardni postopek minimizacije integrala:

$$\frac{\partial f}{\partial(d\alpha/d\rho)} = 2\rho \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} + \sin(2\alpha)$$

$$\frac{d}{d\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial(d\alpha/d\rho)} \right) = 2\rho \cdot \frac{d^2\alpha}{d\rho^2} + 2 \frac{d\alpha}{d\rho} + 2 \cos(2\alpha) \cdot \frac{d\alpha}{d\rho}$$

$$\frac{\partial f}{\partial\alpha} = 2 \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \cos(2\alpha) + \frac{1}{\rho} \cdot \sin(2\alpha)$$

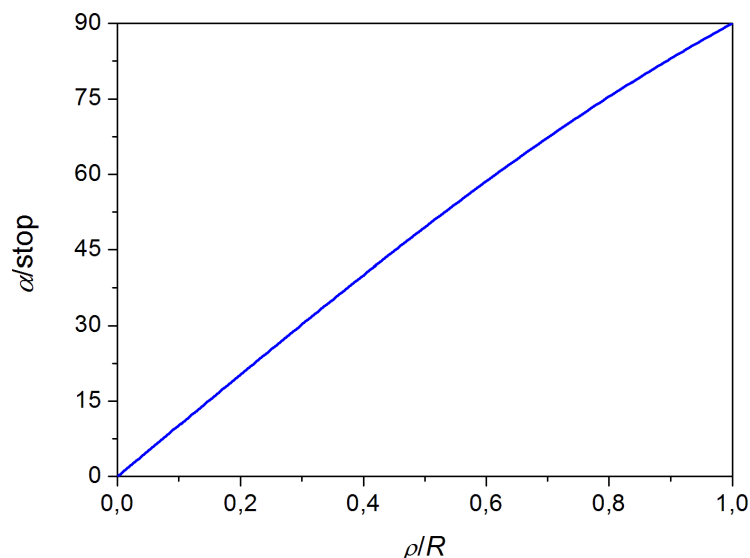
Postavimo

$$\frac{d}{d\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial(d\alpha/d\rho)} \right) = \frac{\partial f}{\partial\alpha}$$

Enačbo preuredimo in nazadnje pristanemo pri značilnem ELE drugega reda:

$$\frac{d^2\alpha}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \cdot \sin(2\alpha) = 0$$

V celoti jo lahko rešimo numerično, poleg robnega pogoja $\alpha(0) = 0$ pa potrebujemo še robni pogoj pri $\rho = R$. Ta je odvisen od interakcije med steno valja in molekulami NTK: navadno opazimo ER-strukturo pri tako imenovanem homeotropnem sidranju. To pomeni: stene valja molekulam vsiljujejo smer dolgih osi pravokotno na stene, s čimer se pojavi frustracija v smereh v bližini geometrijske osi valja; govorimo o »pobegu« smeri molekul v smer geometrijske osi valja. Na sliki 26 je prikazan graf funkcije $\alpha(\rho)$.



Slika 26: Graf numerično izračunane funkcije $\alpha(\rho)$ pri ER-strukturi

Kote smo izračunali numerično, s preprosto relaksacijsko iterativno metodo za reševanje zgoraj zapisanega NDE drugega reda, pri robnih pogojih $\alpha(0) = 0$ in $\alpha(R) = 90^\circ$. Drugi pogoj pomeni močno homeotropno sidranje. Takšne metode zahtevajo primerne začetne vrednosti kota na obravnavanem intervalu (začetni približek). Najprimernejši začetni približek je kar linearna odvisnost kota od polmera, saj je z grafa razvidno, da se po relaksaciji funkcija ne razlikuje močno od linearne funkcije (je rahlo konkavna). ♠

♥ Računski zgled 5.5

V radialno zviti (v literaturi bolj znani pod imenom dvojno zviti, DT = double twisted) strukturi kiralnega nematičnega tekočega kristala (KNTK) v valju ima direktorsko polje cilindrično simetrijo, nematski direktor pa podaja enačba:

$$\bar{n} = \sin \alpha(\rho) \bar{e}_\varphi + \cos \alpha(\rho) \bar{e}_z$$

Kot α je kot pri prejšnjem računu odvisen le od cilindrične koordinate ρ . Vendar imamo tu namesto enotskega vektorja e_ρ vektor e_φ . Spet velja $\alpha(0) = 0$, $\alpha(\rho)$ pa je naraščajoča funkcija. Zdaj gre za zasuk nematskega direktorja okrog vsake radialne osi od sredine proti robu valja. Valj je omejen in ima dimenziji R in h . Uporabimo gostoto proste energije za kiralni nematik [24]:

$$f = \frac{1}{2} \left\{ K_{11} (\nabla \cdot \bar{n})^2 + K_{22} (\bar{n} \cdot \nabla \times \bar{n} - q)^2 + K_{33} |\bar{n} \times \nabla \times \bar{n}|^2 \right\}$$

Nalogo poenostavimo s približkom enakih elastičnih konstant, $K_{11} = K_{22} = K_{33} \equiv K$. Minimizirajte celotno prosto energijo F (to je integral gostote proste energije f po prostornini valja) in napišite ustrezno navadno diferencialno enačbo za funkcijo $\alpha(\rho)$.

Divergenca nematskega direktorja je zdaj enaka nič. Zapišimo še rotor vektorja \mathbf{n} v cilindričnih koordinatah:

$$\nabla \times \bar{n} = -\frac{\partial n_z}{\partial \rho} \bar{e}_\varphi + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial(\rho n_\varphi)}{\partial \rho} \bar{e}_z = \sin \alpha \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \bar{e}_\varphi + \left(\frac{1}{\rho} \cdot \sin \alpha + \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \cos \alpha \right) \bar{e}_z$$

V gostoti prosti energije sta od nič različna drugi in tretji člen, zato zapišimo skalarni in vektorski produkt nematskega direktorja in njegovega rotorja:

$$\bar{n} \cdot \nabla \times \bar{n} = \frac{d\alpha}{d\rho} + \frac{\sin(2\alpha)}{2\rho}$$

$$\bar{n} \times \nabla \times \bar{n} = \frac{\sin^2 \alpha}{\rho} \cdot \bar{e}_\rho$$

Torej je gostota proste energije:

$$f = \frac{1}{2} K \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} + \frac{\sin(2\alpha)}{2\rho} - q \right)^2 + \left(\frac{\sin^2 \alpha}{\rho} \right)^2 \right\}$$

$$f = \frac{1}{2} K \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot (\sin(2\alpha) - 2q\rho) + \frac{\sin^2 \alpha}{\rho^2} - \frac{q \sin(2\alpha)}{\rho} + q^2 \right\}$$

Celotno prosto energijo KNTK v valju izračunamo z integralom:

$$F = \pi K h \int_0^R \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot (\sin(2\alpha) - 2q\rho) + \frac{\sin^2 \alpha}{\rho^2} - \frac{q \sin(2\alpha)}{\rho} + q^2 \right\} \rho d\rho$$

Označimo funkcijo pod integralom spet s f , člen q^2 pa mirne duše izpustimo, saj na minimizacijo proste energije ne vpliva:

$$f = \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot (\sin(2\alpha) - 2q\rho) + \frac{\sin^2 \alpha}{\rho^2} - \frac{q \sin(2\alpha)}{\rho} \right\} \rho$$

Minimizirajmo integral:

$$\frac{\partial f}{\partial(d\alpha/d\rho)} = 2\rho \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} + \sin(2\alpha) - 2q\rho$$

$$\frac{d}{d\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial(d\alpha/d\rho)} \right) = 2\rho \cdot \frac{d^2\alpha}{d\rho^2} + 2 \frac{d\alpha}{d\rho} + 2 \cos(2\alpha) \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} - 2q$$

$$\frac{\partial f}{\partial\alpha} = 2 \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot \cos(2\alpha) + \frac{1}{\rho} \cdot \sin(2\alpha) - 2q \cos(2\alpha)$$

Postavimo

$$\frac{d}{d\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial(d\alpha/d\rho)} \right) = \frac{\partial f}{\partial\alpha}$$

Enačbo preuredimo in priplovemo do končnega ELE:

$$\frac{d^2\alpha}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \cdot \sin(2\alpha) - \frac{2q}{\rho} \cdot \sin^2 \alpha = 0$$

V celoti jo lahko rešimo numerično, poleg robnega pogoja $\alpha(0) = 0$ pa potrebujemo še robni pogoj pri $\rho = R$. Ta je odvisen od interakcije med steno valja in molekulami NTK: navadno opazimo DT-strukturo pri tako imenovanem planarnem sidranju. To pomeni: stene valja molekulam vsiljujejo smer dolgih osi vzporedno s stenami. Zanimivo je, da bi bila diferencialna enačba brez kiralnega člena ($q = 0$) enaka tisti za ER-strukturo v prejšnjem zgledu. Preveriti se tudi da, da pri majhnih vrednostih ρ dobro velja linearni približek $\alpha \approx k\rho$ pri obeh strukturah, saj lahko uporabimo približek $\sin(2\alpha) \approx 2\alpha$ in se drugi in tretji člen izničita, prvi člen (drugi odvod) pa je nič. Pri DT-strukturi je četrti (kiralni) člen manjšega velikostnega reda kot drugi in tretji. Vendar pa med ER-strukturo nekiralnega nematika in DT-strukturo kiralnega nematika vseeno obstaja bistvena razlika. Medtem ko ER-strukturo vsili robni pogoj s steno valja, pride do DT-strukture delno spontano, saj je kiralnost v naravi kiralnega nematika. Res je, da bi kiralni nematik brez omejujočih robnih pogojev prevzel preprostejšo helično

strukturo z eno samo osjo vrtenja, vendar pa valj s planarnim sidranjem lahko daje prednost strukturi, pri kateri gre za zasuk okrog vseh radialnih osi. Robni pogoj pri $\rho = R$ naj bo v tem primeru drugačen kot pri ER-strukturi iz prejšnjega zgleda: stene valja naj vsiljujejo molekulam TK azimutno smer. Ta je pravokotna tako na radialno smer, kot na geometrijsko os valja, zato jo lahko podamo s smernim vektorjem e_φ . Ustrezni kot je $\alpha = 90^\circ$, vendar pa to ni edina možnost. Kota 90° in 270° sta v primeru TK ekvivalentna, ker kot 270° ustreza nematskemu direktorju \mathbf{n} z nasprotno smerjo kot pri kotu 90° . Zaradi simetrije je namreč struktura NTK neobčutljiva za transformacijo $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$. Zaradi periodičnosti kotnih funkcij pa so ustrezni vsi lihi mnogokratniki kota 90° . Vendar kota $\alpha(R)$ zdaj ne bomo predpisali, ker obravnavamo primer šibkega sidranja: stene sicer vsiljujejo azimutno smer \mathbf{n} , vendar smer \mathbf{n} ni nujno takšna. Vpliv površine lahko opišemo z dodatnim (površinskim) členom proste energije, ki ostane končen, če se smer \mathbf{n} ne ujema s smerjo $\pm e_\varphi$. Primerna funkcijska odvisnost tega člena proste energije od kota, je $\cos^2 \alpha$, ker je ta člen res minimalen (enak nič) pri lihem mnogokratniku pravega kota. Zapišimo torej še enkrat celotno prosto energijo:

$$F = \int_0^1 f d\rho + W \cos^2(\alpha(1))$$

Zapis je že v brezdimenzijski obliki: $R = 1$, prosto energijo v brezdimenzijski obliki, preračunano na enodimenzionalni integral, pa smo zapisali že zgoraj:

$$f = \left\{ \left(\frac{d\alpha}{d\rho} \right)^2 + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} \cdot (\sin(2\alpha) - 2q\rho) + \frac{\sin^2 \alpha}{\rho^2} - \frac{q \sin(2\alpha)}{\rho} \right\} \rho$$

Konstanta W je jakost sidranja nematskega direktorja ob površini v brezdimenzijskem zapisu. Rešujemo torej problem, ki ustreza splošnejši prosti energiji zgoraj, le da je kot pri $\rho = 0$ fiksiran: $\alpha(0) = 0$. Funkcija g_2 v našem primeru je $g_2 = W \cos^2(\alpha(1))$, ustrežna robna diferencialna enačba (namesto 4.8 b) pa je:

$$\left[\frac{\partial g_2}{\partial \alpha} + \left(\frac{\partial f}{\partial \alpha'} \right) \right] (1) = 0$$

Eksplicitno jo izrazimo z vstavitvijo funkcij f in g_2 . Zapišimo zdaj skupaj še enkrat ELE in obe robni enačbi:

$$\frac{d^2 \alpha}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\alpha}{d\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \cdot \sin(2\alpha) - \frac{2q}{\rho} \cdot \sin^2 \alpha = 0$$

$$\alpha(0) = 0$$

$$\left[\frac{d\alpha}{d\rho} + \frac{1}{2}(1-W)\sin(2\alpha) - q \right] (1) = 0 \spadesuit$$

♥ Računski zgled 5.6

V tej nalogi zapišimo direktorsko polje NTK v kartezičnih komponentah v splošnem:

$$\bar{\mathbf{n}} = (\sin \Omega \cos \psi, \sin \Omega \sin \psi, \cos \Omega)$$

Pri tem sta parametra (»smerna kota«) Ω in ψ odvisna od koordinat x , y in z , razen tega pa je izpolnjen normalizacijski pogoj: $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$. Nalogo kar takoj poenostavimo s približkom enakih elastičnih konstant, $K_{11} = K_{22} = K_{33} \equiv K$. Zato lahko poenostavimo tudi zapis gostote proste energije:

$$f = \frac{1}{2} K \{ (\nabla \cdot \bar{n})^2 + (\nabla \times \bar{n})^2 \}$$

Minimizirajte celotno prosto energijo F in napišite ustrezni sistem PDE za parametra Ω in ψ .

Pri računu divergence in rotorja nematskega direktorja moramo paziti na posredno odvajanje prek obeh kotov. Ne bomo podrobno opisali tega računa, ker je za bralca dovolj preprost, le nekoliko dolgovezen. Podajmo le zgled, kako računamo enega od parcialnih odvodov po koordinatah:

$$\frac{\partial n_x}{\partial x} = \cos \Omega \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial x} \cdot \cos \psi - \sin \Omega \cdot \sin \psi \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Ko zložimo skupaj vse odvode, dobimo:

$$f = \frac{1}{2} K \{ (\nabla \Omega)^2 + \sin^2 \Omega \cdot (\nabla \psi)^2 + \sin(2\Omega) \cdot f_{xy} + 2 \sin^2 \Omega \cdot (f_{yz} \cdot \cos \psi + f_{zx} \cdot \sin \psi) \}$$

kjer smo definirali funkcije odvodov f_{xy} , f_{xz} in f_{yz} :

$$f_{xy} = \frac{\partial \Omega}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial \Omega}{\partial y} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$f_{yz} = \frac{\partial \Omega}{\partial y} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{\partial \Omega}{\partial z} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

$$f_{zx} = \frac{\partial \Omega}{\partial z} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \Omega}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

Simetrija teh funkcij pri ciklični permutaciji koordinat je očitna. Prosto energijo izrazimo s prostornim integralom njene gostote:

$$F = \iiint f(\Omega, \psi, \frac{\partial \Omega}{\partial x}, \frac{\partial \Omega}{\partial y}, \frac{\partial \Omega}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z}) dx dy dz$$

V splošnejšem primeru bi lahko bila funkcija pod integralom eksplicitno odvisna tudi od koordinat x , y in z , v našem primeru pa ni. Ta variacijski problem spada v najsplošnejši tip, ker imamo dve še neznanji funkciji (Ω in ψ) in tri neodvisne spremenljivke – kartezične koordinate. Zato iz minimizacije proste energije izhaja sistem dveh PDE:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial f}{\partial (\partial \Omega / \partial x)} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial f}{\partial (\partial \Omega / \partial y)} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial f}{\partial (\partial \Omega / \partial z)} \right] = \frac{\partial f}{\partial \Omega}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial f}{\partial (\partial \psi / \partial x)} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial f}{\partial (\partial \psi / \partial y)} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial f}{\partial (\partial \psi / \partial z)} \right] = \frac{\partial f}{\partial \psi}$$

Končni enačbi sta:

$$\nabla^2 \Omega = \frac{1}{2} \sin(2\Omega) \cdot (\nabla \psi)^2$$

$$\nabla^2 \psi = -2 \cot(\Omega) \cdot (\nabla \Omega \cdot \nabla \psi) \spadesuit$$

♥ Računski zgled 5.7

Do Poissonove enačbe v elektrostatiki lahko pridemo z iskanjem ekstrema naslednjega integrala [8]:

$$S = \int f(\varphi, \nabla \varphi) dV$$

kjer navadno integriramo po vsem 3D prostoru, φ je električni potencial, funkcija f pod integralom pa je odvisna tudi od gradienta potenciala in ima obliko:

$$f = -\frac{\varepsilon_0}{2} (\nabla \varphi)^2 + \rho \varphi$$

Pri tem je ρ znana gostota električnega naboja in je funkcija kartezičnih koordinat. Rešite nalogo.

Da si problem bolje predstavljamo, zapišimo v funkciji f kvadrat velikosti gradienta potenciala na dolgo:

$$f = -\frac{\varepsilon_0}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right] + \rho \varphi$$

Dovolj je obdelati samo en člen na levi strani ELE (5.4) v ustrezni obliki za ta račun:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial x)} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial y)} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial z)} \right) = \frac{\partial f}{\partial \varphi}$$

Prvi člen izračunamo takole:

$$\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial x)} = -\varepsilon_0 \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial (\partial \varphi / \partial x)} \right) = -\varepsilon_0 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$$

Z vsemi tremi členi na levi strani ELE dobimo očitno Laplaceov operator. Enačbo zapišemo v teje končni obliki:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

To je Poissonova enačba. Vendar nas tu zanima še vrednost integrala, če upoštevamo to enačbo za potencial. Eliminirajmo raje gostoto naboja: $\rho = -\varepsilon_0 \nabla^2 \varphi$, tako da je funkcija f :

$$f = -\frac{\varepsilon_0}{2} (\nabla \varphi)^2 - \varepsilon_0 \varphi \nabla^2 \varphi$$

Drugi člen z Laplaceovim operatorjem bi radi izrazili drugače. Upoštevajmo naslednjo enakost za divergenco produkta skalarne in vektorske funkcije: $\nabla \cdot (f\mathbf{g}) = f(\nabla \cdot \mathbf{g}) + \nabla f \cdot \mathbf{g}$. Vzemimo $f = \varphi$ in $\mathbf{g} = \nabla \varphi$, pa imamo: $\nabla \cdot (\varphi \nabla \varphi) = \varphi \nabla^2 \varphi + (\nabla \varphi)^2$. Enačbo obrnemo: $\varphi \nabla^2 \varphi = \nabla \cdot (\varphi \nabla \varphi) - (\nabla \varphi)^2$, torej za funkcijo f velja:

$$f = -\frac{\varepsilon_0}{2} (\nabla \varphi)^2 - \varepsilon_0 [\nabla \cdot (\varphi \nabla \varphi) - (\nabla \varphi)^2] = \frac{\varepsilon_0}{2} (\nabla \varphi)^2 - \varepsilon_0 \nabla \cdot (\varphi \nabla \varphi)$$

Kaj naredimo z divergenčnim členom? Najprej vzamemo končno prostornino (npr. kroglo s polmerom r) in divergenčni člen lahko z Gaussovimi izrekom prepisemo v ploskovni integral za ploskev, ki objema dani volumen:

$$S = \frac{\varepsilon_0}{2} \int (\nabla \varphi)^2 dV - \varepsilon_0 \int \nabla \cdot (\varphi \nabla \varphi) dV$$

$$S = \frac{\varepsilon_0}{2} \int (\nabla \varphi)^2 dV - \varepsilon_0 \oint \varphi \nabla \varphi \cdot d\vec{S}$$

Ko povečujemo polmer krogle, gre površinski integral proti 0, ker produkt $\varphi \nabla \varphi$ pada s polmerom hitreje kot $1/r^2$ (npr. za točkasti naboj: $\varphi \propto 1/r$, $\nabla \varphi \propto 1/r^2 \rightarrow \varphi \nabla \varphi \propto 1/r^3$), ploskev pa raste z r^2 . Ostane samo še prostorninski integral; upoštevajmo definicijo jakosti električnega polja $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$, pa imamo končno:

$$S = \frac{\varepsilon_0}{2} \int E^2 dV$$

S je energija električnega polja. \blackspadesuit

Nadaljnjih pet zgledov fizikalnih problemov iz mehanike bomo najprej obravnavali z vidika Lagrangiana, potem pa še s Hamiltonianom.

