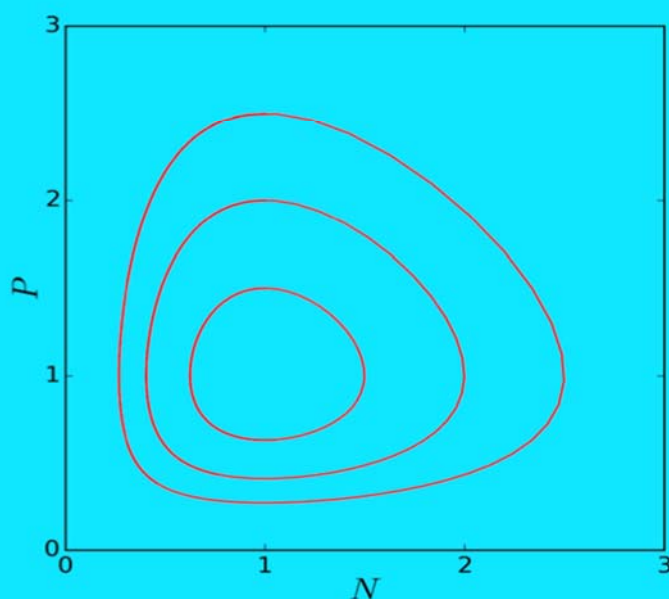
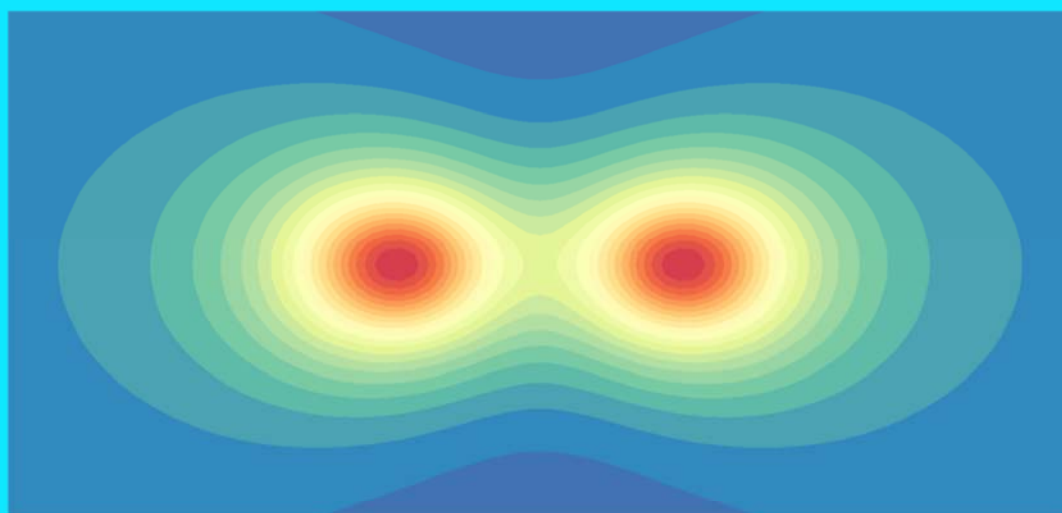


Μαθηματική Μοντελοποίηση

Μια Σπουδή στις Φυσικές Επιστήμες

Σταύρος Κομηνέας
Ευάγγελος Χαρμανδάρης



$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= N(a - bP) \\ \frac{dP}{dt} &= P(cN - d)\end{aligned}$$



Ελληνικά Ακαδημαϊκά Ηλεκτρονικά
Συγγράμματα και Βοηθήματα
www.kallipos.gr

HEALLINK
Σύνδεσμος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
Πρόσκληση προς υποβολή προτάσεων
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Μαθηματική Μοντελοποίηση

Μία σπουδή στις Φυσικές Επιστήμες

Σταύρος Κομηνέας Ευάγγελος Χαρμανδάρης

Τμήμα Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών

Πανεπιστήμιο Κρήτης



Ελληνικά Ακαδημαϊκά Ηλεκτρονικά
Συγγράμματα και Βοηθήματα
www.kallipos.gr

Μαθηματική Μοντελοποίηση
Μία σπουδή στις Φυσικές Επιστήμες

Συγγραφή
Σταύρος Κομηνέας
Ευάγγελος Χαρμανδάρης

Κριτικός Αναγνώστης
Ιωάννης Στρατής

Συντελεστές Έκδοσης

Γλωσσική Επιμέλεια : Σταύρος Κομηνέας, Ευάγγελος Χαρμανδάρης
Τεχνική Επιμέλεια : Σταύρος Κομηνέας, Ευάγγελος Χαρμανδάρης
Γραφιστική Επιμέλεια : Σταύρος Κομηνέας, Ευάγγελος Χαρμανδάρης

ISBN: 978-960-603-425-1

Copyright © ΣΕΑΒ, 2015



Το παρόν έργο αδειοδοτείται υπό τους όρους της άδειας Creative Commons Αναφορά Δημιουργού - Μη Εμπορική Χρήση - Παρόμοια Διανομή 3.0. Για να δείτε ένα αντίγραφο της άδειας αυτής επισκεφτείτε τον ιστότοπο

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/gr/>

ΣΥΝΔΕΣΜΟΣ ΕΛΛΗΝΙΚΩΝ ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΩΝ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΩΝ

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15780 Ζωγράφου

<http://www.kallipos.gr>

Περιεχόμενα

| | |
|---|-------------|
| Κατάλογος σχημάτων | viii |
| Ακρωνύμια | xiii |
| Πρόλογος | 1 |
| Εισαγωγή | 3 |
| 1 Εισαγωγή – Διαστατική Ανάλυση | 7 |
| 1.1 Τι είναι η Μαθηματική Μοντελοποίηση; | 8 |
| 1.1.1 Ιστορικά Στοιχεία | 9 |
| 1.1.2 Διαδικασία Μαθηματικής Μοντελοποίησης | 10 |
| 1.1.3 Παράμετροι / Μεταβλητές των Μοντέλων | 11 |
| 1.1.4 Μαθηματικά Εργαλεία | 11 |
| 1.2 Διαστατική Ανάλυση | 11 |
| 1.2.1 Μία Χημική Αντίδραση | 12 |
| 1.3 Μελέτη | 16 |
| 1.3.1 Ασκήσεις | 16 |
| 2 Αναλυτική Μηχανική | 17 |
| 2.1 Νόμοι του Νεύτωνα για σημειακά σωμάτια | 18 |
| 2.1.1 Θέση, ταχύτητα και τροχιά σωματίου | 18 |
| 2.1.2 Πολικές συντεταγμένες | 19 |
| 2.1.3 Νόμοι του Νεύτωνα | 20 |
| 2.1.4 Ενέργεια | 21 |
| 2.1.5 Δυναμική ενέργεια και δυνάμεις | 24 |
| 2.2 Εξισώσεις Euler-Lagrange και Hamilton | 29 |
| 2.2.1 Γενικευμένες συντεταγμένες | 29 |
| 2.2.2 Αρχή του Hamilton | 30 |
| 2.2.3 Ολοκλήρωμα δράσης | 30 |
| 2.2.4 Λαγκρανζιανή | 31 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.2.5 | Ενέργεια | 33 |
| 2.2.6 | Γενικευμένη ορμή | 34 |
| 2.2.7 | Γενικευμένες δυνάμεις | 35 |
| 2.2.8 | Μη-διατηρητικά συστήματα | 36 |
| 2.2.9 | Εξισώσεις Hamilton | 39 |
| 2.3 | Παράρτημα: Λογισμός μεταβολών | 40 |
| 2.3.1 | Μεταβολικά προβλήματα | 40 |
| 2.3.2 | Συνθήκη για ακρότατα | 42 |
| 2.3.3 | Εξισώσεις Euler-Lagrange | 43 |
| 2.4 | Μελέτη | 45 |
| 2.4.1 | Ασκήσεις | 45 |
| 2.4.2 | Εργασίες | 47 |
| 3 | Δυναμικά συστήματα | 49 |
| 3.1 | Συστήματα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης | 50 |
| 3.1.1 | Χώρος φάσεων | 50 |
| 3.1.2 | Συστήματα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με δύο μεταβλητές | 52 |
| 3.1.3 | Πραγματικές ιδιοτιμές | 53 |
| 3.1.4 | Μιγαδικές ιδιοτιμές | 58 |
| 3.1.5 | Κατάταξη σημείων ισορροπίας | 61 |
| 3.1.6 | Ευστάθεια σημείων ισορροπίας | 61 |
| 3.2 | Διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης | 63 |
| 3.2.1 | Το απλό εκκρεμές | 63 |
| 3.2.2 | Εξισώσεις δεύτερης τάξης ως σύστημα εξισώσεων πρώτης τάξης | 65 |
| 3.3 | Μη γραμμικά συστήματα | 67 |
| 3.4 | Μελέτη | 69 |
| 3.4.1 | Ασκήσεις | 69 |
| 3.4.2 | Εργασίες | 69 |
| 3.4.3 | Αλγόριθμοι / Κώδικες | 70 |
| 4 | Δυναμική Φορτίων - Δυναμική Δινών | 73 |
| 4.1 | Δυναμική φορτίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο | 74 |
| 4.1.1 | Φορτίο σε ηλεκτρικό πεδίο | 74 |
| 4.1.2 | Φορτίο σε μαγνητικό πεδίο | 74 |
| 4.1.3 | Φορτίο σε μαγνητικό πεδίο: Νόμοι διατήρησης | 76 |
| 4.1.4 | Φορτίο σε ομογενές ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο | 78 |
| 4.1.5 | Λαγκρανζιανή περιγραφή | 80 |
| 4.1.6 | Χαμιλτονιανή περιγραφή | 81 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4.1.7 | Κίνηση ζεύγους φορτίων σε μαγνητικό πεδίο | 82 |
| 4.1.8 | Δύναμη τριβής στην κίνηση φορτίου | 84 |
| 4.2 | Δυναμική δινών σε ρευστά και στη συμπτυκνωμένη ύλη | 86 |
| 4.2.1 | Δίνες σε ρευστά και στη συμπτυκνωμένη ύλη | 86 |
| 4.2.2 | Δυναμική σημειακών δινών | 88 |
| 4.2.3 | Ζεύγος αλληλεπιδρυσών δινών: Διατηρήσιμες ποσότητες | 89 |
| 4.2.4 | Ζεύγος αλληλεπιδρυσών δινών: Τροχιές | 90 |
| 4.2.5 | Σύστημα N αλληλεπιδρυσών δινών | 94 |
| 4.2.6 | Σύστημα τριών δινών | 95 |
| 4.2.7 | Χαμιλτονιανή περιγραφή | 96 |
| 4.2.8 | Λαγκρανζιανή περιγραφή | 97 |
| 4.3 | Μελέτη | 98 |
| 4.3.1 | Ασκήσεις | 98 |
| 4.3.2 | Εργασίες | 99 |
| 5 | Μαθηματική Βιολογία – Πληθυσμιακά Μοντέλα Ενός Είδους | 103 |
| 5.1 | Εισαγωγή: Μαθηματική Μοντελοποίηση Βιολογικών Συστημάτων | 104 |
| 5.1.1 | Ένα πρώτο παράδειγμα | 104 |
| 5.1.2 | Σπουδαιότητα Μαθηματικής Βιολογίας | 105 |
| 5.1.3 | Ιστορικά Στοιχεία | 106 |
| 5.1.4 | Μαθηματικά Μοντέλα στη Βιολογία | 107 |
| 5.2 | Συνεχή Πληθυσμιακά Μοντέλα Ενός Είδους | 107 |
| 5.2.1 | Μαλθουσιανό – Εκθετικό Μοντέλο | 108 |
| 5.2.2 | Λογιστικό Μοντέλο | 110 |
| 5.2.3 | Παράδειγμα: Μοντέλο με Συγκομιδή (Αλιεία) | 114 |
| 5.3 | Διακριτά Πληθυσμιακά Μοντέλα Ενός Είδους | 115 |
| 5.3.1 | Διακριτό Μαλθουσιανό Μοντέλο | 116 |
| 5.3.2 | Διακριτό Λογιστικό Μοντέλο | 117 |
| 5.3.3 | Παράδειγμα: Διακριτό Μοντέλο Ανάπτυξης Καρκινικών Κυττάρων | 120 |
| 5.4 | Μελέτη | 121 |
| 5.4.1 | Ασκήσεις | 121 |
| 5.4.2 | Εργασίες | 124 |
| 6 | Μαθηματική Βιολογία – Μοντέλα Αλληλεπιδρώντων Πληθυσμών | 127 |
| 6.1 | Συνεχή Μοντέλα Αλληλεπιδρώντων Πληθυσμών | 128 |
| 6.1.1 | Μοντέλα Τύπου Θηράματος–Θηρευτή: Lotka–Volterra | 128 |
| 6.1.2 | Μοντέλα Ανταγωνισμού | 134 |
| 6.1.3 | Μοντέλα Συμβίωσης | 135 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 6.2 | Διακριτά Μοντέλα Αλληλεπιδρώντων Πληθυσμών | 136 |
| 6.2.1 | Διακριτά Μοντέλα Θηράματος–Θηρευτή | 136 |
| 6.2.2 | Διακριτά Μοντέλα Ανταγωνισμού | 138 |
| 6.2.3 | Διακριτά Μοντέλα Συμβίωσης | 139 |
| 6.3 | Μοντέλα Επιδημιών | 139 |
| 6.3.1 | Συνεχές Επιδημιολογικό Μοντέλο SIR | 140 |
| 6.3.2 | Διακριτό Επιδημιολογικό Μοντέλο SIR | 142 |
| 6.3.3 | Παραλλαγές των Επιδημιολογικών Μοντέλων SIR | 142 |
| 6.4 | Μελέτη | 144 |
| 6.4.1 | Ασκήσεις | 144 |
| 6.4.2 | Εργασίες | 145 |
| 6.4.3 | Αλγόριθμοι / Κώδικες | 146 |
| 7 | Στοχαστικά Συστήματα – Μέθοδοι Monte Carlo | 151 |
| 7.1 | Εισαγωγή: Στοχαστικά Συστήματα | 152 |
| 7.1.1 | Ντετερμινιστικά – Στοχαστικά Συστήματα | 152 |
| 7.1.2 | Πιθανότητες – Στοχαστικές Διεργασίες | 153 |
| 7.2 | Αλγόριθμοι Monte Carlo | 153 |
| 7.2.1 | Ένα πρώτο παράδειγμα | 154 |
| 7.2.2 | Ιστορικά στοιχεία | 155 |
| 7.3 | Γεννήτριες Τυχαίων Αριθμών | 156 |
| 7.3.1 | Ομοιόμορφη Κατανομή | 157 |
| 7.3.2 | Αντίστροφη Μέθοδος | 159 |
| 7.3.3 | Κανονική Κατανομή | 161 |
| 7.3.4 | Μέθοδοι Αποδοχής – Απόρριψης | 162 |
| 7.4 | Αλγόριθμοι Monte Carlo Μαρκοβιανών Αλυσίδων | 163 |
| 7.4.1 | Μαρκοβιανές Αλυσίδες | 163 |
| 7.4.2 | Αλγόριθμος Metropolis | 165 |
| 7.4.3 | Αλγόριθμος Metropolis – Hastings | 166 |
| 7.5 | Παράδειγμα – Μοριακό Μοντέλο Σκληρών Σφαιρών | 166 |
| 7.6 | Μελέτη | 168 |
| 7.6.1 | Ασκήσεις | 168 |
| 7.6.2 | Εργασίες | 170 |
| 7.6.3 | Αλγόριθμοι / Κώδικες | 171 |
| A΄ | Βασικά μαθηματικά εργαλεία | 177 |
| A΄.1 | Διανύσματα | 178 |
| A΄.1.1 | Εσωτερικό γινόμενο | 178 |