Lagrangian

Obravnavali bomo le zglede, ko so sile konservativne in se jim da prirediti potencialno energijo: $\mathbf{F} = -\nabla V$. Lagrangian vpeljemo kot razliko kinetične (L) in potencialne energije (V) telesa ali sestava teles: $L = T - V$ [19–20]. Kot eno ali več medsebojno neodvisnih spremenljivk uporabimo posplošene (generalizirane) koordinate, ki jih mora biti ravno toliko, da prav opišejo gibanje sistema, tudi glede na morebitne geometrijske omejitve. Zaradi dinamike sistema so generalizirane koordinate odvisne od časa in prav njihovo časovno odvisnost iščemo. Lagrangian je funkcija generaliziranih koordinat in njihovih časovnih odvodov, lahko pa vsebuje še direktno (eksplisitno) odvisnost od časa. Generalizirane koordinate označimo v splošnem z q_i , njihovi časovni odvodi pa so:

$$\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$$

Z Lagrangianom so povezani naslednje enačbe (po ena za vsako generalizirano koordinato):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (5.9)$$

Enačbe so podobne ELE (5.2) ali pa (5.6), le da je zdaj neodvisna spremenljivka čas t namesto koordinate x , odvisne spremenljivke pa so q_i namesto y .

♥ Računski zgled 5.8

Majhna kroglica z luknjico lahko brez trenja drsi po vodoravni palici dolžine L . Palico začnemo vrteti enakomerno s kotno hitrostjo ω okrog njenega levega krajišča, os vrtenja pa je pravokotna na palico. Začetna razdalja kroglice od osi je r_0 . Kako se s časom spreminja njena razdalja od osi? S kolikšno skupno hitrostjo odleti s palice?

Ker gre za gibanje kroglice v vodoravni ravnini, ni treba upoštevati njene težnostne potencialne energije. Lagrangian je enak kinetični energiji kroglice T . Trenutni »polmer« kroženja kroglice označimo z r in je odvisen od časa: $r = r(t)$. To naj bo generalizirana koordinata. Koordinati kroglice sta $x = r \cos(\omega t)$ in $y = r \sin(\omega t)$. Komponenti hitrosti sta:

$$v_x = \dot{x} = \dot{r} \cos(\omega t) - r \omega \sin(\omega t)$$

$$v_y = \dot{y} = \dot{r} \sin(\omega t) + r \omega \cos(\omega t)$$

tako da je kinetična energija in hkrati Lagrangian:

$$L = T = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2) = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \omega^2)$$

Ustrezno prepíšimo ELE (5.9):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) = \frac{\partial L}{\partial r}$$

$$\frac{d}{dt} (m\dot{r}) = m\omega^2 r$$

Potem odvajamo levo stran enačbe in krajšamo maso:

$$\ddot{r} = \omega^2 r$$

Do te enačbe bi prišli na klasičen način, če bi si mislili, da na kroglico deluje sistemska »centrifugalna« sila (po velikosti enaka centripetalni sili $m r \omega^2$), ki »vleče« kroglico navzven.

To je homogeni linearni NDE s konstantnimi koeficienti, zato uporabimo nastavek $r = C \exp(\lambda t)$. Ugotovimo $\lambda = \pm \omega$ in zapišemo splošno rešitev:

$$r = C_1 e^{\omega t} + C_2 e^{-\omega t}$$

Upoštevajmo začetna pogoja:

$$r(0) = C_1 + C_2 = r_0$$

$$\dot{r}(0) = C_1 \omega - C_2 \omega = 0$$

Torej sta konstanti: $C_1 = C_2 = r_0/2$, celotna rešitev pa:

$$r = r_0 \cosh(\omega t)$$

Čas t_1 , v katerem kroglica doseže konce palice, ustreza enačbi:

$$L = r_0 \cosh(\omega t_1)$$

Ni treba, da ga izrazimo eksplicitno. Hitrost kroglice v tem trenutku je:

$$v = \sqrt{\dot{r}^2 + r^2 \omega^2} = r_0 \omega \cdot \sqrt{\sinh^2(\omega t_1) + \cosh^2(\omega t_1)}$$

Upoštevajmo še $\cosh(\omega t_1) = L/r_0$ in $\sinh^2 x = \cosh^2 x - 1$ in smo pri koncu:

$$v = \omega \cdot \sqrt{2L^2 - r_0^2}$$

Razmislite o fizikalnem pomenu rezultata za posebna zgleda: 1) $r_0 = 0$, 2) $r_0 = L$. ♠

♥ Računski zgled 5.9

Telo lahko pod vplivom teže brez trenja drsi v navpični ravnini po vbočenem delu eliptične ploskve $x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$. V tretji razsežnosti je ploskev ravna. Os y je usmerjena navzgor, gibanje telesa pa je omejeno na negativne y . Izpeljite ustrezni Lagrangian in Euler-Lagrangeevo enačbo.

Namesto s kartezičnima koordinatama je bolj praktično računati z generalizirano koordinato φ . Z njo zapišemo kartezični koordinati: $x = a \cos \varphi$, $y = b \sin \varphi$. Pozor: φ v tem zapisu ni polarni kot! Komponenti hitrosti sta:

$$v_x = \dot{x} = -a \sin \varphi \cdot \dot{\varphi}$$

$$v_y = \dot{y} = b \cos \varphi \cdot \dot{\varphi}$$

Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2) = \frac{1}{2} m (a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi}^2$$

potencialna energija pa:

$$V = mgy = mgb \sin \varphi$$

Lagrangian je njuna razlika:

$$L = T - V = \frac{1}{2} m (a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi}^2 - mgb \sin \varphi$$

Zapišimo ELE za parameter φ :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \varphi}$$

$$\frac{d}{dt} \left[m (a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi} \right] = m \left(\frac{1}{2} (a^2 - b^2) \sin(2\varphi) \dot{\varphi}^2 - gb \cos \varphi \right)$$

Še enkrat odvajamo (tokrat totalno po času) levo stran enačbe in hkrati krajšajmo maso:

$$(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \ddot{\varphi} + (a^2 - b^2) \sin(2\varphi) \dot{\varphi}^2 = \frac{1}{2} (a^2 - b^2) \sin(2\varphi) \dot{\varphi}^2 - gb \cos \varphi$$

Končni NDE je:

$$(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \ddot{\varphi} + \frac{1}{2} (a^2 - b^2) \sin(2\varphi) \dot{\varphi}^2 + gb \cos \varphi = 0$$

Reševati jo je treba numerično. ♠

♥ Računski zgled 5.10

Telo lahko pod vplivom teže brez trenja drsi po navpični 3D-vijačnici s polmerom R in hodom (debelino navoja) h . Navpična os z je usmerjena navzdol, na začetku se telo nahaja na osi x , njegova začetna hitrost pa je nič. Izpeljite Lagrangian in rešite Euler-Lagrangeovo enačbo v celoti.

Generalizirana koordinata naj bo polarni kot φ . Z njim izrazimo kartezične koordinate: $x = R \cos \varphi$, $y = R \sin \varphi$, $z = k\varphi$. Koeficient k pri koordinati z izračunamo takole: v enakem času, kot se lega telesa v projekciji na vodoravno ravnino premakne za kot 2π , se telo pomakne navzdol za hod h , torej $h = k \cdot 2\pi$ ali $k = h/(2\pi)$. Komponente hitrosti telesa so:

$$v_x = \dot{x} = -R \sin \varphi \cdot \dot{\varphi}$$

$$v_y = \dot{y} = R \cos \varphi \cdot \dot{\varphi}$$

$$v_z = \dot{z} = k = \frac{h}{2\pi} \dot{\varphi}$$

Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{1}{2} m \left(R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right) \dot{\varphi}^2$$

potencialna energija pa:

$$V = -mgz = -mg \frac{h}{2\pi} \varphi$$

Lagrangian je:

$$L = T - V = \frac{1}{2} m \left(R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right) \dot{\varphi}^2 + mg \frac{h}{2\pi} \varphi$$

Uporabimo ELE:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \varphi}$$

$$\frac{d}{dt} \left[m \left(R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right) \dot{\varphi} \right] = mg \frac{h}{2\pi}$$

Še enkrat odvajamo (tokrat totalno po času) levo stran enačbe in hkrati krajšajmo maso:

$$\left(R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right) \ddot{\varphi} = g \frac{h}{2\pi}$$

Dobili smo zelo preprosti NDE, ki ga lahko direktno dvakrat integriramo po času:

$$\varphi = \frac{g \frac{h}{2\pi}}{R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}} \cdot \frac{t^2}{2} + At + B$$

Integracijski konstanti A in B sta obe nič, ker sta začetni kot in kotna hitrost enaka nič. Eksplicitno zapišimo časovno odvisnost koordinate z :

$$z = \frac{g \frac{h^2}{4\pi^2}}{R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}} \cdot \frac{t^2}{2}$$

Komponenta pospeška v smeri osi z je:

$$a_z = \frac{g \frac{h^2}{4\pi^2}}{R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}} = g \sin^2 \alpha$$

kjer je α nagib tira na vijačnici glede na vodoravno ravnino, tako da res velja:

$$\sin \alpha = \frac{\Delta z}{\Delta s} = \frac{h}{\sqrt{R^2 + h^2}} = \frac{h}{\sqrt{4\pi^2 R^2 + h^2}} = \frac{\frac{h}{2\pi}}{\sqrt{R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}}}$$

Zvezo $a_z = g \sin^2 \alpha$ lahko izpeljemo čisto na klasičen način, po 2. Newtonovem zakonu. Pospešek vzdolž klanca zaradi dinamične komponente teže je $a = g \sin \alpha$. Da bi dobili njegovo komponento v navpični smeri, ga moramo še enkrat pomnožiti s sinusom naklonskega kota. ♠

♥ Računski zgled 5.11

Telo lahko pod vplivom teže brez trenja drsi po vbočenem delu elipsoidne ploskve $x^2/a^2 + y^2/b^2 + z^2/c^2 = 1$. Os z je usmerjena navzgor, gibanje telesa pa je omejeno na negativne z . Izpeljite ustrezni Lagrangian in obe Euler-Lagrangevi enačbi.

Namesto s kartezičnimi koordinatami računamo z generaliziranimi koordinatama θ in φ . Z njima zapišemo kartezične koordinate podobno kot v sferičnem koordinatnem sistemu: $x = a \sin \theta \cos \varphi$, $y = b \sin \theta \sin \varphi$, $z = c \cos \theta$. A zdaj imata kota θ in φ drugačen pomen kot kota v sferičnih koordinatah. Kot θ je večji od $\pi/2$. Komponente hitrosti so:

$$v_x = \dot{x} = a(\cos \theta \cos \varphi \cdot \dot{\theta} - \sin \theta \sin \varphi \cdot \dot{\varphi})$$

$$v_y = \dot{y} = b(\cos \theta \sin \varphi \cdot \dot{\theta} + \sin \theta \cos \varphi \cdot \dot{\varphi})$$

$$v_z = \dot{z} = -c \sin \theta \cdot \dot{\theta}$$

Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{1}{2} m (f_1 \dot{\theta}^2 + f_2 \dot{\varphi}^2 + f_3 \dot{\theta} \dot{\varphi})$$

Vpeljali smo funkcije f_1, f_2 in f_3 :

$$f_1 = (a^2 \cos^2 \varphi + b^2 \sin^2 \varphi) \cos^2 \theta + c^2 \sin^2 \theta$$

$$f_2 = (a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \sin^2 \theta$$

$$f_3 = \frac{b-a}{2} \sin(2\theta) \sin(2\varphi)$$

Potencialna energija je:

$$V = mgz = mgc \cdot \cos \theta$$

Lagrangian pa:

$$L = \frac{1}{2} m (f_1 \dot{\theta}^2 + f_2 \dot{\varphi}^2 + f_3 \dot{\theta} \dot{\varphi}) - mgc \cdot \cos \theta$$

Ustrezna ELE sta:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \varphi}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \theta}$$

Ne bomo ju zapisali v eksplicitni obliki, ker sta enačbi predolgi. Omenimo le, da sta to sklopljeni enačbi drugega reda, ki ju moramo rešiti numerično. ♠

♥ Računski zgled 5.12

To je vedno zanimiv problem koničnega nihala [20]. Gre za navadno matematično (nitno) nihalo, pri katerem je na lahki vrvici dolžine l obešena majhna utež. Tokrat nihalo ne niha v navpični ravnini, temveč gre za 3D-kombinacijo kroženja in nihanja. Ker je vrvica neraztegljiva, je oddaljenost uteži od zgornjega pritrdišča vrvice (tam vzamemo izhodišče koordinatnega sistema) vedno enaka l . Izpeljite ustrezni Lagrangian in obe Euler-Lagrangeevi enačbi.

Uporabimo sferični koordinatni sistem s kotoma θ in φ . Ker nas zanima gibanje uteži okrog ravnovesne najnižje lege, bomo nekoliko spremenili pomen polarnega kota θ : naj bo enak nič v najnižji legi. Z obema kotoma zapišemo kartezične koordinate: $x = l \sin \theta \cos \varphi$, $y = l \sin \theta \sin \varphi$, $z = -l \cos \theta$. Kot θ je zdaj manjši od $\pi/2$. Ta zgled je podoben zgledu 1.14, le da je matematično veliko enostavnejši zaradi $a = b = c = l$. Komponente hitrosti so:

$$v_x = \dot{x} = l(\cos \theta \cos \varphi \cdot \dot{\theta} - \sin \theta \sin \varphi \cdot \dot{\varphi})$$

$$v_y = \dot{y} = l(\cos \theta \sin \varphi \cdot \dot{\theta} + \sin \theta \cos \varphi \cdot \dot{\varphi})$$

$$v_z = \dot{z} = l \sin \theta \cdot \dot{\theta}$$

Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{1}{2} m l^2 [\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \cdot \dot{\varphi}^2]$$

Potencialna energija je:

$$V = mgz = -mgl \cos \theta$$

Lagrangian je:

$$L = \frac{1}{2} ml^2 [\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \cdot \dot{\varphi}^2] + mgl \cos \theta$$

Uporabimo Euler-Lagrangeevi enačbi brez mase:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \varphi}$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \theta}$$

V primerjavi z gibanjem telesa po elipsoidni ploskvi sta zdaj enačbi preprosti. V enačbi za L se ne pojavlja eksplicitna odvisnost od kota φ , temveč je v enačbi samo časovni odvod tega kota. Pravimo, da je φ ciklična generalizirana koordinata, prva enačba pa se tedaj poenostavi v enačbo prve stopnje:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = l^2 \sin^2 \theta \cdot \dot{\varphi} = C$$

s poljubno konstanto C . Izrazimo iz enačbe časovni odvod kota:

$$\dot{\varphi} = \frac{C}{l^2 \sin^2 \theta}$$

Obravnavajmo drugo enačbo:

$$\frac{d}{dt} (l^2 \dot{\theta}) = l^2 \sin \theta \cos \theta \cdot \dot{\varphi}^2 - gl \sin \theta$$

Enačba v končni obliki je:

$$\ddot{\theta} = -\Omega^2 \sin \theta + \beta^2 \cdot \frac{\cos \theta}{\sin^3 \theta}$$

Uvedli smo kvadrat krožne frekvence $\Omega^2 = g/l$ v skladu z nihanjem nitnega nihala ter konstanto z enako fizikalno enoto: $\beta^2 = C^2/l^4$. Obe mejni možnosti gibanja nihala sta očitni: a) $\varphi = \text{konst.}$, b) $\theta = \text{konst.}$ V prvem primeru velja $C = 0 \rightarrow \beta = 0$ in dobimo navadno enačbo za nihanje nihala: $d^2\theta/dt^2 = -\Omega^2 \sin \theta$. Nihanje je sinusno le za majhne kote θ . V drugem primeru iz diferencialne enačbe za polarni kot izhaja:

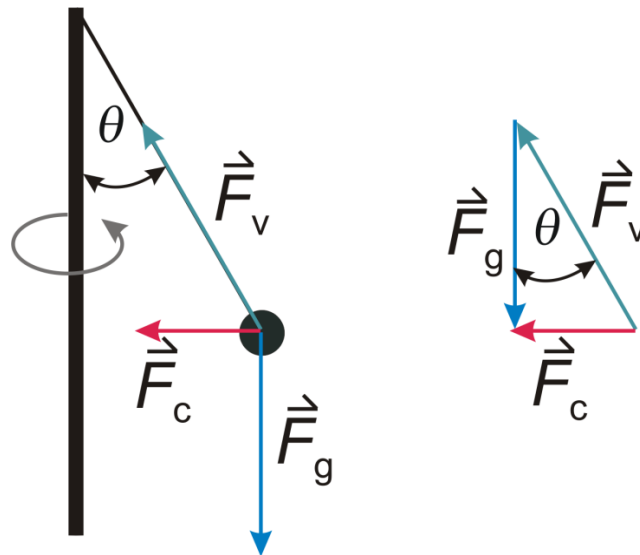
$$\Omega^2 \sin^4 \theta = \beta^2 \cos \theta \rightarrow C = \frac{l^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\cos \theta}} \cdot \sqrt{\frac{g}{l}}$$

Vstavimo to konstanto v enačbo za časovni odvod kota φ in dobimo ustrezno konstantno kotno hitrost $\omega = d\varphi/dt$ pri kroženju uteži v vodoravni ravnini:

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{l \cos \theta}}$$

To enačbo bi izpeljali tudi tako, da bi izračunali centripetalno silo kot rezultanto teže in sile vrvice na utež.

Pri enakomernem kroženju s kotno hitrostjo ω naj bo razdalja masnega telesa od osi vrtenja enaka R (radij kroženja). Dobimo trikotnik sil (slika 27).



Slika 27: Sile pri vrtenju koničnega nihala

V smeri vrvi je sila vrvi, navpično navzdol teža, njuna rezultanta pa je vodoravna centripetalna sila. Iz trikotnika razberemo:

$$\tan \theta = \frac{F_c}{F_g} = \frac{mR\omega^2}{mg} = \frac{R\omega^2}{g}$$

Polmer kroženja je enak $R = l \sin \theta$. Če v zgornji enačbi upoštevamo še $\tan \theta = \sin \theta / \cos \theta$, se sinus kota krajša in dobimo zgoraj zapisano rešitev za kotno hitrost.

Hamiltonian in energija

Hamiltonian v splošnem formalno izpeljemo iz Lagrangiana [19, 20]. Če pa se čas ne pojavlja kot eksplicitna spremenljivka v kinetični in potencialni energiji, se izkaže, da je Hamiltonian kar enak energiji $E = T + V$, ki se ohranja. Obravnavali bomo le takšne zglede (vseh pet zgljedov z Lagrangianom je bilo tega tipa).

♥ Računski zgled 5.8 → 5.13

Majhna kroglica z luknjico lahko brez trenja drsi po vodoravni palici dolžine L . Palico začnemo vrteti enakomerno s kotno hitrostjo ω okrog njenega levega krajišča, os vrtenja pa je pravokotna na palico. Začetna razdalja kroglice od osi je r_0 . Kako je z energijo kroglice?

Prepišimo kinetično energijo kroglice iz zгледа 5.8:

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \omega^2)$$

Gravitacijska energija je konstantna, zato jo postavimo na nič. Hamiltonian je enak Lagrangianu, le da bi ga morali formalno izraziti z generalizirano koordinato r in njenim impulzom $p = \partial L / \partial (dp/dt)$. A s tem se ne bomo ukvarjali. Ne moremo uporabiti zakona o ohranitvi energije kroglice, saj nanjo deluje palica z neko silo, ki očitno opravlja pozitivno delo, kot bomo pokazali. Zato je bilo v tem primeru primerno uporabiti Lagrangian in ne Hamiltonian. Lahko bi sicer zapisali obe Hamiltonovi enačbi, vendar bomo tu kar uporabili rešitev za gibanje, ki smo jo že izrazili:

$$r = r_0 \cosh(\omega t)$$

$$v = \sqrt{\dot{r}^2 + r^2 \omega^2} = r_0 \omega \cdot \sqrt{\sinh^2(\omega t) + \cosh^2(\omega t)}$$

$$v = r_0 \omega \cdot \sqrt{2 \cosh^2(\omega t) - 1}$$

Moč sile je enaka časovnemu odvodu kinetične energije kroglice:

$$P = \dot{T} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m v^2 \right) = m v \dot{v}$$

$$P = m r_0^2 \omega^3 \cdot 2 \sinh(\omega t) \cosh(\omega t) = m r_0^2 \omega^3 \cdot \sinh(2\omega t)$$

Če ni trenja, deluje sila palice na kroglico samo v radialni smeri. Začetna radialna komponenta hitrosti je enaka nič, zato je tudi začetna moč nič. Z naraščanjem radialne komponente hitrosti in hkrati radialne sile se povečuje tudi moč. ♠

♥ Računski zgled 5.9 → 5.14

Telo lahko pod vplivom teže brez trenja drsi v navpični ravnini po vbočenem delu eliptične ploskve $x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$. V tretji razsežnosti je ploskev ravna. Os y je usmerjena navzgor, gibanje telesa pa je omejeno na negativne y . Zapišite Hamiltonian in Hamiltonovi enačbi.

Generalizirana koordinata je φ : $x = a \cos \varphi$, $y = b \sin \varphi$.

Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2) = \frac{1}{2} m (a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi}^2$$

potencialna energija pa:

$$V = mgy = mgb \cdot \sin \varphi$$

Lagrangian je:

$$L = T - V = \frac{1}{2} m(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi}^2 - mgb \cdot \sin \varphi$$

Generalizirani impulz je enak:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}$$

$$p = m(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi}$$

Hamiltonian je:

$$H = p\dot{\varphi} - L = T + V = \frac{1}{2} m(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi) \dot{\varphi}^2 + mgb \sin \varphi$$

Pozor! Ni nujno, da je Hamiltonian vedno vsota kinetične in potencialne energije in da se energija ohranja, v našem primeru pa je tako. Vendar moramo Hamiltonian izraziti razen z generalizirano koordinato φ še z njenim impulzom p namesto odvoda $d\varphi/dt$:

$$H = \frac{p^2}{2m(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi)} + mgb \sin \varphi$$

Hamiltonian je torej funkcija formalno neodvisnih spremenljivk φ in p , čeprav sta seveda v gibalnih enačbah povezani s seboj. Hamiltonovi enačbi sta prve stopnje:

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi)}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = \frac{p^2(a^2 - b^2) \sin(2\varphi)}{2m(a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi)^2} - mgb \cos \varphi$$

Prva enačba je samo drugače zapisana enačba zgoraj pri definiciji impulza p . Vsebinsko nova je druga enačba, ki je v bistvu 2. Newtonov zakon. Vseeno pa moramo enačbi reševati skupaj. To gre le numerično. Poučno je omeniti še tretjo, manj znano Hamiltonovo enačbo:

$$\dot{H} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Njen fizikalni pomen je tale: Hamiltonova funkcija ali Hamiltonian se s časom spreminja (totalni časovni odvod na levi strani enačbe) samo, če je eksplicitno odvisna od časa kot dodatnega parametra (parcialni časovni odvod na desni strani enačbe). Če te eksplicitne odvisnosti ni, npr. v našem primeru, se Hamiltonian ohranja in ga istovetimo z energijo sistema. ♠

♥ Računski zgled 5.10 → 5.15

Telo lahko pod vplivom teže brez trenja drsi po navpični 3D-vijačnici s polmerom R in hodom (debelino navoja) h . Navpična os z je usmerjena navzdol, na začetku se telo nahaja na osi x , njegova začetna hitrost pa je nič. Že vnaprej sklepamo na ohranitev vsote kinetične in potencialne energije, zato zapišite kar energijo in iz njene ohranitve sklepajte o gibanju.

Generalizirana koordinata naj bo spet polarni kot φ : $x = R \cos \varphi$, $y = R \sin \varphi$, $z = k\varphi$, $k = h/(2\pi)$. Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m \left(R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right) \dot{\varphi}^2$$

potencialna energija pa:

$$V = -mg \frac{h}{2\pi} \varphi$$

Celotna energija je konstantna:

$$E = T + V = \frac{1}{2} m \left(R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2} \right) \dot{\varphi}^2 - mg \frac{h}{2\pi} \varphi$$

Tako dobimo direktno zvezo med kotom in njegovim časovnim odvodom (kotno hitrostjo):

$$\dot{\varphi} = \sqrt{\frac{2E/m + gh\varphi}{R^2 + (h/(2\pi))^2}}$$

Če je na začetku $\varphi = 0$ in hkrati $\omega = d\varphi/dt = 0$, potem velja tudi $E = 0$, tako da se NDE poenostavi:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \sqrt{\frac{gh\varphi/\pi}{R^2 + (h/(2\pi))^2}}$$

To je NDE z ločljivima spremenljivkama:

$$\int_0^\varphi \frac{d\varphi}{\sqrt{\varphi}} = \int_0^t \sqrt{\frac{gh/\pi}{R^2 + (h/(2\pi))^2}} dt$$

$$2\sqrt{\varphi} = \sqrt{\frac{gh/\pi}{R^2 + (h/(2\pi))^2}} t$$

Dobili smo odvisnost $\varphi(t)$ kot v računskem zgledu 1.13:

$$\varphi = \frac{g \frac{h}{2\pi}}{R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}} \cdot \frac{t^2}{2} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 5.11 → 5.16

Telo lahko pod vplivom teže brez trenja drsi po vbočenem delu elipsoidne ploskve $x^2/a^2 + y^2/b^2 + z^2/c^2 = 1$. Os z je usmerjena navzgor, gibanje telesa pa je omejeno na negativne z . Zapišite energijski zakon za ta primer.

Računamo z generaliziranimi koordinatama θ in φ , tako da velja:

$$x = a \sin \theta \cos \varphi, y = b \sin \theta \sin \varphi, z = c \cos \theta.$$

Kinetična energija je:

$$L = \frac{1}{2} m [f_1 \dot{\theta}^2 + f_2 \dot{\varphi}^2 + f_3 \dot{\theta} \dot{\varphi}]$$

Funkcije f_1, f_2 in f_3 so zapisane pri zgledu 5.11. Potencialna energija je:

$$V = mgz = mgc \cos \theta$$

Energija se ohranja:

$$E = \frac{1}{2} m [f_1 \dot{\theta}^2 + f_2 \dot{\varphi}^2 + f_3 \dot{\theta} \dot{\varphi}] + mgc \cos \theta$$

To je zveza med časovnima odvodoma obeh kotov. Za celotno rešitev problema pa moramo rešiti sistem 4 Hamiltonovih enačb prvega reda ali pa sistem dveh Euler-Lagrangeevih enačb drugega reda. ♠

♥ Računski zgled 5.12 → 5.17

Obravnavajte konično nihalo z energijskega vidika.

Geometrija nihala je prikazana na sliki 28. Na začetku ne naredimo nobene predpostavke o obliki 3D-tira gibanja in njeni 2D-projekciji na vodoravno ravnino (x, y) . Lego te ravnine iz praktičnih razlogov določimo z najnižjo lego uteži (točka B). Tej legi ustreza najkrajša razdalja med utežjo in osjo, $b = OB$. Najvišji legi uteži ustreza točka A z največjo razdaljo od osi vrtenja $a = XA$. Os x naj bo vzporedna z daljico XA, os y pa vsebuje daljico OB; os z gre potem po osi vrtenja. Višinsko razliko med točkama A in B označimo s $h = OX$, višinsko razliko med pritrdiščem vrvice P in točko O pa označimo s c . Zvezo med višinsko razliko h , razdaljama a in b ter dolžino vrvice ugotovimo s Pitagorovim izrekom. Velja: $l^2 = c^2 + b^2 = (c - h)^2 + a^2$, zato lahko izrazimo dolžini c in h :

$$c = \sqrt{l^2 - b^2}$$

$$h = \sqrt{l^2 - b^2} - \sqrt{l^2 - a^2}$$

Naprej si pomagamo s konceptoma energije in vrtilne količine. Zanimata nas ekstremni vrednosti hitrosti v_A (najmanjša hitrost) in v_B (največja hitrost) v točkah A in B. Ker sta v teh točkah maksimum in minimum višine tira, je tam navpična komponenta vektorja hitrosti enaka nič. Vektorja hitrosti v točkah A in B sta torej vodoravna, hkrati pa tudi pravokotna na zveznici XA in OB . Oglejmo si navor sile vrvice na utež in sile teže nanjo glede na središče krivulje O (izhodišče koordinatnega sistema). Ker je navor kot vektor pravokoten tako na silo kot na njeno ročico, leži navor obeh omenjenih sil na utež v vodoravni smeri. To pa pomeni, da nima navpične (z) komponente. Navpična komponenta tirne vrtilne količine uteži glede na os O se torej ohranja, kar ustreza konstantni ploščinski hitrosti projekcije gibanja telesa na ravnino (x, y) . Ploščinsko hitrost lahko preprosto izrazimo s hitrostma v_A in v_B :

$$\mu = \frac{dS}{dt} = \frac{1}{2}av_A = \frac{1}{2}bv_B$$

Hkrati pa zaradi ohranitve vsote kinetične in potencialne energije uteži velja:

$$v_A^2 + 2gh = v_B^2$$

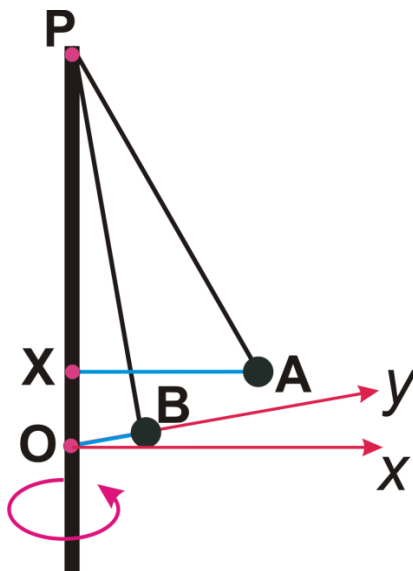
Nazadnje izračunamo obe hitrosti:

$$v_A = b\sqrt{\frac{2gh}{a^2 - b^2}}$$

$$v_B = a\sqrt{\frac{2gh}{a^2 - b^2}}$$

Ploščinska hitrost nihala glede na ravnino (x, y) je:

$$\mu = \frac{ab}{2} \cdot \sqrt{\frac{2gh}{a^2 - b^2}}$$



Slika 28: Gibanje koničnega nihala v splošnem

Pri majhnih kotih vrvice glede na navpičnico so dolžine a , b in h veliko manjše od dolžine vrvice l . Zato lahko zgoraj izpeljane enačbe nekoliko poenostavimo, upoštevamo pa še, da je projekcija tira gibanja uteži na vodoravno ravnico elipsa s polosema a in b ter ploščino $S = \pi ab$. Poenostavimo enačbo za h , tako da korenisko funkcijo razvijemo do drugega člena:

$$h = l \left[\sqrt{1 - (b/l)^2} - \sqrt{1 - (a/l)^2} \right]$$

$$h \approx l \left[\left(1 - \frac{1}{2} (b/l)^2 \right) - \left(1 - \frac{1}{2} (a/l)^2 \right) \right] = \frac{a^2 - b^2}{2l}$$

Tedaj se poenostavita tudi enačbi za ekstremni hitrosti:

$$v_A \approx b \sqrt{\frac{g}{l}} \equiv b \omega_{\text{nih}} \quad v_B \approx a \sqrt{\frac{g}{l}} \equiv a \omega_{\text{nih}}$$

kjer je ω_{nih} krožna frekvenca nihanja matematičnega nihala pri majhnih kotnih amplitudah. Ploščinska hitrost nihala je $\mu \approx ab \omega_{\text{nih}}/2$.

Obhodni čas je neodvisen or razmerja polosi:

$$t_0 = \frac{S}{\mu} \approx \frac{\pi ab}{ab \omega_{\text{nih}}/2} = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$$

Kot je bilo pričakovati, se ta čas ujema z nihajnim časom matematičnega nihala. ♠

VERJETNOST

Verjetnost navadno pripišemo dogodkom, za katere ne vemo vnaprej, ali se bodo zgodili. V znanosti pa še pogosteje uporabljamo verjetnostni račun za spremenljivke (matematične, fizikalne in druge), ki imajo lahko več kot eno vrednost in so na nek način (za nas) naključne. Pri tem moramo razlikovati med spremenljivkami z diskretnim in zveznim spektrom [11]. V prvem primeru posameznim vrednostim naključne spremenljivke direktno pripišemo verjetnost, v drugem primeru pa računamo z verjetnostno gostoto.

Naključna spremenljivka z diskretnim spektrom

♥ Računski zgled 6.1

V škatli so 3 rdeče in 7 zelenih krogel. Na slepo izvlečemo dve (prve ne vrnemo v škatlo). Kolikšne so verjetnosti, da sta obe rdeči, da sta obe zeleni, da je ena rdeča in ena zelena (ne glede na vrstni red)?

Uporabili bomo kombinatorni račun in ne neposredno verjetnostnih zakonov. Ker vrstni red izvlečenih krogel ni pomemben, bomo računali število kombinacij: $C(n, m)$ je število načinov, kako od n različnih objektov izberemo $m < n$. Velja:

$$C(n, m) = \frac{n!}{m!(n-m)!} = \frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-m+1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot m}$$

Seveda pri tem tudi krogle enake barve razlikujemo med seboj kot individualne objekte. Število vseh možnih kombinacij, da od 10 objektov izberemo dva, je $X = C(10, 2) = 10 \cdot 9 / (1 \cdot 2) = 45$. Število vseh možnih kombinacij, da od 3 rdečih krogel izberemo dve, je $X(\text{RR}) = C(3, 2) = 3$. Število vseh možnih kombinacij, da od 7 zelenih krogel izberemo dve, je $X(\text{ZZ}) = C(7, 2) = 21$. Število vseh možnih kombinacij, da od 3 rdečih krogel izberemo eno in prav tako od 7 zelenih eno, je $X(\text{RZ}) = C(3, 1) \cdot C(7, 1) = 21$. Vse kombinacije so enako verjetne, zato so verjetnosti za opisane tri možnosti ustrezni količniki:

$$P(\text{RR}) = \frac{X(\text{RR})}{X} = \frac{3}{45} = \frac{1}{15}$$

$$P(\text{ZZ}) = \frac{X(\text{ZZ})}{X} = \frac{21}{45} = \frac{7}{15}$$

$$P(\text{RZ}) = \frac{X(\text{RZ})}{X} = \frac{21}{45} = \frac{7}{15}$$

Preskus: vsota vseh treh verjetnosti je res 1. ♠

♥ Računski zgled 6.2

Pri družabni igri »jamb«, kjer mečemo pet igralnih kock, je ena od mogočih kombinacij »ful«, to je 3 enake številke + 2 enaki številki, na primer 5, 5, 5, 4, 4. Kocke mečemo vse hkrati, tako da vrstni red številke ni pomemben. Če s prvim metom 5 kock še nismo zadovoljni, lahko met še dvakrat popravljamo, to je, kocke z zelenimi številkami pustimo na mizi in mečemo preostale. Po prvem metu imamo številke 5, 5, 4, 4, 1. Odločimo se, da bomo poskusili doseči ful, zato kocko z enko mečemo ponovno, največ dvakrat. Kolikšna je verjetnost za ful?

Dogodek, da v prvem metu od dveh zadenemo 4 ali 5, označimo z A. Njegova verjetnost je $1/3$. Če se zgodi A, nismo, sicer mečemo še enkrat. Verjetnost za ful je: $P = P(A) + P(\text{ne } A) \cdot P(A) = 1/3 + 2/3 \cdot 1/3 = 5/9$. Verjetnost je več kot polovica in se splača poskusiti. ♠

♥ Računski zgled 6.3

Strelec v povprečju na tekmovanjih zadene črni krog v tarči v 70 % primerov. Kolikšna je verjetnost, da bo pri 10 strelih zadel v črno natančno 8-krat?

Označimo verjetnost za zadetek v črno $p = 0,7$. Računamo z binomsko porazdelitvijo:

$$P(8, 10) = \binom{10}{2} p^8 (1-p)^2 = \frac{10 \cdot 9}{1 \cdot 2} p^8 (1-p)^2 = 23,35 \% \spadesuit$$

♥ Računski zgled 6.4

Pri Poissonovi porazdelitvi obravnavamo število navadno redkih dogodkov (v določenem času, na določenem območju itd.), če poznamo statistično povprečje tega števila, ki smo ga ugotovili z dolgotrajnim opazovanjem. Naj bo povprečno število dogodkov enako a , in to v splošnem ni naravno število. Tedaj je verjetnost, da se bo zgodilo ravno n dogodkov (n je naravno število ali pa nič), enaka:

$$P(n) = \frac{a^n}{n!} \cdot \exp(-a)$$

Poissonovo porazdelitev lahko izpeljemo iz binomske v limitnem primeru, ko je n lahko poljubno veliko naravno število. Naj bo povprečno število potresov na nekem območju v enem letu enako $a = 2,45$. Izračunajte verjetnosti $P(n)$ za prvih nekaj vrednosti n vključno z $n = 0$ ter poiščite maksimum $P(n)$. Kolikšna je verjetnost, da bo v enem letu to območje doživelo vsaj 3 potrese? Dokažite, da je vsota verjetnosti po vseh mogočih n res enaka 1.

Verjetnosti $P(n)$ za prvih nekaj n so:

$$P(0) = \exp(-a) = 8,63 \%$$

$$P(1) = a \cdot \exp(-a) = a \cdot P(0) = 21,14 \%$$

$$P(2) = \frac{a^2}{2} \cdot \exp(-a) = \frac{a}{2} \cdot P(1) = 25,90 \%$$

$$P(3) = \frac{a^3}{6} \cdot \exp(-a) = \frac{a}{3} \cdot P(2) = 21,15 \%$$

$$P(4) = \frac{a^4}{24} \cdot \exp(-a) = \frac{a}{4} \cdot P(3) = 12,95 \%$$

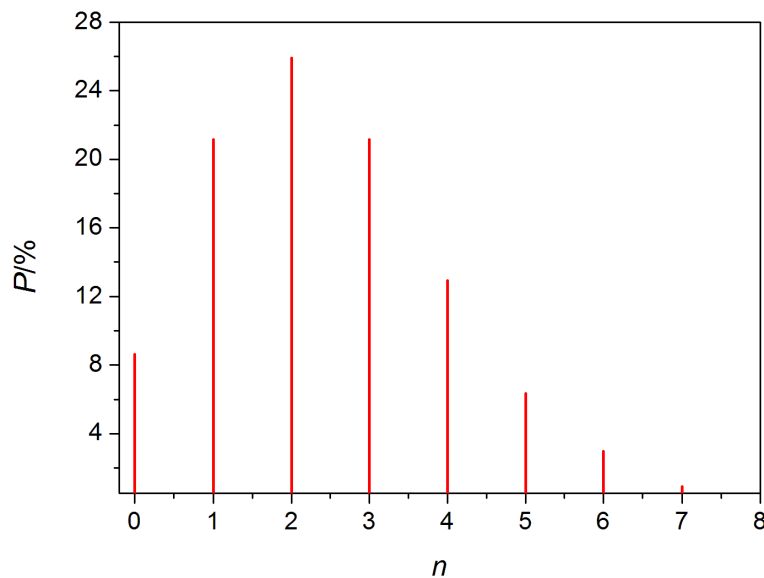
Iz nakazanega postopka je razvidno tudi v splošnem, pri katerem številu n je verjetnost P največja – to je na celo število navzdol zaokroženo (odrezano) število a . Na primer, tudi če bi bil a enak 2,99, bi bil maksimum verjetnosti pri $n = 2$. Verjetnost za vsaj tri potrese najhitreje izračunamo, če upoštevamo, da ne gre za 0, 1 ali 2 potresa:

$$P(n \geq 3) = 1 - P(0) - P(1) - P(2) = 44,33 \%$$

Dokaz za pravilnost vsote verjetnosti:

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(n) = \exp(-a) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} = \exp(-a) \cdot \exp(a) = 1$$

Na sliki 29 je prikazan »črtasti« spekter verjetnosti za izračunani zgled.