| | |
|--|------------|
| Α΄.1.2 Εξωτερικό γινόμενο διανυσμάτων | 178 |
| Α΄.2 Γραμμική Άλγεβρα – Ιδιοτιμές και Ιδιοδιανύσματα Πινάκων | 179 |
| Α΄.2.1 Το πρόβλημα των ιδιοτιμών | 179 |
| Α΄.2.2 Ιδιοδιανύσματα | 180 |
| Α΄.2.3 Ιδιότητες ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων | 182 |
| Α΄.2.4 Διαγωνιοποίηση πινάκων | 182 |
| Α΄.2.5 Λύσεις συστημάτων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης με σταθερούς συντε- λεστές | 184 |
| Α΄.3 Πιθανότητες | 185 |
| Α΄.3.1 Βασικοί Ορισμοί – Ιδιότητες | 185 |
| Α΄.3.2 Τυχαίες Μεταβλητές | 185 |
| Α΄.3.3 Σύγκλιση Τυχαίων Μεταβλητών | 187 |
| Λεξικό Αγγλικών Όρων | 189 |
| Ευρετήριο | 191 |

Κατάλογος σχημάτων

| | | |
|-----|--|-----|
| 1.1 | Διαδικασία μαθηματικής μοντελοποίησης | 10 |
| 1.2 | Χημικός αντιδραστήρας | 12 |
| 2.1 | Κυκλική κίνηση | 19 |
| 2.2 | Πολικές συντεταγμένες | 20 |
| 2.3 | Απλό εκκρεμές | 25 |
| 2.4 | Δυναμικό Lennard Jones | 27 |
| 2.5 | Δυναμικό με τοπικό ελάχιστο | 28 |
| 3.1 | Σαγματικό σημείο | 55 |
| 3.2 | Κόμβος | 56 |
| 3.3 | Είδη σημείων ισορροπίας | 62 |
| 3.4 | Διάγραμμα φάσεων για το απλό εκκρεμές. | 64 |
| 3.5 | Κέντρο | 66 |
| 3.6 | Διάγραμμα φάσεων με σάγμα και εστία | 68 |
| 4.1 | Δίνες σε υπερευστά | 87 |
| 4.2 | Ζεύγος μαγνητικών δινών | 88 |
| 4.3 | Τροχιές ζεύγους δινών | 90 |
| 5.1 | Εκθετικό μοντέλο | 109 |
| 5.2 | Λογιστικό μοντέλο | 113 |
| 5.3 | Λογιστικό μοντέλο με συγκομιδή | 115 |
| 5.4 | Διακριτό Λογιστικό μοντέλο | 118 |
| 5.5 | Διακριτό Λογιστικό μοντέλο για μεγάλους ρυθμούς ανάπτυξης | 120 |
| 5.6 | Διάγραμμα διακλάδωσης διακριτού Λογιστικού μοντέλου | 121 |
| 5.7 | Μοντέλο ανάπτυξης καρκινικών κυττάρων | 122 |
| 6.1 | Συνεχές μοντέλο Lotka–Volterra, εξέλιξη πληθυσμών | 131 |
| 6.2 | Συνεχές μοντέλο Lotka–Volterra, διάγραμμα φάσεων | 132 |
| 6.3 | Μοντέλο θηρευτή–θηράματος | 133 |
| 6.4 | Διακριτό μοντέλο Lotka–Volterra, εξέλιξη πληθυσμών, χώρος φάσεων | 137 |