Slika 29: Verjetnosti pri Poissonovi porazdelitvi ♠

♥ Računski zgled 6.5

Hkrati vržemo N_{kock} kock ($N_{\text{kock}} = 2, 3, 4, \dots$). Poiščite verjetnosti za različne vsote pik na vseh kockah.

Dokler imamo res zelo majhno število kock, npr. 2 ali 3, se da verjetnosti še nekako izračunati na pamet. Za več kock pa postane kombinatorni problem tako zapleten, da ga raje prepustimo računalniku. Tu si oglejmo, kako izračunamo na pamet verjetnosti za vsote pik na treh kockah. Najpreprosteje jih izračunamo kot kvocient pravih variacij in vseh mogočih variacij. Vseh variacij je 6^3 . Prave variacije za vsoto npr. $S = 5$ pa so naslednje: 113, 131, 311, 122, 212 in 221. Šest jih je, torej je $P(S = 5) = 6/6^3 = 1/36$. Čim več je kock, tem več variacij številok da prave vrednosti za S . Spodaj je podana programska koda v Pascalu za primer 5 kock.

```

program kocke;
Uses SysUtils;

procedure delaj ;
var izhod : text ;
    i1, i2, i3, i4, i5, i6, i7, i8, i9, i10 : integer ;
    Nkock, Nmax, vsota : integer ;
    P : array[1..100] of longint ;
    Preal, Pmax, x : real ;
    pot6 : longint ;
begin
    Nkock := 5 ;
    Nmax := 6*Nkock ;
    Pmax := 0 ;
    for i1 := (Nkock-1) to (Nmax+1) do P[i1] := 0 ;
    pot6 := 1 ;
    for i1 := 1 to Nkock do pot6 := 6*pot6 ;

    for i1 := 1 to 6 do
    for i2 := 1 to 6 do
    for i3 := 1 to 6 do
    for i4 := 1 to 6 do
    for i5 := 1 to 6 do
        begin
            vsota := i1+i2+i3+i4+i5 ;
            P[vsota] := P[vsota]+1
        end ;

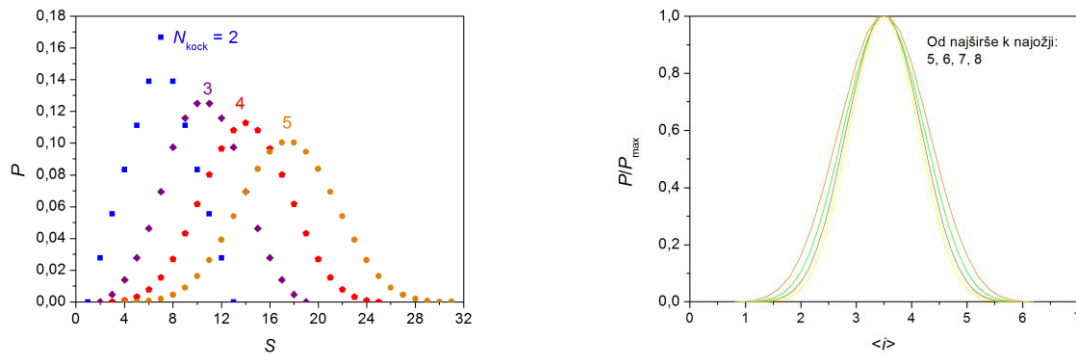
    assign(izhod,'P.dat') ; rewrite(izhod) ;
    for i1 := (Nkock-1) to (Nmax+1) do begin
        Preal := 1.0*P[i1]/pot6 ;
        if (Preal > Pmax) then Pmax := Preal ;
        writeln(izhod, ' ', i1:3, ' ', Preal:8:5)
    end ;
    close(izhod) ;

    assign(izhod, 'Pnorm.dat') ; rewrite(izhod) ;
    for i1 := (Nkock-1) to (Nmax+1) do begin
        x := 1.0*i1/Nkock ;
        Preal := 1.0*P[i1]/(pot6*Pmax) ;
        writeln(izhod, ' ', x:8:4, ' ', Preal:8:5)
    end ;
    close(izhod) ;
end ;

{ glavni program }
begin
    delaj ;
end.

```

Poučni rezultati so prikazani na sliki 30. Čim večje je število kock, tem bolj grafi spominjajo na Gaussovo funkcijo. Tu opazimo nekak prehod iz diskretne v zvezno porazdelitev. Z večjim številom kock se največja mogoča vsota pik povečuje, zato se širi in hkrati niža porazdelitvena funkcija. Za bolj neposredno primerjavo so na desni sliki še grafi drugače normaliziranih porazdelitev pri večjem številu kock, tako da je vrh pri $P = 1$, intervali na abscisni osi pa so deljeni s številom kock (tako da številka na tej osi ustreza povprečnemu številu pik na vseh kockah). Grafi so si podobni, le širine se spreminjajo; seveda to ni prava normalizacija verjetnostne porazdelitve.



Slika 30: Porazdelitvene funkcije za vsoto pik na več kockah. Edino pri dveh kockah imamo trikotno žagasto funkcijo, že pri treh pa porazdelitev spominja na normalno.

Naključna spremenljivka z zveznim spektrom

♥ Računski zgled 6.6

Kolikšna sta pričakovana vrednost in relativna standardna deviacija naključne spremenljivke x s konstantno verjetnostno gostoto na intervalu $(0, a)$: $p(x) = 1/a$?

$$\langle x \rangle = \int_0^a xp(x)dx = \frac{1}{a} \int_0^a x dx = \frac{a}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a x^2 p(x)dx = \frac{1}{a} \int_0^a x^2 dx = \frac{a^2}{3}$$

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4}} = \frac{a}{2\sqrt{3}}$$

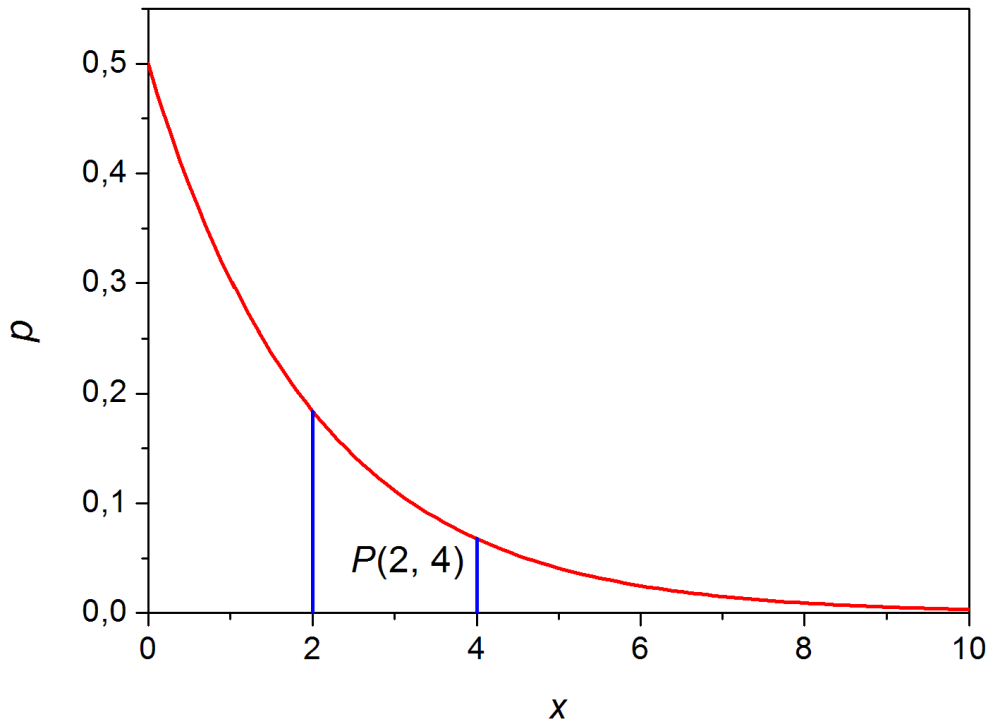
Relativna standardna deviacija je:

$$\frac{\delta x}{\langle x \rangle} = \frac{1}{\sqrt{3}} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 6.7

Porazdelitev neke naključne fizikalne spremenljivke x opisuje eksponentna verjetnostna gostota (slika 31): $p(x) = C \exp(-x/x_0)$. Pri tem je x_0 značilni (skalni) parameter (z enako fizikalno enoto kot x), C

ustrezna normalizacijska konstanta, dovoljene vrednosti x pa ležijo v območju $0 \leq x < \infty$. Pomen funkcije $p(x)$ je naslednji: $p(x)dx$ je (majhna) verjetnost, da bo naključno izbrana vrednost spremenljivke x ležala v intervalu $(x, x + dx)$, če je dx zelo majhna širina intervala. Normalizirajte funkcijo $p(x)$ s pravo vrednostjo konstante C . Kolikšna je verjetnost, da se x nahaja v območju $0 \leq x \leq x_0$? Kaj pa v območju $x_0 \leq x \leq 2x_0$? Kolikšna je povprečna vrednost x ? Kolikšna je povprečna vrednost x^2 ? Kolikšna je standardna deviacija x ?



Slika 31: Eksponentna porazdelitvena funkcija z brezdimenzijsko spremenljivko x ; $x_0 = 2$. Nakazan je račun verjetnosti za $x_0 \leq x \leq 2x_0$: $P(2, 4)$ je ploščina lika med abscisno osjo, grafom funkcije in navpičnima modrima črtama.

Geometrijski pomen dane porazdelitvene funkcije je prikazan na sliki. Če pomeni $p(x)dx$ verjetnost za nahajanje spremenljivke x v ozkem intervalu, izračunamo verjetnost za širši interval z integralom. Na primer, verjetnost za $a \leq x \leq b$ je enaka:

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b p(x)dx$$

Verjetnost, da bomo našli x kjer koli na dovoljenem območju vrednosti, je enaka 1, zato v skladu s tem normaliziramo integral po celotnem območju spremenljivke. V našem primeru:

$$\int_0^{\infty} C \exp(-x/x_0) dx = 1$$

$$-Cx_0 \exp(-x/x_0) \Big|_0^{\infty} = 1$$

$$Cx_0 = 1 \rightarrow C = \frac{1}{x_0}$$

Glede na definicijo lahko zapišemo tudi $p(x) = dP/dx$. Izračunajmo verjetnost za podani območji:

$$P(0 \leq x \leq x_0) = \frac{1}{x_0} \int_0^{x_0} \exp(-x/x_0) dx = -\exp(-x/x_0) \Big|_0^{x_0} = 1 - \frac{1}{e}$$

$$P(x_0 \leq x \leq 2x_0) = \frac{1}{x_0} \int_{x_0}^{2x_0} \exp(-x/x_0) dx = -\exp(-x/x_0) \Big|_{x_0}^{2x_0} = \frac{1}{e} - \frac{1}{e^2}$$

$$P(x_0 \leq x \leq 2x_0) = \frac{1}{e} \cdot P(0 \leq x \leq x_0)$$

Podobno bi ugotovili za naslednje intervale širine x_0 . Povprečno (pričakovano) vrednost katere koli funkcije $f(x)$ lahko s podano verjetnostno gostoto $p(x)$ izračunamo z naslednjim integralom:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x) p(x) dx$$

kjer sta x_{\min} in x_{\max} najmanjša in največja dovoljena vrednost spremenljivke x . V našem primeru bomo skušali izraziti povprečje $\langle x^n \rangle$ za poljubni naravni eksponent n , da ne ponavljamo računa.

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{x_0} \int_0^{\infty} x^n \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) dx$$

Pomagamo si z integriranjem per partes, zato da znižamo potenco faktorja x^n za 1: $u = x^n$, $dv = \exp(-x/x_0) \rightarrow du = nx^{n-1}$, $v = -x_0 \exp(-x/x_0)$. Tako izračunamo:

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{x_0} \left[-x_0 x^n \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) \Big|_0^{\infty} + nx_0 \int_0^{\infty} x^{n-1} \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) dx \right]$$

Prvi, integrirani del, je enak nič pri obeh mejah, zato velja:

$$\langle x^n \rangle = nx_0 \langle x^{n-1} \rangle$$

Prišli smo do koristne rekurzivne relacije, zato lahko računamo po vrsti: $\langle x^0 \rangle = 1$; $\langle x \rangle = x_0 \cdot \langle x^0 \rangle = x_0$, $\langle x^2 \rangle = 2x_0 \cdot \langle x \rangle = 2x_0^2$; $\langle x^3 \rangle = 3x_0 \cdot \langle x^2 \rangle = 6x_0^3$ itd. Standardno deviacijo lahko izračunamo direktno iz povprečij $\langle x \rangle$ in $\langle x^2 \rangle$:

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{2x_0^2 - x_0^2} = x_0$$

Torej je pri eksponentni porazdelitvi standardna deviacija spremenljivke kar enaka njeni povprečni vrednosti. To seveda lahko s primernimi parametri dosežemo tudi pri drugih porazdelitvah z vsaj dvema prostima parametroma, npr. pri Gaussovi. ♠

♥ Računski zgled 6.8

Za spektralno gostoto sevanja črnega telesa s površinsko temperaturo T velja enačba:

$$\frac{dj}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1 \right)}$$

Pomen simbolov: j je gostota svetlobnega toka $j = P/S$, λ je valovna dolžina, h Planckova konstanta, c svetlobna hitrost, k pa Boltzmannova konstanta. Temperatura površja zvezde je 8 000 K. Pri kolikšni valovni dolžini ima spektralna gostota $dj/d\lambda$ maksimum? Kolikšna je gostota svetlobnega toka samo v intervalu $\lambda_m \pm 50$ nm okrog maksimuma λ_m ? Kolikšen del celotne gostote svetlobnega toka je to?

Preden rešimo nalogo, še opozorilo. Funkcija $dj/d\lambda$ ima analogen pomen kot verjetnostna gostota $p(x)$ v prejšnjem zgledu, a ne povsem enakega. Z integriranjem $p(x)$ po nekem intervalu smo dobili verjetnost, medtem ko z integriranjem $dj/d\lambda$ po intervalu valovnih dolžin dobimo fizikalno količino gostoto toka v območju teh valovnih dolžin. Enota za spektralno gostoto je W/m^3 . Vendar pa lahko z ustrezno normalizacijo tudi iz spektralne gostote naredimo neke vrste verjetnostno gostoto, kot bomo pokazali v nadaljevanju.

Maksimum spektralne gostote podaja Wienov zakon: $\lambda_m = k_w/T = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m K}/(8\,000 \text{ K}) = 362 \text{ nm}$. Označimo $\Delta\lambda = 50 \text{ nm}$. Gostoto j v območju $\lambda_m \pm 50 \text{ nm}$ formalno izračunamo z integralom:

$$j = \int_{\lambda_m - \Delta\lambda}^{\lambda_m + \Delta\lambda} \left(\frac{dj}{d\lambda} \right) d\lambda$$

Izračunati ga moramo numerično, saj obstaja analitična rešitev samo za celotno integracijsko območje $(0, \infty)$, od koder tudi izhaja Stefanov zakon. Vendar, če je integracijski interval dovolj ozek, lahko integral izračunamo približno: $j \approx (dj/d\lambda)(\lambda = \lambda_m) \cdot 2\Delta\lambda$. To je takrat, ko lahko ozko območje lika pod grafom nadomestimo kar s pravokotnikom, torej če se spektralna gostota v danem intervalu valovnih dolžin le malo spreminja. Primerjajmo torej najprej $dj/d\lambda$ pri vseh treh ključnih valovnih dolžinah: 312 nm, 362 nm in 412 nm. Spektralno gostoto je bolj praktično napisati v obliki:

$$\frac{dj}{d\lambda} = \frac{2\pi(kT)^5}{h^4 c^3} \cdot \frac{x^5}{e^x - 1} \equiv A \cdot \frac{x^5}{e^x - 1}$$

kjer je $x = hc/(kT\lambda)$. Dovolj je opazovati le relativne razlike v spektralni gostoti zaradi različnih valovnih dolžin, torej primerjamo samo spreminjanje izraza $x^5/(e^x - 1)$. Pri omenjenih valovnih dolžinah je ta faktor enak po vrsti 20,07, 21,20 (maksimum) in 20,37. Vzemimo kar aritmetično sredino vseh treh vrednosti: 20,55. Upravičeno lahko uporabimo približek: $j = 20,55 \cdot A \cdot 100 \text{ nm} = 4,13 \cdot 10^7 \text{ W/m}^2$. Celotno gostoto svetlobnega toka za vse valovne dolžine j_{tot} izračunamo po Boltzmann-Stefanovem zakonu: $j_{\text{tot}} = \sigma T^4 = 2,32 \cdot 10^{10} \text{ W/m}^2$. Razmerje j/j_{tot} je enako $1,78 \cdot 10^{-3}$. Če spektralno

gostoto normaliziramo (delimo s faktorjem j_{tot}), dobimo zares porazdelitveno funkcijo po valovnih dolžinah:

$$p_\lambda(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\sigma T^4 \lambda^5 \left(\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1 \right)}$$

tako da velja:

$$\int_0^\infty p_\lambda(\lambda) d\lambda = 1$$

Omenimo še, da porazdelitvene funkcije po frekvencah (namesto po valovnih dolžinah) ne dobimo preprosto tako, da v funkciji $p_\lambda(\lambda)$ nadomestimo $\lambda = c/\nu$. Vendar pa vseeno lahko izvedemo pretvorbo $p_\lambda(\lambda) \rightarrow p_\nu(\nu)$ s preprostim trikom:

$$p_\nu(\nu) = \frac{dP}{d\nu} = \frac{dP}{d\lambda} \cdot \left| \frac{d\lambda}{d\nu} \right| = p_\lambda(\lambda) \cdot \left| \frac{d(c/\nu)}{d\nu} \right| = p_\lambda(\lambda) \cdot \frac{c}{\nu^2} = p_\lambda\left(\frac{c}{\nu}\right) \cdot \frac{c}{\nu^2}$$

Torej ni dovolj le substitucija $\lambda = c/\nu$, temveč moramo funkcijo p_λ pomnožiti še s faktorjem c/ν^2 . Rezultat je:

$$p_\nu(\nu) = \frac{2\pi h \nu^3}{\sigma T^4 c^2 \left(\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right)}$$

tako da velja:

$$\int_0^\infty p_\nu(\nu) d\nu = 1 \spadesuit$$

♥ Računski zgled 6.9

Pri gibanju molekul idealnega plina v zaprtem sistemu s homogeno temperaturo T velja za njihovo hitrostno porazdelitev Maxwelllova porazdelitvena funkcija. Če opazujemo samo eno komponento hitrosti, npr. v_x , je ustrezna porazdelitev Gaussova (normalna) z vrhom pri $v_x = 0$:

$$p(v_x) = C \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right]$$

kjer je C normalizacijska konstanta, m masa molekule in k Boltzmannova konstanta. Kolikšne so naslednje povprečne (pričakovane) vrednosti: $\langle v_x \rangle$, $\langle |v_x| \rangle$ in $\langle v_x^2 \rangle$?

En odgovor je na dlani: $\langle v_x \rangle = 0$, ker je $p(v_x)$ soda funkcija, če pa jo pri računu povprečja pomnožimo z v_x , je pod integralom liha funkcija. V drugih dveh primerih gre za integral sode funkcije, zato lahko integracijski interval takoj skrčimo od $(-\infty, \infty)$ na $(0, \infty)$. V principu bi morali pred računom raznih

povprečij izračunati konstanto C . Vendar nam tega ni treba narediti, saj nam razmislek o normalizaciji verjetnostne gostote pove, da lahko npr. pričakovano vrednost $\langle |v_x| \rangle$ izračunamo direktno takole:

$$\langle |v_x| \rangle = \frac{\int_0^{\infty} v_x \cdot \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x}{\int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x}$$

Integral v imenovalcu spada med dobro znane določene integrale:

$$\int_0^{\infty} \exp(-t^2) dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

integral v števcu pa izračunamo z uvedbo nove integracijske spremenljivke $u = -mv_x^2/(2kT)$. Rezultat je:

$$\langle |v_x| \rangle = \sqrt{\frac{2kT}{\pi m}}$$

Druga pričakovana vrednost v naši nalogi je:

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{\int_0^{\infty} v_x^2 \cdot \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x}{\int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x}$$

Pri integralu v števcu si zdaj pomagamo z metodo per partes, tako da ga direktno povežemo z integralom v imenovalcu. Rezultat je zato zelo preprost:

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{kT}{m} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 6.10

Maxwellova porazdelitvena funkcija iz prejšnjega zgleda je za vse tri komponente hitrosti enaka:

$$p(v_x, v_y, v_z) = C^3 \exp\left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT}\right]$$

kar pomeni, da se vse tri komponente hitrosti vedejo kot neodvisne naključne spremenljivke. Maxwellova porazdelitev v ožjem pomeni se nanaša na velikosti vektorja hitrosti, neodvisno od smeri gibanja molekul. Izpeljite jo 3D Maxwellove porazdelitve zgoraj. Kolikšni sta pričakovani vrednosti $\langle v \rangle$ in $\langle v^2 \rangle$?

Za izpeljavo moramo najprej razumeti pomen funkcije $p(v_x, v_y, v_z)$. Majhna verjetnost, da najdemo komponente hitrosti hkrati v majhnih intervalih $(v_x, v_x + dv_x)$, $(v_y, v_y + dv_y)$, $(v_z, v_z + dv_z)$, je enaka:

$$dP = C^3 \exp\left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT}\right] dv_x dv_y dv_z$$

Ko računamo verjetnost za širše območje vrednosti komponent hitrosti, moramo torej funkcijo p integrirati po vseh treh komponentah. Iz kartezičnega koordinatnega sistema preidimo v sferični. Pretvorba je takšna kot navadno, le da namesto koordinat x , y in z pišemo ustrezne komponente hitrosti. »Prostorninski element« $dv_x dv_y dv_z$ nadomestimo v sferičnem zapisu z izrazom $v^2 \sin \theta dv d\theta d\varphi$, kjer velja $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$. Torej je 3D hitrostna porazdelitev v sferičnem zapisu podana takole:

$$dP = C^3 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] v^2 \sin \theta dv d\theta d\varphi$$

Bistvo prehoda v ožjo Maxwellovo porazdelitev je zdaj v tem, da ker nas kota ne zanimata, temveč le hitrost v , povprečimo porazdelitveno funkcijo po kotih, tako da jo integriramo po njiju. Integral je takšen kot pri računu površine krogle, torej dobimo le dodatni faktor 4π . Tako zapišemo:

$$dP = 4\pi C^3 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] v^2 dv$$

To pa pomeni, da je sama verjetnostna gostota po hitrostih:

$$p(v) = 4\pi C^3 v^2 \cdot \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right]$$

Bodite pozorni na dodatni faktor v^2 pred eksponentno funkcijo; ta funkcija ni več Gaussova! S to porazdelitveno funkcijo lahko izračunamo razne pričakovane vrednosti potenc hitrosti. Povprečja $\langle v^2 \rangle$ nam pravzaprav sploh ni treba računati, ker si zaradi ekvivalentnosti smeri v prostoru pomagamo z računom iz prejšnjega zglada:

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \rightarrow \langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle = 3\langle v_x^2 \rangle = 3kT/m$$

Namesto tega navadno zapišemo neke vrste povprečno hitrost:

$$v_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$$

Oznaka RMS (root mean square) pomeni, da to ni prava povprečna hitrost, temveč koren iz povprečja kvadrata hitrosti, kar ni isto. Hitrost v_{RMS} je pomembna v statistični termodinamiki, npr. pri razumevanju ekviparticijskega teorema, kjer so pomembne kinetične energije molekul. Povprečno hitrost v v navadnem pomenu izračunamo s funkcijo $p(v)$ takole:

$$\langle v \rangle = \frac{\int_0^{\infty} v^3 \cdot \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x}{\int_0^{\infty} v^2 \cdot \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x}$$

Spet si pomagamo z metodo per partes, rezultat pa je:

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} < v_{\text{RMS}}$$

Omenimo še eno hitrost, tisto, pri kateri ima funkcija $p(v)$ maksimum:

$$v_{\text{max}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

Ta je najmanjša od vseh treh. ♠

♥ Računski zgled 6.11

Imejmo dve Gaussovi porazdelitveni funkciji, eno za spremenljivko x in drugo za y :

$$p_1(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right]$$

$$p_2(y) = \frac{1}{\sigma_y \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right]$$

Vsota naključnih spremenljivk x in y je nova naključna spremenljivka z : $z = x + y$. Dokažite, da je tudi njena porazdelitvena funkcija Gaussova in poiščite njena parametra.

V splošnem je porazdelitvena funkcija vsote konvolucija porazdelitvenih funkcij sumandov:

$$p(z) = \int_{-\infty}^{\infty} p_1(t) p_2(z-t) dt$$

Vstavimo v integral naši Gaussovi funkciji:

$$p(z) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(t-x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(z-t-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right] dt$$

Podrobnosti so dolgovезne, zato samo nakažimo nadaljnji postopek, ki ga lahko bralec sam izvede. Najprej damo oba ulomka v oglatem oklepaju na skupni imenovalec. Potem združimo člene po potencah integracijske spremenljivke: t^2 , t in 1. Člena s t^2 in t dopolnimo do popolnega kvadrata, kar ostane in je neodvisno od časa, pa izpostavimo pred integral. Nato uvedemo novo integracijsko spremenljivko u , tako da dobimo preprost integral $\int \exp(-u^2) du$ v mejah od $-\infty$ do ∞ , ki ima vrednost $\pi^{1/2}$. Pomnožimo faktorje in končni rezultat je zelo preprost:

$$p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}} \exp\left[-\frac{(z-x_0-y_0)^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right]$$

Res smo dobili Gaussovo funkcijo s povprečno vrednostjo spremenljivke $z_0 = x_0 + y_0$ in s standardno deviacijo po »Pitagorovem izreku«: $\sigma_z^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$.

Ta rezultat je za statistiko izjemno pomemben in ga lahko z indukcijo takoj posplošimo na vsoto več kot dveh sumandov. V posebnem primeru naj gre za isto naključno spremenljivko x , ki jo seštejemo N -krat. Pozor: čeprav gre za isto spremenljivko, so vrednosti sumandov različne, saj sumande vzamemo za neodvisne med seboj in x je pač naključna spremenljivka. Če formalno definiramo vsoto $S_N = x + x + \dots + x$ (N sumandov), potem je porazdelitvena funkcija vsote naslednja:

$$p(S_N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(N\sigma_x^2)}} \exp\left[-\frac{(S_N - Nx_0)^2}{2N\sigma_x^2}\right]$$

Formalno lahko ta izraz prepisemo takole:

$$p(S_N) = \frac{1}{(\sqrt{N} \cdot \sigma_x) \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(S_N - Nx_0)^2}{2(\sqrt{N} \cdot \sigma_x)^2}\right]$$

To pa pomeni: standardna deviacije vsote ni N -krat večja od standardne deviacije enega člena, temveč samo $N^{1/2}$ -krat večja. Sedaj vsoto S_N delimo z N in definiramo »statistično povprečje po N meritvah spremenljivke x «: $x_p = S_N/N$. Takoj ugotovimo naslednje: standardna deviacija statističnega povprečja je N -krat manjša od standardne deviacije vsote, ali: standardna deviacija statističnega povprečja x pri N meritvah je $N^{1/2}$ -krat manjša od standardne deviacije same spremenljivke x . ♠

MONTE CARLO SIMULACIJE

Pri simulacijah Monte Carlo (MC) uporabljamo računalniški generator naključnih števil (GNŠ) za simulacijo poljubne diskretne ali zvezne porazdelitve [10]. Vsakič, ko se program sklicuje na GNŠ, mu le-ta vrne novo in na videz naključno racionalno (za vse praktične namene realno) število med 0 in 1. To število bomo označevali z r (random), verjetnostna porazdelitvena funkcija pa je $p_r(r) = 1$. Z ustrezno funkcijsko pretvorbo $r \rightarrow x$ potem simuliramo dano porazdelitveno gostoto $p_x(x)$ za fizikalno naključno spremenljivko x . Kako to naredimo, bomo prikazali pri konkretnih zgledih.

♥ Računski zgled 7.1

Z GNŠ simuliramo met igralne kocke. Kako bomo programirali met kocke 10^4 -krat, prešteli število ponovitev posameznih pik, povprečno število pik in standardno deviacijo?

To je najpreprostejši zgled MC-simulacije: končna diskretna porazdelitev z enakimi verjetnostmi za vse vrednosti diskretno porazdeljene spremenljivke; v našem primeru je to kar število pik od 1 do 6. GNŠ nam da številko r , ustrezno število pik na kocki pa označimo z x . V primeru $0 < r < 1/6$ naj bo $x = 1$, v primeru $1/6 < r < 2/6$ naj bo $x = 2$ in tako do 6. Prireditvev $r \rightarrow x$ se da napisati z enačbo: $x = \text{trunc}(6r) + 1$. Funkcija »trunc« (truncate) pomeni vedno zaokrožanje navzdol. Potem se vsi omenjeni intervali števila r pravilno pretvorijo v številko x , npr. $r = 0,1 \rightarrow x = 1$ (ker je $\text{trunc}(0,6) = 0$), $r = 0,25 \rightarrow x = 2$ (ker je $\text{trunc}(6 \cdot 0,25) = \text{trunc}(1,5) = 1$) itd. Prilagamo podprogram za 10 000 »metov« in izid takšne simulacije.

```
const N = 10000 ;
```

```
procedure delaj ;  
var x,i : integer ;  
    Nx : array[1..6] of integer ;  
    r,xp,xp2,xstd : real ;  
begin  
    for i:= 1 to 6 do Nx[i]:=0 ;  
    xp:=0 ; xp2:=0 ;  
    for i:= 1 to N do begin  
        r:=random ;  
        x:=trunc(6*r)+1 ;  
        if (x<1) then x:=1 else if (x>6) then x:=6 ;  
        Nx[x]:=Nx[x]+1  
    end ;  
    for i:= 1 to 6 do begin  
        writeln('Metov za ',i:2,', ',Nx[i]:4) ;  
        xp:=xp+i*Nx[i] ;  
        xp2:=xp2+i*i*Nx[i]  
    end ;  
    xp:=xp/N ;  
    xp2:=xp2/N ;  
    xstd:=sqrt(xp2-sqr(xp)) ;
```

```
writeln('Povp : ',xp:8:4);
writeln('Std : ',xstd:8:4);
readln(i);
end;
```

```
C:\Users\Uporabnik\milan\pedag\snow\m
Metov za 1: 1714
Metov za 2: 1593
Metov za 3: 1705
Metov za 4: 1689
Metov za 5: 1660
Metov za 6: 1639
Povp : 3.4905
Std : 1.7065
```

Naj omenimo, da je povprečje števila pik pri idealni statistiki (zelo veliko število metov in seveda odličen GNŠ) enako 3,5. Ustrezno standardno deviacijo izračunamo takole:

$$\text{std}(x) = \sqrt{\sum_{x=1}^6 P(x)(x-3,5)^2} = \sqrt{\frac{1}{6} \sum_{x=1}^6 (x-3,5)^2} = \sqrt{\frac{1}{3} \sum_{x=1}^3 (x-3,5)^2} \approx 1,708 \spadesuit$$

♥ Računski zgled 7.2

Z GNŠ simuliramo Poissonovo porazdelitev. Naj bo npr. $a = 4,25$. Poiščite zvezo med naključno številko r in številom dogodkov x .

Spet gre za diskretno porazdeljeno spremenljivko x , to je naravno število ali 0. Problem je težji kot pri prejšnjem zgledu, prvič, ker je verjetnost odvisna od spremenljivke x , drugič, ker ima x neskončno mnogo vrednosti. Sedaj je praktično izvesti MC-simulacijo na naslednji način. Iz verjetnosti $P(n)$ izračunamo kumulativne verjetnosti $P_{\text{kum}}(n)$, to je vsota vseh verjetnosti do indeksa n :

$$P_{\text{kum}}(n) = \sum_{i=0}^n P(i) = \sum_{i=0}^n \frac{a^i}{i!} \cdot \exp(-a)$$

$$P_{\text{kum}}(n) = \sum_{i=0}^n P(i) = \exp(-a) \cdot \sum_{i=0}^n \frac{a^i}{i!}$$

Izračunajmo prvih nekaj kumulativnih verjetnosti:

$$P_{\text{kum}}(0) = P(0) = \exp(-a) = 0,01426$$

$$P_{\text{kum}}(1) = P(0) + P(1) = P(0) \cdot (1 + a) = 0,07489$$

$$P_{\text{kum}}(2) = P(0) + P(1) + P(2) = P(0) \cdot (1 + a + a^2 / 2) = 0,20371$$

$$P_{\text{kum}}(3) = P(0) \cdot (1 + a + a^2/2 + a^3/6) = 0,38621$$

$$P_{\text{kum}}(4) = P(0) \cdot (1 + a + a^2/2 + a^3/6 + a^4/24) = 0,58012$$

Kumulativna verjetnost se kaj hitro bliža vrednosti 1, tako da je dovolj vzeti določeno število členov, ker so dogodki z velikimi števili, npr. $n > 20$, zelo malo verjetni. Pri MC-simulaciji priredimo sedaj $r \rightarrow x$ takole. Za $r < P_{\text{kum}}(0)$ je $x = 0$, za $P_{\text{kum}}(0) < r < P_{\text{kum}}(1)$ je $x = 1$, za $P_{\text{kum}}(1) < r < P_{\text{kum}}(2)$ je $x = 2$ itd.

Prikazan je podprogram, ki naredi MC-simulacijo pri $N = 10^6$ ponovitvah, iz histograma vrednosti x pa izračuna verjetnosti $P(x)$. Za primerjavo so dodane teoretične vrednosti $P(x)$ iz dane Poissonove porazdelitve. Porazdelitvi se odlično ujemata, kar dokazuje pravilnost delovanja podprograma (slika 32).

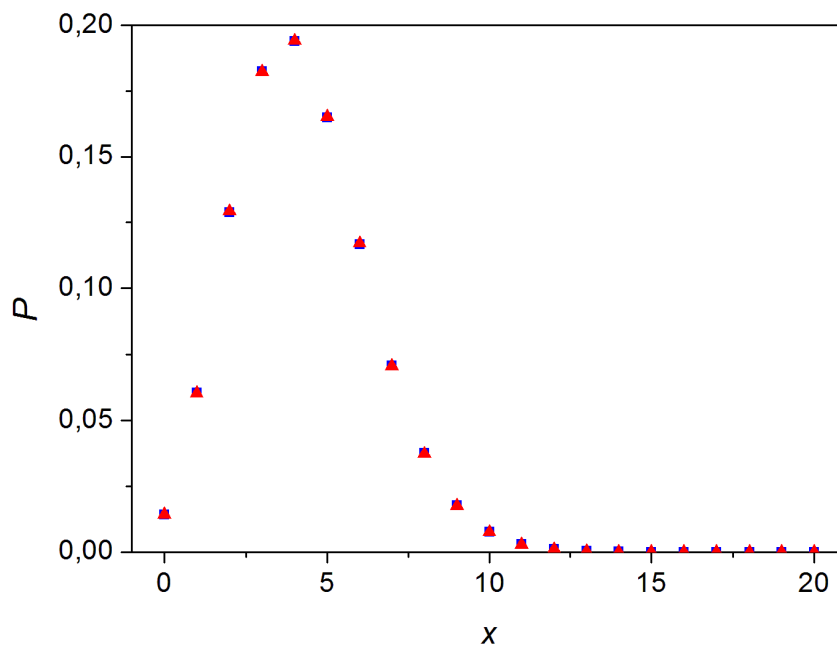
```

const xmax = 20 ;
      N = 1000000 ;

procedure delaj ;
var x : integer ;
    i : longint ;
    Nx : array[0..xmax] of longint ;
    P,Px,Pkum : array[0..xmax] of real ;
    a,r,PP : real ;
    izhod1,izhod2 : text ;
begin
{Postavitev verjetnosti}
  for x:= 0 to xmax do Nx[x]:=0 ;
  write(' a : ') ; readln(a) ;
  P[0]:= 1.0/exp(a) ;
  Pkum[0]:=P[0] ;
  for x:= 1 to xmax do begin
    P[x]:=P[x-1]*a/x ;
    Pkum[x]:=Pkum[x-1]+P[x] ;
    writeln(x,' ',Pkum[x]:9:6) ;
  end ;
  readln(x) ;
{MC simulacija}
  for i:= 1 to N do begin
    writeln(i) ;
    r:=random ;
    x:=-1 ;
    repeat
      x:=x+1 ;
      PP:=Pkum[x]
    until ((PP>r) or (x=xmax)) ;
    Nx[x]:=Nx[x]+1
  end ;
  for x:= 0 to xmax do Px[x]:=1.0*Nx[x]/N ;
  assign(izhod1,'Porig.dat') ; rewrite(izhod1) ;
  assign(izhod2,'PMC.dat') ; rewrite(izhod2) ;
  for x:= 0 to xmax do begin

```

```
writeln(izhod1,x:3,' ',P[x]:9:6) ;
writeln(izhod2,x:3,' ',Px[x]:9:6)
end ;
close(izhod1) ; close(izhod2) ;
readln(x) ;
end ;
```



Slika 32: Primerjava originalne Poissonove porazdelitve (modri kvadrati) in njene MC-simulacije pri $N = 10^6$ (rdeči trikotniki). Porazdelitvi se povsem pokrivata.