| | | |
|-----|--|-----|
| 6.5 | Διακριτό μοντέλο Lotka–Volterra, διάγραμμα φάσεων | 138 |
| 7.1 | Υπολογισμός του π | 155 |
| 7.2 | Υπολογισμός του π με τη μέθοδο του Buffon | 156 |
| 7.3 | Ομοιόμορφη κατανομή από τον αλγόριθμο «συμβατική γεννήτρια» | 159 |
| 7.4 | Συσχέτιση τυχαίων αριθμών για τον αλγόριθμο συμβατική γεννήτρια. | 160 |
| 7.5 | Ομοιόμορφη κατανομή από τον αλγόριθμο Mersenne Twister. | 161 |
| 7.6 | Κανονική κατανομή από τον αλγόριθμο Box-Muller | 162 |
| 7.7 | Δυναμικό αλληλεπίδρασης μοντέλου σκληρών σφαιρών. | 167 |
| 7.8 | Πείραμα της Βροχής | 169 |

Ακρωνύμια

MCMC Markov Chain based Monte Carlo.

ΔΣ Δυναμικά Συστήματα.

ΜΔΕ Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις.

ΠΑΤ Πρόβλημα Αρχικών Τιμών.

ΣΔΕ Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις.

ΣΙ Σημείο Ισορροπίας.

ΤΙ Τιμή Ισορροπίας.

Πρόλογος

Το βιβλίο αυτό έρχεται να καλύψει ένα κενό στην ελληνική βιβλιογραφία στο επίπεδο της προπτυχιακής εκπαίδευσης. Η μαθηματική μοντελοποίηση αποτελεί ένα θέμα που αποκτά ολοένα και μεγαλύτερη βαρύτητα στα σύγχρονα μαθηματικά και σαν συνέπεια αυτού αρκετά βιβλία με σχετική θεματολογία έχουν εκδοθεί τα τελευταία χρόνια στη διεθνή βιβλιογραφία. Η διαμόρφωση της θεματολογίας του παρόντος συγγράμματος και η επεξεργασία των θεμάτων έγινε τα τελευταία χρόνια κατά τη διδασκαλία του αντίστοιχου μαθήματος του προπτυχιακού προγράμματος αρχικά στο Τμήμα Εφαρμοσμένων Μαθηματικών (έως το 2013) και ακολούθως στο Τμήμα Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Κρήτης.

Εισαγωγή

Τα μαθηματικά έχουν χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη φαινομένων του πραγματικού κόσμου, αλλά και δημιουργημάτων του ανθρώπου, από την αρχαιότητα έως σήμερα. Πράγματι, στην προσπάθεια του ανθρώπου να επιλύσει βασικά του προβλήματα, και να αναπτύξει πολιτισμό, βασικό ρόλο έπαιξε η περιγραφή φαινομένων ή διαδικασιών με τη χρήση μαθηματικών εννοιών και συμβόλων. Αυτή τη μαθηματική περιγραφή συνήθως την ονομάζουμε μαθηματικό μοντέλο.

Το παρόν σύγγραμμα αφορά τη Μαθηματική Μοντελοποίηση, δηλαδή τη διαδικασία ανάπτυξης ενός μαθηματικού μοντέλου, το οποίο στην πολύ γενική περιγραφή αφορά φαινόμενα, δραστηριότητες ή διαδικασίες που μπορούν να προέρχονται από τελείως διαφορετικά επιστημονικά πεδία, όπως από τις φυσικές επιστήμες, τις επιστήμες της μηχανικής, τα οικονομικά, τις κοινωνικές επιστήμες αλλά και τις ανθρωπιστικές σπουδές. Από όλα τα παραπάνω πιθανά επιστημονικά πεδία, εδώ θα εστιάσουμε στα μαθηματικά μοντέλα που αφορούν κυρίως τις φυσικές επιστήμες, όπως φαίνεται και από τον υπότιτλο του βιβλίου.

Γιατί όμως χρειάζεται ένα εξειδικευμένο βιβλίο μαθηματικής μοντελοποίησης; Για να απαντήσουμε στην ερώτηση αυτή θα πρέπει να σκεφτούμε τη σημαντικότητα του αντικείμενου στην εποχή μας. Πράγματι η αλματώδης εξέλιξη της τεχνολογίας στην εποχή μας έχει συνδεθεί με την χρήση υπαρχόντων και την ανάπτυξη νέων καινοτόμων μαθηματικών εργαλείων και εννοιών με στόχο την εφαρμογή τους σε μια πληθώρα διαφορετικών πεδίων όπως τη νανοτεχνολογία, τα σύγχρονα υλικά, τη βιοτεχνολογία και τη μοριακή ιατρική, με πολύ σημαντικές επιπτώσεις στην καθημερινή ζωή των ανθρώπων. Σε όλα αυτά τα πεδία απαιτείται η ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων για το σχεδιασμό και τη βελτίωση καινοτόμων διαδικασιών. Για αυτό το λόγο στις μέρες μας η μαθηματική μοντελοποίηση αποτελεί πλέον βασικό αντικείμενο στις προπτυχιακές και μεταπτυχιακές σπουδές πανεπιστημιακών τμημάτων των φυσικών επιστημών και της μηχανικής, είτε ως αυτοτελές μάθημα είτε σε συνδυασμό με συγγενή επιστημονικά πεδία.

Βασικό αντικείμενο λοιπόν του συγγράμματος είναι παρουσίαση βασικών στοιχείων μαθηματικής μοντελοποίησης με εφαρμογές κυρίως στις φυσικές επιστήμες. Κύριοι στόχοι του βιβλίου είναι οι εξής:

- Πρώτον, να παρουσιάσουμε τις βασικές αρχές της μαθηματικής μοντελοποίησης και πιο συγκεκριμένα του τρόπου ανάπτυξης μοντέλων για τη μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς πραγματικών πολύπλοκων συστημάτων.
- Δεύτερον, να μελετήσουμε εκτενώς παραδείγματα μαθηματικών μοντέλων τα οποία αφορούν κυρίως τις Φυσικές επιστήμες, προέρχονται δηλαδή από τη Φυσική, τη Χημεία και τη Βιολογία.
- Για την επίτευξη των παραπάνω είναι απαραίτητη η παρουσίαση των μαθηματικών εργαλείων που απαιτούνται για τη μελέτη – επίλυση των μαθηματικών μοντέλων. Αυτό αποτελεί επίσης ένα βασικό στόχο του συγγράμματος.

Ας δούμε όμως πολύ σύντομα τα βήματα μελέτης ενός φαινομένου μέσω της μαθηματικής μοντελοποίησης

- Το πρώτο βήμα αφορά τη συλλογή δεδομένων από πειραματικές μετρήσεις, για ένα συγκεκριμένο φαινόμενο ή διαδικασία.

- Το δεύτερο, την ανάπτυξη των μαθηματικών εννοιών και σχέσεων που περιγράφουν το φαινόμενο (δηλαδή του μαθηματικού μοντέλου) μέσω κατάλληλων υποθέσεων/παραδοχών.
- Το τρίτο, την επίλυση του μοντέλου με χρήση διαφόρων μαθηματικών εργαλείων.
- Το τελευταίο βήμα σχετίζεται με τον έλεγχο των προβλέψεων/αποτελεσμάτων του μοντέλου μέσω πειραματικών παρατηρήσεων, και στην περίπτωση που αυτές δεν είναι ικανοποιητικές τη πιθανή βελτίωση του μοντέλου και των υποθέσεων στις οποίες αυτό έχει βασισθεί.

Σχεδιασμός του βιβλίου. Λόγω ακριβώς της γενικότητας και του εύρους των εφαρμογών των μαθηματικών μοντέλων, το αντικείμενο της μαθηματικής μοντελοποίησης μπορεί να παρουσιασθεί σε ένα σύγγραμμα με διαφορετικούς τρόπους, οι οποίοι συνήθως εμπίπτουν σε δύο διαφορετικές κατηγορίες. Η πρώτη αφορά την παρουσίαση ανάλογα με τα φαινόμενα – προβλήματα τα οποία εξετάζονται. Η δεύτερη την παρουσίαση ανάλογα με τα *μαθηματικά εργαλεία* που χρησιμοποιούνται. Στο παρόν σύγγραμμα ακολουθούμε την πρώτη μέθοδο, καθώς θεωρούμε ότι η ανάγκη για διακριτή συστηματική μελέτη των μαθηματικών μοντέλων προκύπτει: (α) από το μεγάλο εύρος πιθανών συστημάτων υπό μελέτη και (β) από την κοινή μεθοδολογία σε διαφορετικά προβλήματα. Επίσης θεωρούμε ότι ο τρόπος αυτός είναι καταλληλότερος από εκπαιδευτικής πλευράς καθώς παρουσιάζει τα μαθηματικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται, και πολύ συχνά έχουν ήδη διδαχθεί οι φοιτητές στα βασικά μαθήματα ενός πρώτου κύκλου (1 ή 2 ετών) των προπτυχιακών τους σπουδών, σε συνέργεια με πραγματικά προβλήματα. Θα πρέπει να τονίσουμε ότι υπό την παραπάνω έννοια είναι εξαιρετικά σημαντική η επίλυση παραδειγμάτων, προβλημάτων και εργασιών, κάτι που αποτελεί βασικό χαρακτηριστικό του συγγράμματος.

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω τα θέματα της Μαθηματικής Μοντελοποίησης εκτείνονται σε όλο το εύρος των επιστημών διότι τα φαινόμενα για τα οποία μία ποσοτική περιγραφή τους μπορεί να κριθεί χρήσιμη είναι ευρύτατα. Για να προκύψει μία συστηματική εργασία σε αυτόν τον τομέα είναι λοιπόν ανάγκη να εντοπίσει κανείς το ενδιαφέρον του περιορίζοντάς το σε ορισμένες επιστήμες και σε ορισμένα μόνο θέματα. Στο παρόν σύγγραμμα έχουμε περιορισθεί στην περιγραφή μαθηματικών μοντέλων στις θετικές επιστήμες.

Πιο συγκεκριμένα η δομή του βιβλίου είναι η εξής. Το πρώτο κεφάλαιο είναι μια σύντομη εισαγωγή στη μαθηματική μοντελοποίηση. Αναφέρονται βασικές έννοιες που σχετίζονται με την ανάπτυξη και μαθηματική θεμελίωση μοντέλων, περιγράφονται βασικά μαθηματικά εργαλεία αναπτύσσοντας εκτενώς τη διαστατική ανάλυση – αδιαστατοποίηση. Τα επόμενα δύο κεφάλαια είναι αφιερωμένα σε κλασικά θέματα της επιστήμης πάνω στα οποία μπορούν να βασισθούν νεότεροι κλάδοι. Πιο συγκεκριμένα το κεφάλαιο 2 περιγράφει την κλασική μηχανική με βάση τους νόμους του Νεύτωνα αλλά και τον Λαγκρανζιανό και τον Χαμιλτονιανό φορμαλισμό. Το κεφάλαιο 3 είναι μια εκτενής εισαγωγή στα δυναμικά συστήματα, περιγράφοντας βασικές έννοιες και τεχνικές, δίνοντας ιδιαίτερο βάρος σε συστήματα συνήθων διαφορικών εξισώσεων, περιγράφοντας τα σημεία ισορροπίας και την ευστάθειά τους, αναδεικνύοντας με αυτό τον τρόπο τη χρησιμότητά τους στην κατανόηση ιδιοτήτων των μαθηματικών μοντέλων. Κατόπιν στο κεφάλαιο 4 δίνεται μια λεπτομερής μελέτη της κίνησης φορτίων υπό την επίδραση ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου. Τα δύο επόμενα κεφάλαια 5 και 6 αφορούν μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν βιολογικά συστήματα. Πιο συγκεκριμένα, στο κεφάλαιο 5 περιγράφονται συνεχή και διακριτά πληθυσμιακά μοντέλα ενός είδους, ενώ στο κεφάλαιο 6 πληθυσμιακά μοντέλα αλληλεπιδρώντων ειδών καθώς και επιδημιολογικά μοντέλα. Τέλος στο κεφάλαιο 7 δίνεται μια σύντομη εισαγωγή στη μαθηματική μοντελοποίηση στοχαστικών συστημάτων και πιο ειδικά με τις μεθόδους Monte Carlo. Στο παράρτημα του βιβλίου δίνεται μια συνοπτική παρουσίαση βασικών μαθηματικών εργαλείων από τα διανύσματα, τη γραμμική άλγεβρα, τις διαφορικές εξισώσεις, και τις πιθανότητες. Στα περισσότερα κεφάλαια του βιβλίου υπάρχουν παραδείγματα λυμένα με χρήση υπολογιστικών αλγορίθμων.