Prva dva zgleda sta bila bolj za ogrevanje. Vse pomembnejše MC-simulacije v znanosti se izvajajo na zvezno porazdeljenih naključnih spremenljivkah. Osnova za uporabo GNŠ v teh primerih je vedno enaka: naključno spremenljivko x z verjetnostno gostoto $p_x(x)$ generiramo z naključno številko r z verjetnostno gostoto $p_r(r) = 1$ na intervalu $(0, 1)$. Prireditvena funkcija $x = f(r)$ mora biti bijektivna na ustreznih definicijskih območjih obeh spremenljivk. To pomeni, da se vsak interval $(r, r + dr)$ naključne številke GNŠ enolično preslika v interval $(x, x + dx)$ simulirane spremenljivke x . Zato morata biti enaki tudi ustrezni verjetnosti: $p_r(r)dr = p_x(x)dx$. To enačbo integriramo od minimalne vrednosti obeh spremenljivk do neke vmesne vrednosti (minimalna vrednost je leva meja definicijskega območja):

$$\int_0^r p_r(r)dr = \int_{x_{\min}}^x p_x(x)dx$$

$$\int_0^r 1dr = \int_{x_{\min}}^x p_x(x)dx$$

$$r = \int_{x_{\min}}^x p_x(x)dx$$

Integral na desni strani enačbe navadno imenujemo kumulativna porazdelitvena funkcija in pomeni verjetnost, da bo imela naključno izbrana spremenljivka x vrednost manjšo od zgornje integracijske meje. To funkcijo na kratko označimo s $P_x(x)$, da jo razlikujemo od verjetnostne gostote $p_x(x)$. Zapišimo zvezo med r in x še enkrat na kratko:

$$r = P_x(x) \rightarrow x = P_x^{-1}(r)$$

kjer je P_x^{-1} inverzna funkcija funkcije P_x . Enačba je osnova za vse MC-simulacije zvezno porazdeljenih naključnih spremenljivk.

♥ Računski zgled 7.3

Naredimo MC-simulacijo eksponentne porazdelitvene funkcije $p(x) = C \exp(-x/x_0)$ za območje $x \geq 0$. Najprej normalizirajte verjetnostno gostoto $p(x)$, potem poiščite njeno kumulativno porazdelitveno funkcijo in zapišite funkcijsko priredbo $r \rightarrow x$.

Normalizacijo eksponentne porazdelitve smo že naredili v računskem zgledu 6.7: $C = 1/x_0$. Kumulativna funkcija (uporabljali bomo to kratko ime) je:

$$P(x) = \int_0^x \frac{1}{x_0} \exp(-x/x_0) dx = -\exp(-x/x_0) \Big|_0^x = 1 - \exp(-x/x_0)$$

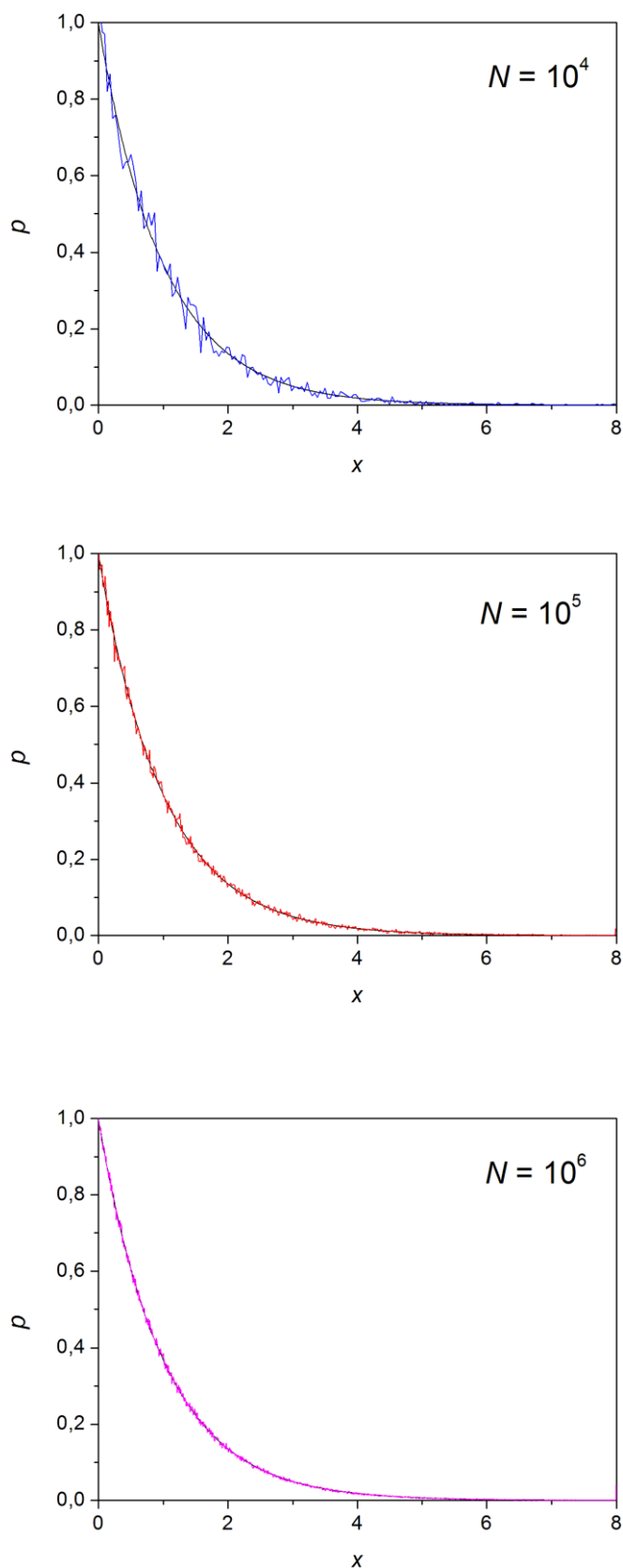
Velja torej zveza:

$$r = 1 - \exp(-x/x_0)$$

obratna zveza med spremenljivkama pa je:

$$x = -x_0 \ln(1 - r)$$

Za preizkus preverimo meji: $r = 0 \rightarrow x = 0$, $r = 1 \rightarrow x = +\infty$. Seveda se moramo pri numerični simulaciji izogniti limiti $r = 1 \rightarrow x = +\infty$ zaradi omejitve računalnika. Vendar so velike vrednosti x tako malo verjetne, da z rezanjem prevelikih vrednosti x (čemur ustrezajo vrednosti r zelo blizu 1) nič ne škodimo realni porazdelitvi. Na sliki 33 so prikazani rezultati simulacije za $N = 10^4$, 10^5 in 10^6 ponovitev. Simulirane porazdelitve izračunamo s histogramsko metodo, kjer posamezne vrednosti x porazdelimo po »predalčkih« primerne širine Δx ; te porazdelitve primerjamo s teoretično eksponentno verjetnostno gostoto.



Slika 33: Primerjava originalne eksponentne porazdelitve (gladka črna črta) z njenimi MC-simulacijami pri $N = 10^4$, 10^5 in 10^6 (barvne črte); porazdelitev je normalizirana na $x_0 = 1$. Čim večji je N , tem manjše so statistične fluktuacije.

♥ Računski zgled 7.4

Naredimo MC-simulacijo normalne porazdelitvene funkcije $p(x) = C \exp[-(x - x_0)^2/(2\sigma^2)]$. Najprej normalizirajte verjetnostno gostoto $p(x)$, potem poiščite njeno kumulativno porazdelitveno funkcijo in zapišite funkcijsko priredbo $r \rightarrow x$.

Pri normalizaciji Gaussove funkcije si pomagamo z znanim določenim integralom:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2) dt = \sqrt{\pi}$$

Pri normalizaciji

$$\int_{-\infty}^{\infty} C \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) dx = 1$$

Uvedemo zato novo integracijsko spremenljivko $t^2 = (x - x_0)^2/(2\sigma^2)$, tako da je konstanta C enaka:

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma}$$

Kumulativna porazdelitvena funkcija je:

$$P(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) dx$$

in velja tako za pozitivne kot negativne vrednosti x . Vendar je smiselno zapis $P(x)$ poenostaviti. Prva poenostavitev je prav vpeljava brezdimenzijske spremenljivke t v MC-simulaciji: ta je skoraj enaka zgoraj omenjeni integracijski spremenljivki t , vendar jo iz praktičnih razlogov raje definiramo brez polovice: $t = (x - x_0)/\sigma$. Tako namesto z $P(x)$ raje računamo direktno s porazdelitveno funkcijo $P(t)$:

$$P(t) = \int_{-\infty}^t \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dx$$

Zaradi normalizacije sode funkcije je njen integral med mejama $-\infty$ in 0 enak $1/2$, tako da lahko postavimo spodnjo integracijsko mejo na nič, integriramo pa le po pozitivnih vrednostih t :

$$P(t) = \frac{1}{2} \pm \int_0^{|t|} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dx$$

kjer je predznak pred integralom enak predznaku spremenljivke t . Težava je v tem, da integral za poljubno zgornjo mejo t zgoraj nima analitičnega zapisa. V literaturi je ta integral povezan s funkcijo *error function*, ki je pomembna v teoriji verjetnosti in merskih napak. Vendar pa nam različne vrednosti integrala samim ni težko programirati: uporabimo Simpsonovo metodo. Zveza s spremenljivko r , ki nam jo da GNSŠ, je potem: $r = P(t) \rightarrow t = P^{-1}(r) \rightarrow x = x_0 + t\sigma$. ♠

♥ Računski zgled 7.5

Kako naredimo MC-simulacijo Maxwellove porazdelitve hitrosti molekul idealnega plina pri temperaturi T , ki jo opiše funkcija: $p(\mathbf{v}) = C \exp[-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/(2kT)]$? Pri tem je m masa molekule, k pa Boltzmannova konstanta.

Sedaj je p funkcija treh naključnih spremenljivk – treh komponent hitrosti. Ker je p produkt funkcij komponent hitrosti, pomeni to, da so vse tri komponente med seboj statistično neodvisne. Vsako komponento opisuje Gaussova porazdelitev, centrirana pri $v_i = 0$ ($i = x, y$ ali z). Torej je MC-simulacija takšna kot v računskem zgledu 7.4, le za vsako komponento hitrosti uporabimo po eno številko GNS:

$$t_1 = P^{-1}(r_1) \rightarrow v_x = t_1(kT/m)^{1/2}$$

$$t_2 = P^{-1}(r_2) \rightarrow v_y = t_2(kT/m)^{1/2}$$

$$t_3 = P^{-1}(r_3) \rightarrow v_z = t_3(kT/m)^{1/2} \spadesuit$$

♥ Računski zgled 7.6

Difuzijo molekul neke tekočine v mešanici z drugo tekočino lahko teoretično simuliramo z naključnim sprehodom (ang. random walk). Delec (molekulo, prašni delec pri Brownovem gibanju itd.) postavimo najprej v izhodišče koordinatnega sistema. Obravnavajmo 3D-problem, saj je obravnava v 2D analogna. V vsakem koraku (iteraciji) naj se delec premakne za dolžino L v povsem naključno smer (neodvisno od prejšnjih korakov). Zanima nas »makroskopsko« spreminjanje razdalje delca od izhodišča s številom korakov N , ne glede na statistične fluktuacije. Najprej teoretično izrazite $r(t)$, potem pa zapišite MC-simulacijo naključnega sprehoda v 2D in 3D.

Zapišimo vse tri koordinate delca po N premikih, če posamezne spremembe koordinat po korakih označimo z Δx_i , Δy_i in Δz_i :

$$x = \sum_{i=1}^N \Delta x_i$$

$$y = \sum_{i=1}^N \Delta y_i$$

$$z = \sum_{i=1}^N \Delta z_i$$

Izrazimo pričakovano vrednost kvadrata koordinate x (s pričakovano vrednostjo odpravimo statistične variacije):

$$\langle x^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \Delta x_i \right)^2 \right\rangle$$

Ker se pri kvadratu nekega izraza množi »vsak člen z vsakim«, lahko namesto kvadrata vsote zapišemo dvojno vsoto produktov členov:

$$\langle x^2 \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \Delta x_i \Delta x_j \right\rangle$$

Vsi členi z $j \neq i$ so enaki nič, ker so nekorelirani, tako da je njihovo povprečje enako nič: $\langle \Delta x_i \cdot \Delta x_j \rangle = \langle \Delta x_i \rangle \cdot \langle \Delta x_j \rangle = 0 \cdot 0 = 0$ (zaradi izotropne simetrije je namreč povprečna sprememba posamezne koordinate enaka nič). Preostanejo le členi z enakima indeksoma in namesto dvojne vsote imamo spet enojno:

$$\langle x^2 \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \Delta x_i^2 \right\rangle$$

Ker pa so vse tri smeri pri izotropni simetriji ekvivalentne, velja $\langle \Delta x_i^2 \rangle = \langle \Delta y_i^2 \rangle = \langle \Delta z_i^2 \rangle = L^2/3$.

Torej velja:

$$\langle x^2 \rangle = N \cdot \frac{L^2}{3}$$

in enako za $\langle y^2 \rangle$ in $\langle z^2 \rangle$. Pri razdalji mislimo že statistično povprečje: $r^2 = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = NL^2$. Izraz korenimo in nazadnje ugotovimo:

$$r = L \cdot \sqrt{N}$$

Poiščimo še tesnejšo fizikalno zvezo. Naj se delec giblje z neko povprečno ali efektivno hitrostjo v . Tedaj je število korakov: $N = s/L = vt/L$. Statistično se torej razdalja delca od njegove začetne lege s časom spreminja takole:

$$r = \sqrt{Lvt}$$

V 2D dobimo s podobnim sklepanjem enak rezultat. Res je sicer $\langle \Delta x_i^2 \rangle = \langle \Delta y_i^2 \rangle = L^2/2$ namesto $L^2/3$, vendar zdaj seštejemo dva člena, tako da se konstantni faktor $1/2$ krajša, tako kot se je krajšal faktor $1/3$ v 3D.

Prikažimo še MC-simulacijo za 3D-problem. Obravnavajmo problem v brezdimenzijski obliki z normalizacijo $L = 1$. Simulacijo izvedimo na dva različna načina: prvi je preprostejši in za naš namen bolj praktičen, drugi pa kje bolj matematično poučen. Pri prvem načinu najprej obravnavajmo premik tako, kot da so njegove komponente med seboj neodvisne. Pri tem dovolimo tako negativne kot pozitivne vrednosti komponent (z enako verjetnostjo). Potrebujemo 3 naključna števila iz GNS (r_1, r_2 in r_3) in najpreprostejše pretvorbe so:

$$\Delta x_i = r_1 - 1/2$$

$$\Delta y_i = r_2 - 1/2$$

$$\Delta z_i = r_3 - 1/2$$

S tem dosežemo enakomerno porazdeljenost vrednosti komponent premika na intervalu $(-1/2, +1/2)$. Vendar pa moramo celoten vektor premika še normalizirati na velikost 1:

$$\Delta x_i \rightarrow \Delta x_i / \sqrt{\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2 + \Delta z_i^2}$$

$$\Delta y_i \rightarrow \Delta y_i / \sqrt{\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2 + \Delta z_i^2}$$

$$\Delta z_i \rightarrow \Delta z_i / \sqrt{\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2 + \Delta z_i^2}$$

Pri drugem načinu MC-simulacije premikov uporabimo sferična kota θ in φ . Njuni naključni vrednosti določimo z naključnima številčkama r_1 in r_2 GNS. Pri izotropni porazdelitvi smeri premikov v 3D-prostoru je porazdelitev azimutnega kota φ na intervalu $(0, 2\pi)$ enakomerna: $p(\varphi) = 1/(2\pi)$. Ustrezna preslikava je: $\varphi = 2\pi \cdot r_1$. Porazdelitvena funkcija polarnega kota θ na intervalu $(0, \pi)$ pa je: $p(\theta) = (1/2)\sin \theta$. To sklepamo med drugim po tem, da je element prostorskega kota enak: $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. Za vajo preverimo normalizacijo produkta obeh porazdelitvenih funkcij:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi p(\theta) p(\varphi) d\theta d\varphi = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

Kumulativna porazdelitvena funkcija kota θ je potem:

$$P(\theta) = \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin \theta d\theta = \frac{1}{2} (1 - \cos \theta)$$

Iz pretvorbe $r_2 = P(\theta)$ najdemo še zvezo med polarnim kotom in drugo naključno številčko GNS:

$$\theta = \arccos(1 - 2r_2)$$

Nazadnje izračunamo komponente premika:

$$\Delta x_i = \sin \theta \cos \varphi$$

$$\Delta y_i = \sin \theta \sin \varphi$$

$$\Delta z_i = \cos \theta$$

Prilagamo še programa v Mathematici (prva metoda) z rezultati za MC-simulacijo naključnega prehoda v 2D in 3D za prvih 1 000 korakov. Grafi so prikazani na slikah od 34 do 37.

```

v2={{0,0}};
r2={{0,0}};
x=0;
y=0;
i=0 ;
Do[
  {dx=Random[Real,{-1,1}],
  dy=Random[Real,{-1,1}],
  xy2=Sqrt[dx*dx+dy*dy],
  dx=dx/xy2,

```

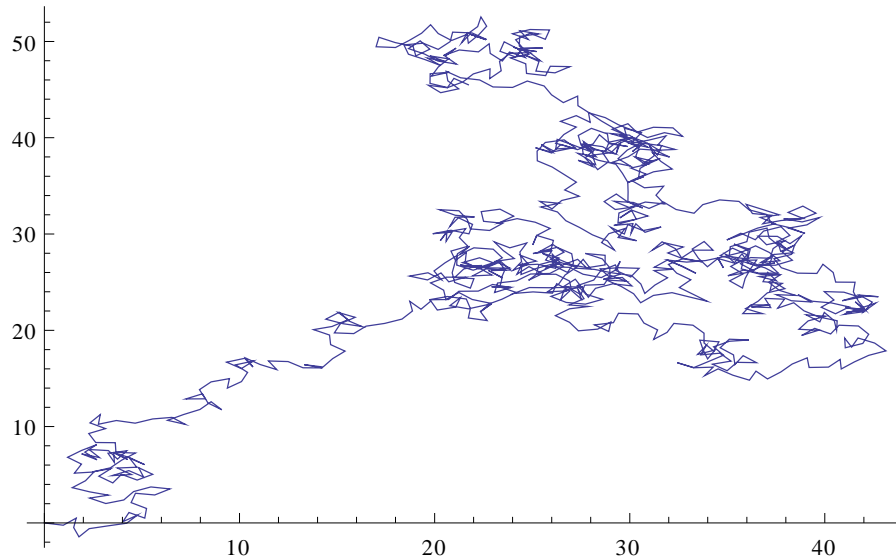


```

dy=dy/xy2,
x=x+dx,
y=y+dy,
i=i+1,
rr=Sqrt[x*x+y*y],
v2=Append[v2,{x,y}],
r2=Append[r2,{i,rr}]
}, {1000}];

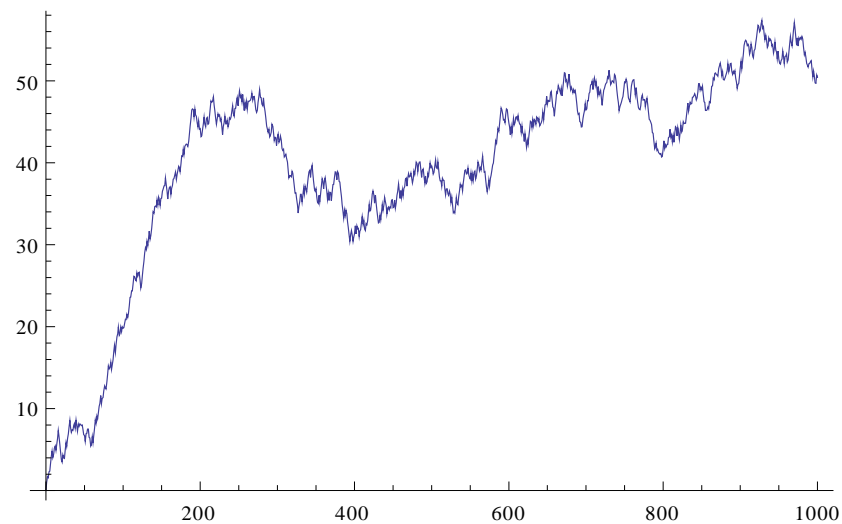
```

```
ListLinePlot[v2]
```



Slika 34: Tir gibanja delca $y(x)$ pri naključnem 2D-sprehodu

```
ListLinePlot[r2]
```



Slika 35: Odvisnost razdalje delca od izhodišča od števila korakov pri naključnem 2D-sprehodu

```

v3={{0,0,0}};
r2={{0,0}};
x=0;
y=0;
z=0;
i=0 ;