Το σύγγραμμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διδασκαλία σε ένα έως δύο διδακτικά εξάμηνα, με επιθυμητή χρήση υπολογιστικών εργαστηρίων, σε ένα τυπικό τμήμα μαθηματικών ή εφαρμοσμένων μαθηματικών. Η διδασκαλία του συνόλου των θεμάτων θα απαιτούσε περισσότερο του ενός εξαμήνου. Για την περίπτωση ενός εξαμηνιαίου μαθήματος προτείνουμε την πλήρη διδασκαλία των κεφαλαίων 1, 2 και 3 καθώς και επιλογή θεμάτων από τα επόμενα κεφάλαια. Πιο συγκεκριμένα η διδασκαλία του

κεφαλαίου 5 έχει ως βάση το κεφάλαιο 2, ενώ αυτή των κεφαλαίων 5 και 6, το κεφάλαιο 3.

Η χρήση του συγγράμματος μπορεί να γίνει με διαφορετικούς τρόπους ανάλογα με το υπόβαθρο των φοιτητών, το επιστημονικό πεδίο που θεραπεύει το τμήμα, και το αν πρόκειται να διδαχθεί σε ένα πλήρες διδακτικό εξάμηνο. Γενικότερα προτείνουμε αρχικά τη διδασκαλία των δύο πρώτων κεφαλαίων, στα οποία μπορούν να προστεθούν νεότερα θέματα τα οποία αναπτύσσονται στα επόμενα κεφάλαια. Περιγράφουμε ορισμένες από τις δυνατότητες για την περίπτωση ενός εξαμηνιαίου μαθήματος. (α) Μετά την διδασκαλία του κεφαλαίου 2 μπορεί να ακολουθήσει το κεφάλαιο 4. Αυτό θα αποτελούσε ένα μεγάλο μέρος ενός εξαμηνιαίου μαθήματος που αφορά τη δυναμική σωμάτων στις θετικές επιστήμες. (β) Μετά την διδασκαλία του κεφαλαίου 3 μπορεί να ακολουθήσει αυτή των κεφαλαίων 5 και 6. Αυτό θα αποτελούσε ένα μεγάλο μέρος ενός εξαμηνιαίου μαθήματος στην μαθηματική βιολογία. (γ) Μετά την διδασκαλία του κεφαλαίου 2 μπορεί να ακολουθήσει το κεφάλαιο 7. Αυτό θα αποτελούσε ένα μεγάλο μέρος ενός εξαμηνιαίου μαθήματος στην μελέτη και επίλυση μοντέλων με αριθμητικές μεθόδους στις θετικές επιστήμες. Σε κάθε περίπτωση προτείνουμε οποιοδήποτε θέμα επιλεγθεί να διδαχθεί να συνοδεύεται από εκτενή μελέτη και επίλυση αντίστοιχων παραδειγμάτων και αριθμητικών προσομοιώσεων.

Τέλος τονίζουμε ότι πέρα των θεμάτων που παρουσιάζονται εδώ, περισσότερο διαδραστικό υλικό υπάρχει στην ιστοσελίδα:

<http://modeling.tem.uoc.gr/>

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή – Διαστατική Ανάλυση

Περίληψη

Στο κεφάλαιο αυτό, δίνεται μια λεπτομερής εισαγωγή στη Μαθηματική Μοντελοποίηση. Αρχικά ορίζουμε το μαθηματικό μοντέλο ως την περιγραφή ενός φαινομένου – συστήματος με τη χρήση μαθηματικών εργαλείων. Κατόπιν, αναφέρονται συνοπτικά βασικές έννοιες της μαθηματικής μοντελοποίησης που σχετίζονται με την ανάπτυξη και μαθηματική θεμελίωση μοντέλων, τα οποία χρησιμοποιούνται σε διάφορες επιστημονικές περιοχές και στοχεύουν στην επίλυση θεωρητικών και τεχνολογικών προβλημάτων που εμφανίζονται σ' αυτές. Τέλος αναφέρονται συνοπτικά αναλυτικά και υπολογιστικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται για τη μαθηματική μοντελοποίηση πολύπλοκων προβλημάτων. Το δεύτερο μέρος του κεφαλαίου αφορά τη διαστατική ανάλυση – αδιαστατοποίηση. Η μαθηματική μελέτη ενός προβλήματος στις επιστήμες ξεκινάει με τη μορφοποίηση των εξισώσεων στην απλούστερη μορφή τους. Οι σταθερές που προέρχονται από το φυσικό σύστημα χρησιμοποιούνται για να ορισθούν οι κλίμακες του προβλήματος (κλίμακες για την απόσταση, τον χρόνο κλπ). Αυτές οι κλίμακες εντοπίζονται και χρησιμοποιούνται για να τεθεί το πρόβλημα σε λιτή μαθηματική μορφή. Η διαδικασία αυτή είναι επιπλέον χρήσιμη για την κατανόηση από μέρους του φοιτητή του τρόπου επινόησης και θέσης των προβλημάτων στις φυσικές και άλλες επιστήμες.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Απειροστικός λογισμός (απειροστές μεταβολές, παράγωγοι).
- Γραμμικές διαφορικές εξισώσεις πρώτης τάξης.

1.1 Τι είναι η Μαθηματική Μοντελοποίηση;

Τα μαθηματικά χρησιμοποιούνται εδώ και πολλές χιλιάδες χρόνια για τη μελέτη, την περιγραφή αλλά και την αξιοποίηση φαινομένων του φυσικού κόσμου που μας περιβάλλει, αλλά ακόμη και δημιουργημάτων της φαντασίας. Η μεγάλη χρησιμότητα των μαθηματικών προκύπτει από τη δυνατότητα, μέσω της χρήσης τους, να κάνουμε προβλέψεις για τα παραπάνω φαινόμενα, με άλλα λόγια να δημιουργούμε μοντέλα που αναπαριστούν τα υπό μελέτη φαινόμενα. Αυτός ακριβώς είναι ο στόχος της μαθηματικής μοντελοποίησης. Τι εννοούμε όμως με τον όρο «Μαθηματική Μοντελοποίηση»;

Ορισμός. (Mathematical Modeling) είναι η ανάπτυξη μαθηματικής περιγραφής ενός φαινομένου, ενός συστήματος ή μιας διαδικασίας και η μελέτη τους με τη χρήση μαθηματικών εργαλείων. Τα εργαλεία αυτά μπορεί να είναι ένα σύστημα εξισώσεων, ένα σύνολο αριθμών, ένας αλγόριθμος, μια στοχαστική διαδικασία κλπ. □

Με άλλα λόγια θα λέγαμε ότι Μαθηματική Μοντελοποίηση είναι η διαδικασία ανάπτυξης και η μελέτη ενός Μαθηματικού Μοντέλου.

Ορισμός. (Mathematical Model) είναι η περιγραφή ενός φαινομένου, ενός συστήματος ή μιας διαδικασίας χρησιμοποιώντας μαθηματικές έννοιες και σύμβολα. □

Η έννοια του φαινομένου, στον παραπάνω ορισμό, εμπεριέχει συστήματα από τελείως διαφορετικά επιστημονικά πεδία, όπως από τις φυσικές επιστήμες, τις επιστήμες της μηχανικής, τα οικονομικά, τις κοινωνικές επιστήμες αλλά και τις ανθρωπιστικές σπουδές. Ακριβώς λόγω του τεράστιου εύρους των πιθανών εφαρμογών, αντίστοιχα μεγάλος είναι και ο αριθμός των εν δυνάμει διαφορετικών μαθηματικών μοντέλων, όπως και των πιθανών μαθηματικών εργαλείων, τα οποία χρησιμοποιούνται για τη μελέτη και την επίλυση των μοντέλων.

Ας δούμε όμως, πιο συγκεκριμένα, τους στόχους ενός μαθηματικού μοντέλου. Πολύ συνοπτικά θα λέγαμε ότι οι στόχοι της μαθηματικής μοντελοποίησης ενός συγκεκριμένου συστήματος (φαινομένου) είναι οι εξής:

- Η μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς πολύπλοκων συστημάτων με τη χρήση των Μαθηματικών.
- Η χρήση και η ανάπτυξη νέων, μαθηματικών εργαλείων που απαιτούνται για τη επίλυση ενός μοντέλου.
- Η πρόβλεψη / προσομοίωση (prediction/simulation) συμπεριφορών και ιδιοτήτων πολύπλοκων συστημάτων μέσω των μαθηματικών μοντέλων.
- Ο έλεγχος των υποθέσεων ενός μοντέλου και η αντίστοιχη βελτίωσή του.

Το τελευταίο είναι ιδιαίτερα σημαντικός καθώς δεν υπάρχει το «τέλειο μοντέλο»: Όλα τα μοντέλα βασίζονται σε ορισμένες υποθέσεις και ακόμη και το ότι ένα μοντέλο μπορεί να αναπαράγει δεδομένα αποτελέσματα σε συμφωνία με πειραματικές παρατηρήσεις, αυτό δεν σημαίνει ότι οι υποθέσεις/παραδοχές του μοντέλου είναι σωστές!

Γιατί όμως χρειαζόμαστε υποθέσεις/παραδοχές για κάθε μαθηματικό μοντέλο ενός πραγματικού φαινομένου; Πρώτον, επειδή όλα τα πραγματικά συστήματα – φαινόμενα είναι ιδιαίτερα πολύπλοκα και αποτελούνται ή περιγράφονται από ένα τεράστιο εύρος (ακόμη και άπειρο πολλές φορές) διαφορετικών παραμέτρων. Δεύτερον, κανένα μαθηματικό μοντέλο δεν μπορεί να συμπεριλάβει όλες αυτές τις παραμέτρους, οι οποίες πολλές φορές είναι επιπλέον άγνωστες. Η τρίτη και σημαντικότερη παρατήρηση είναι ότι δεν απαιτείται από το μοντέλο να συμπεριλαμβάνει όλες τις πιθανές παραμέτρους που επηρεάζουν ένα σύστημα αλλά μόνο τις πιο σημαντικές.

Όπως αναφέραμε το μοντέλο διατυπώνεται με τη χρήση πολύ διαφορετικών μαθηματικών εργαλείων ενώ μπορεί να περιγράφει και τελείως διαφορετικά συστήματα. Για το λόγο αυτά όλα τα μαθηματικά μοντέλα μπορούν να περιγραφούν σε διαφορετικές κατηγορίες, όπως:

- Ανάλογα με το είδος των εξισώσεων που χρησιμοποιούνται: Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων.
- Ντετερμινιστικά / Στοχαστικά μοντέλα: ανάλογα με ύπαρξη ή μη τυχειότητας στο μοντέλο.
- Διακριτά / Συνεχή μοντέλα ανάλογα με το είδος των μεταβλητών που ορίζονται.
- Γραμμικά / Μη γραμμικά μοντέλα, ανάλογα με το αν οι μαθηματικές σχέσεις είναι γραμμικές ή όχι.
- Χρόνο-εξαρτώμενα / Χρόνο-ανεξάρτητα ανάλογα με το αν οι παράμετροι του προβλήματος μεταβάλλονται με το χρόνο.
- Μηχανιστικά / Περιγραφικά, ανάλογα με το αν προκύπτουν από βασικούς νόμους ή είναι περισσότερο μια ποιοτική περιγραφή του υπό μελέτη συστήματος
- ... κλπ.