```

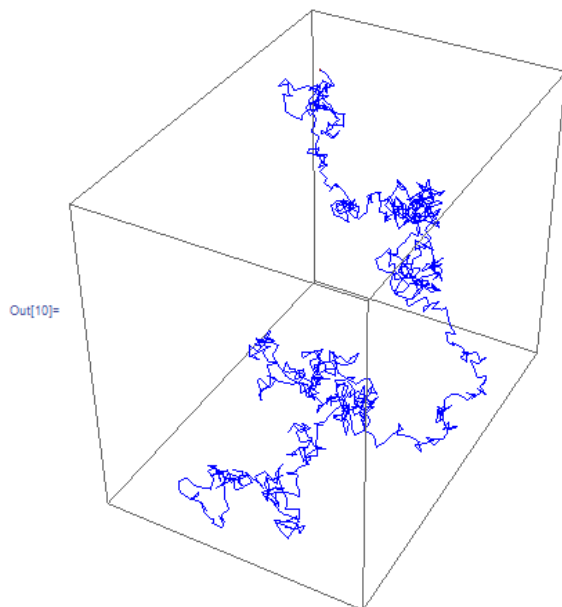
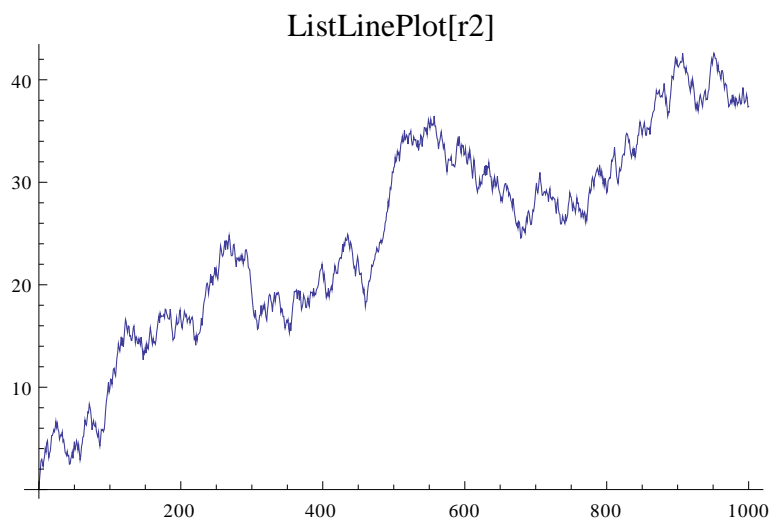
Do[

```

{dx=Random[Real,{-1,1}],
dy=Random[Real,{-1,1}],
dz=Random[Real,{-1,1}],
xy2=Sqrt[dx*dx+dy*dy+dz*dz],
dx=dx/xy2,
dy=dy/xy2,
dz=dz/xy2,
x=x+dx,
y=y+dy,
z=z+dz,
i=i+1,
rr=Sqrt[x*x+y*y+z*z],
v3=Append[v3,{x,y,z}],
r2=Append[r2,{i,rr}]
}, {1000}];

```

Graphics3D[{Blue,Line[v3]}]

Slika 36: Tir gibanja delca $y(x)$ pri naključnem 3D-sprehodu

Slika 37: Odvisnost razdalje delca od izhodišča od števila korakov pri naključnem 3D-sprehodu V obeh primerih prvi graf prikazuje spreminjanje lege delca, drugi pa trenutno razdaljo delca od izhodiščne lege. Statistične variacije so velike, tako da se krivulji $r(N)$ ujemata s korensko funkcijo samo v grobem statističnem povprečju. ♠

♥ Računski zgled 7.7

V znanosti o strukturnih materialih se pogosto uporablja dvoparametrična Weibullova porazdelitev. Z njo opišemo npr. porazdelitev vrednosti upogibne trdnosti σ (navadno v megapascalih) preizkusnih vzorcev. Pri tej porazdelitvi je verjetnostna gostota:

$$p(\sigma) = \frac{m}{\sigma_0} \cdot \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^{m-1} \cdot \exp\left[-\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^m\right]$$

kumulativna funkcija pa je:

$$P(\sigma) = \int_0^{\sigma} p(\sigma) d\sigma = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^m\right]$$

Prosta parametra m in σ_0 imenujemo Weibullov modul in skalni (umeritveni) parameter, določata pa širino porazdelitvene funkcije p in njen vrh. Zato sta neposredno povezana s pričakovano vrednostjo trdnosti $\langle\sigma\rangle$ in njeno standardno deviacijo $\delta\sigma$. Ni naključje, da je funkcija $P(\sigma)$ v tem primeru preprostejša od funkcije $p(\sigma)$, saj je Weibull najprej teoretično izpeljal $P(\sigma)$ in šele potem izračunal $p(\sigma) = dP(\sigma)/d\sigma$. Poiščite zvezo $r \rightarrow \sigma$ v MC-simulaciji te porazdelitve.

Veljati mora $r = P(\sigma)$ ali:

$$r = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^m\right]$$

Obratna zveza je:

$$\sigma = \sigma_0 \cdot \left[\ln \frac{1}{1-r}\right]^{1/m}$$

V zvezi z Weibullovo porazdelitvijo v raziskovalnem delu omenimo nekaj zanimivosti. Trdnost je med najpomembnejšimi mehanskimi lastnostmi tehničnih (strukturnih) materialov, kamor spada tudi tehnična keramika, npr. aluminijev oksid (Al_2O_3), cirkonijev oksid (ZrO_2) in silicijev nitrid (Si_3N_4). Iz eksperimentalnih podatkov za trdnost, kjer gre za zlom vzorcev pravilne geometrijske oblike, navadno kvadra, lahko z različnimi uveljavljenimi metodami izračunamo oba neznan parametra m in σ_0 . Omenimo za našo obravnavano najpreprostejšo metodo, to je metodo momentov (MM). Kot smo že omenili, velja enolična zveza med parom m , σ_0 in parom $\langle\sigma\rangle$, $\delta\sigma$. To zvezo izpeljemo takole:

$$\langle\sigma^n\rangle = \int_0^{\infty} \sigma^n \cdot p(\sigma) d\sigma = \int_0^{\infty} \sigma^n \cdot \frac{m}{\sigma_0} \cdot \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^{m-1} \cdot \exp\left[-\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^m\right] d\sigma$$

za poljubno naravno število n .

Upoštevajmo definicijo funkcije gama:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} \cdot \exp(-t) dt$$

Uvedimo v integral za $\langle \sigma^n \rangle$ novo integracijsko spremenljivko $t = (\sigma/\sigma_0)^m$ in tako izračunamo:

$$\langle \sigma^n \rangle = \sigma_0^n \cdot \Gamma\left(1 + \frac{n}{m}\right)$$

Za prvi dve potenci, ki ju potrebujemo pri MM-metodi, tako velja:

$$\langle \sigma \rangle = \sigma_0 \cdot \Gamma\left(1 + \frac{1}{m}\right)$$

$$\langle \sigma^2 \rangle = \sigma_0^2 \cdot \Gamma\left(1 + \frac{2}{m}\right)$$

Izrazimo relativno standardno deviacijo trdnosti:

$$\frac{\delta\sigma}{\langle \sigma \rangle} = \frac{\sqrt{\langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2}}{\langle \sigma \rangle} = \frac{\sqrt{\Gamma\left(1 + \frac{2}{m}\right) - \Gamma^2\left(1 + \frac{1}{m}\right)}}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{m}\right)}$$

Vrednosti $\langle \sigma \rangle$ in $\delta\sigma$ izračunamo neposredno iz eksperimentalnih podatkov. Potem izračunamo relativno standardno deviacijo in iz zadnje enačbe po metodi MM numerično še Weibullovo parametar m . Nazadnje izračunamo skalni parametar: $\sigma_0 = \langle \sigma \rangle / \Gamma(1 + 1/m)$. Omenimo še dve drugi znani metodi za izračun parametrov m in σ_0 , to sta linearna regresija (LR) in metoda največje verjetnosti (sliši se tudi izraz »največje verjetje«, ML = maximum likelihood). Da je statistika dovolj zanesljiva, standardi pri vseh metodah priporočajo vsaj 30 meritev trdnosti. V industriji se ponekod držijo tega priporočila, drugod pa si tega ne morejo privoščiti in zlomijo manj preizkusnih vzorcev (posebno zato, ker je proizvodnja keramičnih elementov draga in zahtevna). Slabost vseh omenjenih metod je, da dajejo pri premajhnem številu preizkusnih vzorcev sistematično premajhne vrednosti predvsem parametra m glede na njegovo pravo vrednost: nekatere metode dajo preveliko vrednost m , druge pa premajhno. Zato so poleg eksperimentalnega dela zelo razširjene raznovrstne teoretične MC-simulacije trdnosti, kot je opisano zgoraj, z njimi pa natančno in sistematično preverjamo zanesljivost metod, kot so MM, LR in ML. Nekaj takšnih simulacij smo med drugim objavili tudi sodelavci Oddelka za fiziko FNM.

Nekaj člankov sodelavcev FNM o Weibulovi statistiki:

AMBROŽIČ, Milan, GORJAN, Lovro. Reliability of a Weibull analysis using the maximum-likelihood method. *Journal of Materials Science*, 46 (2011) 6, 1862–1869

GORJAN, Lovro, AMBROŽIČ, Milan. Bend strength of alumina ceramics : a comparison of Weibull statistics with other statistics based on very large experimental data set. *Journal of the European ceramic society*, 32 (2012) 6, 1221–1227

AMBROŽIČ, Milan, GORJAN, Lovro, GOMILŠEK, Maša. Bend strength variation of ceramics in serial fabrication. *Journal of the European ceramic society*, 34 (2014) 7, 1873–1879 ♠

♥ Računski zgled 7.8

V semimikroskopski teoriji nematičnih tekočih kristalov (NTK) se veliko uporablja Lebwohl-Lasherjev model, ki je izpeljanka Heisenbergovega spinskega modela pri simulaciji orientacijskega reda feromagnetnih in feroelektričnih snovi. V tem modelu naključno postavimo spine (enotne vektorje, ki podajajo smeri osi podolgovatih molekul ali pa njihovih večjih gruč) v 3D kubično mrežo. Vsaka celica te mreže je torej majhna kocka, ki vsebuje en spin. Z MC-simulacijami predstavimo gibanje smeri osi molekul, npr. v odvisnosti od temperature, pri čemer upoštevamo tudi naključne termične zasuke spinov. Razložimo termični zasuk posameznega spina. Najlažje naredimo to, če si izberemo lokalni koordinatni sistem, vezan na ta spin, tako da se lokalna os z ujema z njegovo smerjo. Potem rotacija spina okrog te osi nima nobenega fizikalnega pomena. Termična rotacija ima zato namesto treh prostostnih stopenj le dve, ki ju lahko opišemo z dvema kotoma, θ in φ , sorodnima kotoma sferičnega koordinatnega sistema. Kot φ podaja smer rotacijske osi, ki je pravokotna na lokalno os z , zato je porazdelitev njegovih vrednosti enakomerna na intervalu $(0, 2\pi)$. Kot θ pa je dejanski zasuk spina okrog tako določene rotacijske osi. Porazdelitev njegovih vrednosti ni enakomerna, temveč na neki način ustreza kombinaciji Gaussovih porazdelitev v dveh neodvisnih dimenzijah. V podrobnosti izpeljave ne bomo šli, izkaže pa se, da je porazdelitvena funkcija kota θ naslednja:

$$p(\theta) = C\theta \cdot \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right)$$

Pri tem je σ standardna deviacija, ki narašča z naraščajočo temperaturo NTK. C je normalizacijska konstanta, ki nam je zdaj niti ni treba izračunati. Izrazite zvezi med naključnima številoma GNS in kotoma v MC-simulaciji.

Zveza je pri kotu φ spet preprosta: $\varphi = 2\pi \cdot r_1$, kjer je r_1 prvo naključno število. V zvezi s kotom θ pa moramo najprej izraziti kumulativno porazdelitveno funkcijo:

$$P(\theta) = \int_0^\theta C\theta \cdot \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right) d\theta = C\sigma^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right)\right]$$

Ker naj velja $P(\infty) = 1$ (teoretično gledamo tudi kote, večje od 2π , čeprav pride pri operaciji zasuka v poštev le njihov modul po 2π), potem mora veljati $C\sigma^2 = 1$. Normalizirana kumulativna porazdelitvena funkcija tega kota je torej:

$$P(\theta) = 1 - \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right)$$

Iz pretvorbe $r_2 = P(\theta)$ izračunamo:

$$r_2 = \sigma \cdot \sqrt{2 \ln \frac{1}{1-r_2}}$$

Seveda pa je treba nazadnje zasuk prikazati v laboratorijskemu koordinatnemu sistemu, zato moramo po lokalnem termičnem zasuku spina izvesti še transformacijo med koordinatnima sistemoma. Precej takšnih simulacij smo naredili na Oddelku za fiziko in rezultate tudi objavili.

Nekaj člankov sodelavcev FNM o MC-simulacijah NTK:

REPNIK, Robert, RANJKESH SIAHKAL, Amid, ŠIMONKA, Vito, AMBROŽIČ, Milan, BRADAČ, Zlatko, KRALJ, Samo. Symmetry breaking in nematic liquid crystals: analogy with cosmology and magnetism. *Journal of physics, Condensed matter*, 25 (2013) 40, 404201-1–404201-10

RANJKESH SIAHKAL, Amid, AMBROŽIČ, Milan, SLAVINEC, Mitja. Study of phase transitions and structural order in perturbed nematic liquid crystals = Študij faznega prehoda in strukturnega reda v perturbiranemu nematičnemu tekočemu kristalu. *Anali PAZU*, ISSN 2232-416X, 3 (2013) 2, 57–67, graf. prikazi. http://www.anali-pazu.si/sites/default/files/Separat_Ranjesh_et.al_.pdf

RANJKESH SIAHKAL, Amid, AMBROŽIČ, Milan, KRALJ, Samo, SLUCKIN, T. J. Computational studies of history dependence in nematic liquid crystals in random environments. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 89 (2014) 2, 022504-1–022504-14 ♠

♥ Računski zgled 7.9

V zvezi s perkolacijsko teorijo predstavimo dva modela, mrežni in kontinuumski model v najpreprostejši različici.

Mrežni model

V preprostem 2D mrežnem modelu imamo mrežo $N \times N$ kvadratkov (slika 38 a). Pri perkolacijskih problemih gre v splošnem za makroskopsko (globalno) geometrijsko povezanost objektov (v našem primeru kvadratkov v 2D-mreži), pri tem pa lahko obravnavamo raznovrstne fizikalne lastnosti mreže (snovi). Zaradi nazornosti vzemimo električno prevodnost: privzemimo, da je določen delež (p) vseh kvadratkov v mreži električno prevoden, delež $1 - p$ pa ne. Razporeditev prevodnih in neprevodnih kvadratkov v mreži naj bo povsem naključna, zato lahko konfiguracijo postavimo z MC-simulacijo. Zaradi prikaza lahko kvadratke obarvamo: npr. prevodne s črno barvo, neprevodne pa z belo. Pri določeni konfiguraciji kvadratkov nas zanima, ali obstaja prevodna pot (prek prevodnih kvadratkov) od spodnjega do zgornjega roba (elektrode). Pri povezavah med prevodnimi kvadrati veljajo le povezave prek stranic (ne oglišč!) sosednjih kvadratkov. Pri določenem prevodnem deležu p (posebno v bližini perkolacijskega praga, kot ga bomo definirali spodaj) lahko računalnik nastavi takšno konfiguracijo, da prevodna pot obstaja (perkolacija), ali pa takšno, da takšne poti ni. Zato gre pri perkolacijski teoriji za statistiko in verjetnostni račun. Program mora pri izbrani vrednosti p velikokrat postaviti naključno začetno konfiguracijo in vsakič preveriti, ali nastane perkolacija ali ne. Na osnovi tega izračuna verjetnost za perkolacijo P , in ta je funkcija prevodnega deleža p . Pri dovolj majhnih vrednostih p pričakujemo $P = 0$ (saj je kvadratkov premalo za prevodno pot), pri velikih p pa $P = 100$ %. Vmes je $P(p)$ naraščajoča funkcija. Od celotnega perkolacijskega problema se tu omejimo samo na vprašanje: kako naj program pri danem deležu p z uporabo GNS nastavi začetno konfiguracijo prevodnih in neprevodnih kvadratkov?

Ta naloga je dokaj preprosta. Za vsak kvadrater posebej program izbere naključno številko r . Za $r < p$ naj bo kvadrater prevoden, za $r > p$ pa ne. Priložen je značilni paskalski podprogram za nastavitve konfiguracije.

```

procedure postavi ;
var i, j : integer ;
    r : real ;
begin
  for i := 1 to N do
    for j := 1 to N do begin
      r := random ;
      if (r < p) then prevod[i]^j := true
      else prevod[i]^j := false
    end ;
  end ;
end ;

```

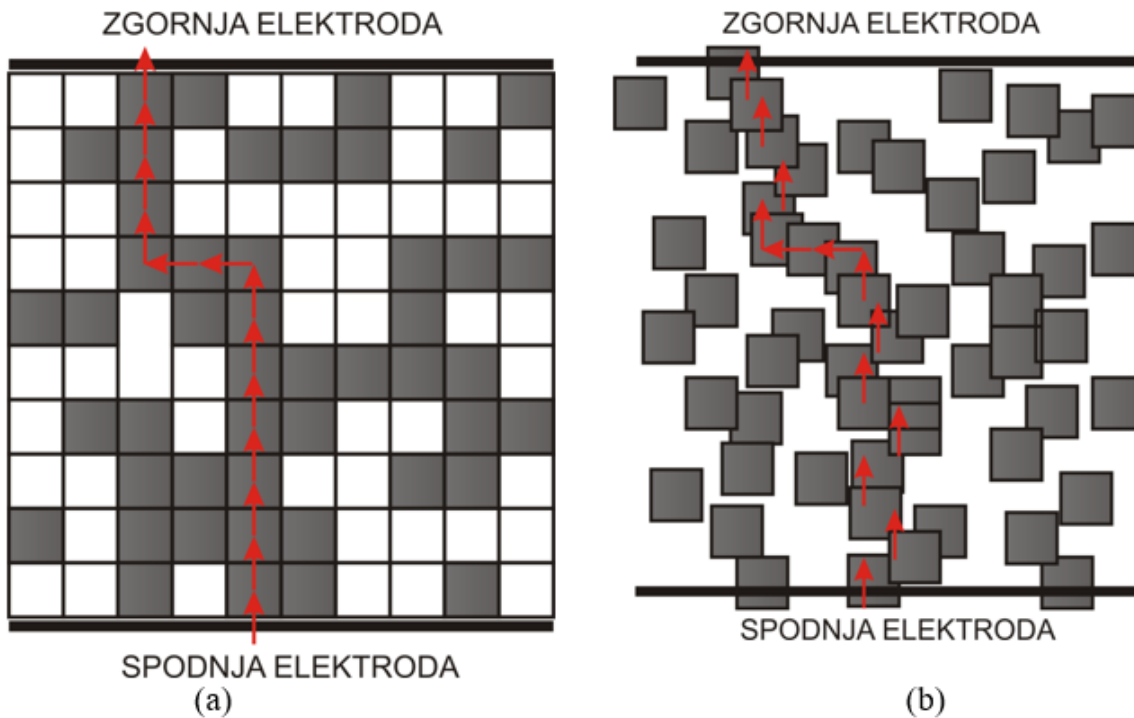
Omenimo še, da kot perkolacijski prag p_c definiramo tisto vrednost prevodnega deleža p , pri kateri velja: $P(p_c) = 50\%$.

Kontinuumski model

V kontinuumskih modelih geometrijski objekti niso razporejeni v pravilno mrežo, temveč so njihove lege (koordinate težišč in orientacije) naključne (slika 38 b). V tem primeru ne gre za delitev objektov na prevodne in neprevodne, temveč za same prevodne objekte v neprevodni matriki ali kar v praznem prostoru. Obravnavajmo preprost 3D-problem, kjer so prevodni objekti kroglice s polmerom R v 3D-prostoru. Prevodna pot med nasprotnima elektrodama nastane s sekanjem dovolj velikega števila prevodnih kroglic med elektrodama. Zaradi sferične simetrije se nam pri kroglicah ni treba ukvarjati še z orientacijo, temveč mora program v 3D prostorski konfiguraciji postaviti samo lege njihovih središč. Naj bo razporeditev središč kroglic v 3D-prostoru sicer naključna, a homogena. V simulaciji vzemimo kocko z robom 1. Kako naredimo MC-simulacijo leg kroglic?

Tudi ta naloga je preprosta. Za vsako kroglico program izbere tri naključna števila: r_1 , r_2 in r_3 . Koordinatni sistem izberimo tako, da je simulacijska kocka v oktantu s pozitivnimi koordinatami, eno od njenih oglišč pa je v izhodišču. Torej ležijo vse koordinate središč kroglic v območju $(0, 1)$, zveza med koordinatami in naključnimi števili pa je kar se da preprosta: $x = r_1$, $y = r_2$, $z = r_3$. Kot zanimivost omenimo še, da morajo biti za dovolj dobro statistično veljavnost rezultatov kroglice veliko manjše od simulacijske kocke: $R \ll 1$. V zvezi s kontinuumskimi perkolacijskimi modeli za krogelne in anizotropne objekte smo objavili več člankov.

Na sliki 38 sta ponazorjena mrežni in kontinuumski model za prevodne kvadratke.



Slika 38: Razlika med mrežnim (a) in zveznim (b) modelom (v splošnem bi lahko bili kvadratici tudi različno zasukani). Prevodni kvadratici so temni. V obeh primerih je merilo prevajanja med elektrodama izpolnjeno, saj obstaja prevodna pot med njima (lahko je več takšnih poti), nakazana z rdečimi puščicami.

Nekaj člankov sodelavcev FNM na temo perkolacijske teorije:

VALANT, Matjaž, DAKSKOBLER, Aleš, AMBROŽIČ, Milan, KOSMAČ, Tomaž. Giant permittivity phenomena in layered BaTiO₃-Ni composites. *Journal of the European ceramic society*, 26 (2006), 891–896

AMBROŽIČ, Milan, DAKSKOBLER, Aleš, VALANT, Matjaž. Influence of the geometric al parameters on the conductivity percolation threshold. *EPJ, Applied physics*, 35 (2006), 85–92

AMBROŽIČ, Milan. The percolation threshold in systems of permeable ellipses. *EPJ, Applied physics*, 41 (2007) 2, 121–127 ♠

♥ Računski zgled 7.10

Avtor tega zглеada: Marko Gosak

MC-simulacije se pogosto uporabljajo tudi na področju fizikalne biokemije. V sistemih, kjer interagira relativno majhno število molekul (npr. na nivoju posameznih celic), so zelo izrazite fluktuacije, ki jih tradicionalno modeliranje, ki temelji na reševanju sistema diferencialnih enačb, ne predvideva. Za stohastičen opis sistema je D. T. Gillespie [Gillespie, *J. Phys. Chem.* 81 (1977), 2340] izdelal algoritem, ki na osnovi MC-simulacije poda časovni razvoj kemijskega reakcijskega sistema. Pri tem se porajata dve ključni vprašanji: katera reakcija se bo zgodila naslednja in čez koliko časa. Prav zaradi naključnih procesov, ki spremljajo kemijske reakcije, na ti vprašanji ne moremo točno odgovoriti. Lahko pa izračunamo verjetnost, katera reakcija se bo zgodila naslednja in kdaj.

Gostoto verjetnosti $p_1(\tau)$ lahko zapišemo kot vsoto $p(\tau, \mu)$ za vse reakcije μ :

$$p_1(\tau) = \sum_{\mu=1}^M p(\tau, \mu) \quad (*3)$$

Prav tako lahko gostoto verjetnosti, da se bo zgodila prav μ -ta reakcija, zapišemo kot:

$$p_2(\mu|\tau) = \frac{p(\tau, \mu)}{\sum_{\nu=1}^M p(\tau, \nu)} \quad (*4)$$

Če v zgoraj zapisani enačbi (*3) in (*4) vstavimo $p(\tau, \mu)$, ki smo ga definirali v enačbi (*1), ugotovimo:

$$p_1(\tau) = a_0 \exp(-a_0\tau), \quad 0 \leq \tau \leq \infty \quad (*5)$$

in

$$p_2(\mu|\tau) = \frac{a_\mu}{a_0}, \quad \mu = 1, 2, \dots, M \quad (*6)$$

pri čemer je a_0 povezan z vsoto verjetnosti za vse reakcije ($\mu = 1 - M$) in je definiran kot:

$$a_0 = \sum_{\mu=1}^M a_\mu \quad (*7)$$

Definirani gostoti verjetnosti $p_1(\tau)$ in $p_2(\mu|\tau)$, sta funkciji ene spremenljivke, kar omogoča, da lahko z ustreznim predpisom na podlagi dveh naključnih števil določimo časovni korak τ in število μ , ki definira naslednjo reakcijo. Zapisani verjetnosti (*5) in (*6) sta normalizirani na njunem definicijskem območju:

$$\int_0^{\infty} p_1(\tau) d\tau = 1 \quad (*8)$$

$$\sum_{\mu=1}^M p_2(\mu|\tau) = 1 \quad (*9)$$

Tako kot v prejšnjih primerih, zapišimo še kumulativno verjetnostno porazdelitveno funkcijo $F(\tau)$:

$$F(\tau) = \int_0^{\tau} p_1(\tau) d\tau \quad (*10)$$

za katero veljata značilna normalizacijski pogoja: $F(0) = 0$ in $F(\infty) = 1$. Kumulativna verjetnostna porazdelitvena funkcija $F(\tau)$ tako na celotnem definicijskem območju narašča od 0 do 1. Naslednja reakcija se bo zgodila čez čas τ . Ta bo določen na osnovi $p_1(\tau)$, za kar potrebujemo naključno število r_1 , izbrano iz zaloge vrednosti funkcije $F(\tau)$. Zato velja: $\tau = F^{-1}(r_1)$. Z integracijo (*10) dobimo:

$$F(\tau) = 1 - \exp(-a_0\tau) \quad (*11)$$

Enačimo enačbo (*11) z naključnim številom r_1 : $r_1 = \exp(-a_0 \tau)$, pri čemer smo naredili zamenjavo $r_1 \rightarrow 1 - r_1$. Nazadnje izpeljemo:

$$\tau = \frac{1}{a_0} \ln\left(\frac{1}{r_1}\right) \quad (*12)$$

Na podlagi naključnega števila pridobljena vrednost τ nam pove, čez koliko časa se bo zgodila naslednja reakcija.

V nadaljevanju moramo poiskati tudi naključno naravno število μ v skladu s $p_2(\mu | \tau)$, ki bo določilo, katera reakcija bo naslednja. Ponovno vpeljimo pripadajočo kumulativno verjetnostno porazdelitveno funkcijo $G(\mu)$:

$$G(\mu) = \sum_{v=1}^{\mu} p_2(v | \tau) \quad (*13)$$

ki je prav tako normalizirana na intervalu $[0, 1]$. Za določitev iskanega naravnega števila μ , določenega na osnovi $p_2(\mu | \tau)$, potrebujemo naključno število r_2 , ki zadošča pogoju:

$$G(\mu - 1) < r_2 \leq G(\mu) \quad (*14)$$

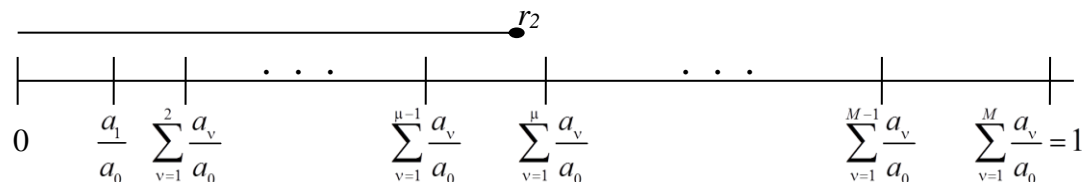
V zadnjo enačbo vstavimo gostoto verjetnosti $p_2(\mu | \tau)$, tako da je iskano naravno število μ ustreza pogoju:

$$\sum_{v=1}^{\mu-1} p_2(v | \tau) < r_2 \leq \sum_{v=1}^{\mu} p_2(v | \tau) \quad (*15)$$

oziroma

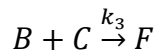
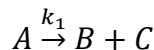
$$\sum_{v=1}^{\mu-1} \frac{a_v}{a_0} < r_2 \leq \sum_{v=1}^{\mu} \frac{a_v}{a_0} \quad (*16)$$

V enačbi (*16) je število μ , ki določi, katera reakcija bo naslednja, podano implicitno in ga je potrebno razbrati, kot je shematsko prikazano na sliki 40. Z drugimi besedami, dogodek oz. reakcijo izberemo naključno, vendar v skladu s predpisano verjetnostjo; pri bolj verjetnih reakcijah bodo intervali širši.



Slika 40: Uporaba MC-metode za določitev reakcije, ki se bo zgodila naslednja. Širina posameznega intervala je sorazmerna z verjetnostjo a_μ ; širši kot je interval, večja je verjetnost, da bo število r_2 ležalo v tem intervalu. Če r_2 »pade« v μ -ti interval, se bo naslednja zgodila μ -ta reakcija.

Kot primer si pogledjmo simulacijo kinetike treh sklopljenih kemijskih reakcij, podanih z naslednjo shemo:



V spodnji tabeli so za te tri reakcije ($M = 3$) definirane posamezne reakcijske verjetnosti (a_1 , a_2 in a_3) ter pripadajoči stohastični dogodki:

Tabela: Reakcijske verjetnosti a_μ in pripadajoči stohastični procesi

a_μ	Stohastični procesi
$a_1 = k_1 A$	$A \rightarrow A - 1, B \rightarrow B + 1, C \rightarrow C + 1$
$a_2 = k_2 CD$	$C \rightarrow C - 1, D \rightarrow D - 1, E \rightarrow E + 1$
$a_3 = k_3 BC$	$B \rightarrow B - 1, C \rightarrow C - 1, F \rightarrow F + 1$

Reakcija 1 pomeni razpad molekule A na B in C, kar je ponazorjeno s pripadajočim stohastičnim procesom. Pri reakciji 2 reagirata molekuli C in D, kar vodi do nastanka molekule E, medtem ko pri reakciji 3 reakcija med B in C vodi do nastanka F. Verjetnost reakcije je podana s hitrostnimi konstantami k_1 , k_2 in k_3 .

Algoritem za simulacijo tega sistema je naslednji:

1. Inicializacija – vnesemo vrednosti parametrov, začetne vrednosti števila molekul, čas postavimo na 0.
2. Izračunamo reakcijske gostote verjetnosti v zgornji tabeli in njihovo vsoto a_0 (en. (*7)).
3. Generiramo 2 naključni števili med 0 in 1 in izračunamo čas naslednje reakcije τ (en. (*12)) ter določimo, katera reakcija se bo zgodila (en. (*16)).
4. V skladu z izbrano reakcijo, spremenimo število posameznih molekul, kot to veleva reakcijska shema. Nato se vrnemo na korak 2.

V nadaljevanju je naveden osrednji del programa v C++ in primer rešitve (slika 41) za dve različni začetni vrednosti števila molekul.

```
int _tmain()
{
    seed(time(NULL));
    out=fopen("stevmolVScas.dat","w");
    fclose(out);

    // vrednosti parametrov
    k1=1.5;
    k2=0.1;
    k3=0.001;

    M=3; // st. vseh moznih reakcij

    // zacetni pogoji
    A=150.0;
```

```

B=0.0;
C=0.0;
D=50.0;
E=0.0;
t=0.0;
i=0;

while (t<=8)
{
    an[1]=k1*A; // reak. verj. za reakcijo 1
    an[2]=k2*C*D; // reak. verj. za reakcijo 2
    an[3]=k3*C*B; // reak. verj. za reakcijo 2

    a0=0;
    for (j=1;j<=M;j++) // vsota vseh reak. verj.
    {
        a0=a0+an[j];
    }
    r1=randd(); // naklj. st. med 0 in 1
    tau=1/a0*log(1/r1); // cas naslednje reakcije

    j=1;
    r2=randd(); // naklj. st. med 0 in 1
    ani=0.0;
    while (ani<r2) // doloci reakcijo
    {
        ani=ani+(an[j]/a0);
        j=j+1;
    }
    ni=j-1;

    if (ni==1) // dogodki ob izbrani reakciji 1
    {
        A=A-1;
        B=B+1;
        C=C+1;
    }
    if (ni==2) // dogodki ob izbrani reakciji 2
    {
        C=C-1;
        D=D-1;
        E=E+1;
    }
    if (ni==3) // dogodki ob izbrani reakciji 3
    {
        B=B-1;
        C=C-1;
        F=F+1;
    }

    t=t+tau;
}

```

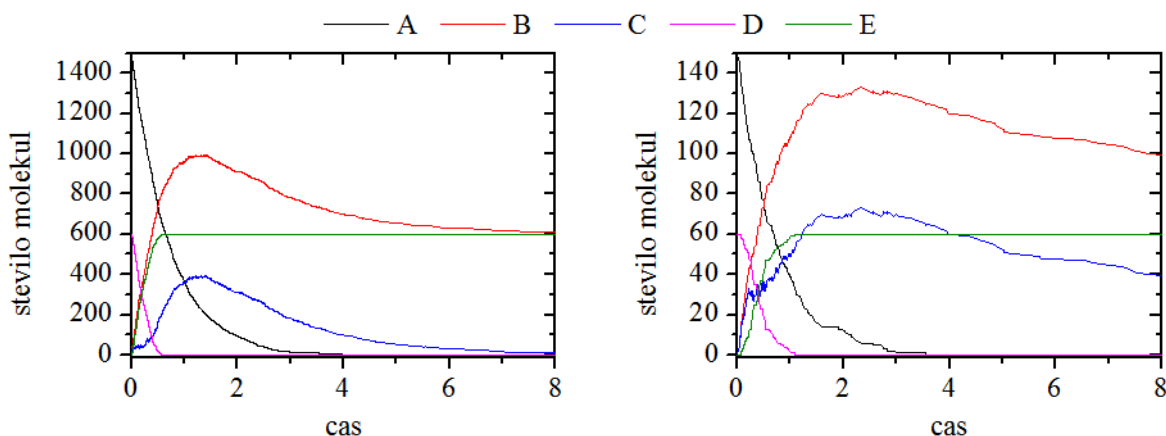
```

i++;

if (i % 10 == 0) // v datoteko zapise vsako deseto točko
{
    out=fopen("stevmolVScas.dat","a");
    fprintf(out,"% .6lf % .6lf % .6lf % .6lf % .6lf % .6lf\n",t,A,B,C,D,E);
    fclose(out);
}

return 0;
}

```



Slika 41: Stohastični rešitvi reakcijske sheme podane v en. (*17) za dve različni začetni števili molekul A in D. Začetne vrednosti števil vseh drugih molekul so bile 0. Opazimo, da so fluktuacije izrazite le pri majhnem številu molekul, medtem ko se z večanjem števila delcev približujemo deterministični limiti.

Nekaj člankov sodelavcev FNM na temo stohastičnega modeliranja:

PERC, Matjaž, GOSAK, Marko, MARHL, Marko. From stochasticity to determinism in the collective dynamics of diffusively coupled cells. *Chemical Physics Letters*, ISSN 0009-2614. [Print ed.], 421 (2006), 106

PERC, Matjaž, GOSAK, Marko, MARHL, Marko. Periodic calcium waves in coupled cells induced by internal noise. *Chemical Physics Letters*, ISSN 0009-2614. [Print ed.], 437 (2007) 1/3, 143

GOSAK, Marko, MARHL, Marko, PERC, Matjaž. Spatial coherence resonance in excitable biochemical media induced by internal noise. *Biophysical chemistry*, ISSN 0301-4622. [Print ed.], 128 (2007) 2/3, 210

GOSAK, Marko, MARHL, Marko, PERC, Matjaž. Chaos out of internal noise in the collective dynamics of diffusively coupled cells. *The European physical journal. B, Condensed matter physics*, ISSN 1434-6028, 62 (2008) 2, 171

GOSAK, Marko, MARHL, Marko, PERC, Matjaž. Pacemaker-guided noise-induced spatial periodicity in excitable media. *Physica D*, ISSN 0167-2789. [Print ed.], 238 (2009) 5, 506

MARHL, Marko, GOSAK, Marko, PERC, Matjaž, ROUX, Etienne. Importance of cell variability for calcium signaling in rat airway myocytes. *Biophysical chemistry*, ISSN 0301-4622. [Print ed.], 148 (2010) 1/3, 42 ♠

LITERATURA

1. Kuščer I., Kodre A., Matematika v fiziki in tehniki, DMFA, Ljubljana 1994.
2. Arfken J. B., Mathematical Methods for Physicists, Academic Press, New York, S. Francisco, London 1970.
3. Harper C., Introduction to Mathematical Physics, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 1976.
4. Budak B. M., Samarskii A. A., Tikhonov A. N., A collection of problems on Mathematical Physics, Pergamon Press, New York 1980.
5. Bitsadze V., Kalinichenko D. F., A Collection of problems on the Equations of Mathematical Physics, Mir Publishers, Moscow 1980.
6. Riley K. F., Hobson M. P., Bence S.J., Mathematical Methods for Physics and Engineering, Cambridge University Press, Cambridge 2000.
7. Landau L. D., Lifshitz E. M., Quantum mechanics, Course of theoretical physics, Vol. 3, Pergamon Press Ltd., Oxford 1977.
8. Podgornik R., Vilfan A., Elektromagnetno polje, DMFA, Ljubljana 2012.
9. Bohte Z., Numerične metode, DMFA, Ljubljana 1987.
10. Press W. H., Flannery B. P., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Numerical recipes in Pascal, Cambridge University Press, Cambridge 1990.
11. Jamnik R., Verjetnostni račun in statistika, DMFA, Ljubljana 1995.
12. Križanič F., Vidau I., Navadne in parcialne diferencialne enačbe, variacijski račun, DMFA, Ljubljana 1991.
13. Landau L. D., Lifshitz E. M., Theory of elasticity, Course of theoretical physics, Vol. 7, Pergamon Press Ltd., Oxford 1959.
14. Blundell S. J., Blundell K. M., Concepts in Thermal Physics, Oxford University Press, Oxford 2006.
15. Arčon D., Rešene naloge iz elektromagnetnega polja, Zbirka izbranih poglavij iz fizike, 48, DMFA, Ljubljana 2010.
16. Landau L. D., Lifshitz E. M., Fluid Mechanics, Course of theoretical physics, Vol. 6, Pergamon Press, Oxford 1959.
17. Suhadolc A., Integralske transformacije, integralske enačbe, DMFA, Ljubljana 1994.
18. Križanič F., Navadne diferencialne enačbe in variacijski račun, DZS, Ljubljana 1974.
19. Pahor S., Uvod v analitično mehaniko, DMFA, Ljubljana 1989.
20. Goldstein H., Poole C., Safko J., Classical mechanics, Addison Wesley, New York 2002.
21. Kevorkian J., Partial Differential Equations. Belmont: California Wadsworth Brooks/Cole, 1990.
22. Ashcroft N. W., Mermin N. D., Solid State Physics, W. B. Saunders Company, USA 1976.
23. Vidav I., Variacijski račun, DMFA, Ljubljana 1991.
24. De Gennes P. G., Prost J., The Physics of Liquid Crystals, Oxford University Press, Oxford 1993.