1.1.1 Ιστορικά Στοιχεία

Ο ορισμός της μαθηματικής μοντελοποίησης που αναφέραμε παραπάνω είναι αρκετά γενικός και θα μπορούσε να συμπεριλάβει τη χρήση των μαθηματικών για τη μελέτη προβλημάτων, τα οποία σχετίζονται με συγκεκριμένα φαινόμενα, από την αρχαιότητα ακόμη.

Ως ένα από τα πρώτα πιο χαρακτηριστικά παραδείγματα μαθηματικής μοντελοποίησης αναφέρουμε τους νόμους του Νεύτωνα, οι οποίοι περιγράφουν τη δυναμική (χρονική εξέλιξη) μηχανικών συστημάτων που αποτελούνται από στερεά σώματα. Πιο σύγχρονα παραδείγματα αφορούν τη μελέτη βιολογικών συστημάτων, πολύπλοκων μοριακών υλικών και οικονομικών παραγωγών. Γενικά παραδείγματα μαθηματικής μοντελοποίησης είναι τα παρακάτω:

- Κλασική μηχανική.
- Κβαντική μηχανική.
- Εξισώσεις που περιγράφουν Κυματικά φαινόμενα.
- Μοντέλα που αφορούν βιολογικά συστήματα, ειδικότερα πληθυσμιακά μοντέλα τα οποία περιγράφουν την εξέλιξη των πληθυσμών βιολογικών ειδών.
- Μοντέλα χρηματοοικονομίας.
- Μοντέλα πολύπλοκων μοριακών υλικών σε διαφορετικές κλίμακες χωρικές και χρονικές.
- κλπ.

Η παραπάνω λίστα είναι κυριολεκτικά χωρίς τέλος, καθώς στις μέρες μας μαθηματικά μοντέλα χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν όλο και μεγαλύτερου εύρους φαινόμενα.

Εδώ χρειάζεται μια σημαντική διευκρίνιση. Η μαθηματική μελέτη πολύπλοκων φαινομένων – συστημάτων προϋποθέτει την ύπαρξη μαθηματικών σχέσεων, π.χ. εξισώσεων, οι οποίες περιγράφουν το υπό μελέτη σύστημα. Δεν υπάρχει όμως καμία καταρχήν απόδειξη περί της ύπαρξης τέτοιων σχέσεων. Επιπλέον, ακόμη και αν ο παρατηρητής υποθέσει ότι υπάρχουν τέτοιου τύπου μαθηματικοί νόμοι που μπορούν να περιγράψουν το φαινόμενο, δεν είναι βέβαιο ότι αυτές οι σχέσεις μπορούν να περιγράψουν πλήρως το υπό μελέτη σύστημα σε κάθε έκφανσή του.

Οι παραπάνω προβληματισμοί είναι ιδιαίτερα σημαντικοί αν αναλογιστούμε τη μεγάλη πολυπλοκότητα των πραγματικών συστημάτων. Μια διαφορετική προσέγγιση, σε σχέση με την αναζήτηση των απόλυτων νόμων, είναι η δημιουργία ενός μοντέλου που περιγράφει το σύστημα, το οποίο εμπεριέχει ένα μικρό αριθμό από τα πιο απαραίτητα στοιχεία του προβλήματος. Κατόπιν θα πρέπει να εξεταστεί η «αληθοφάνεια», η ικανότητα δηλαδή έγκυρων προβλέψεων του μοντέλου.

Τέλος θα πρέπει να τονίσουμε ότι πολλά μοντέλα είναι ιδιαίτερα επιτυχή, πέρα από την οποιαδήποτε αρχική ελπίδα. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί ή Κβαντική Μηχανική και ιδιαίτερα η εξίσωση του Schrödinger η οποία είναι ένα μαθηματικό μοντέλο περιγραφής της δυναμικής εξέλιξης των σωματιδίων

σε μικροσκοπικό επίπεδο. Είναι ενδιαφέρον ότι ως σήμερα δεν υπάρχει ούτε ένα γνωστό παράδειγμα στο οποίο το συγκεκριμένο μοντέλο να αποτυγχάνει! Δεδομένης αυτής της επιτυχίας του μοντέλου, κάποιος μπορεί να ισχυρισθεί ότι πρόκειται για βασικό νόμο της φύσης! Το ίδιο συμβαίνει και με το 2ο Θερμοδυναμικό νόμο, ο οποίος έχει χαρακτηριστεί ως νόμος, ακριβώς λόγω της γενικότητας του και της μη ύπαρξης παραδείγματος το οποίο να τον αντιβαίνει!

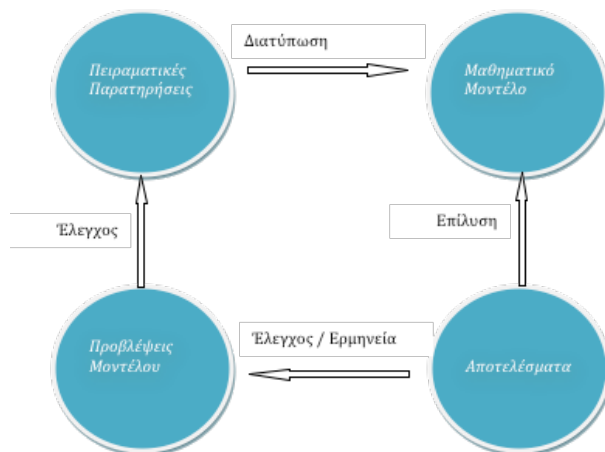
1.1.2 Διαδικασία Μαθηματικής Μοντελοποίησης

Τα κοινά σημεία των παραπάνω παραδειγμάτων αφορούν, πέρα από τη χρήση των μαθηματικών εργαλείων, τη μεθοδολογία προσέγγισης του υπό μελέτη φαινομένου – συστήματος.

Πιο συγκεκριμένα, θα περιγράψαμε τη διαδικασία της μαθηματικής μοντελοποίησης, ενός οποιουδήποτε φαινομένου, μέσα από τα παρακάτω βήματα:

- Βήμα 1:** Συλλογή και οργάνωση δεδομένων, από πειραματικές μετρήσεις, για ένα συγκεκριμένο σύστημα – φαινόμενο.
- Βήμα 2:** Δημιουργία ενός μαθηματικού μοντέλου του συστήματος, μέσω κατάλληλων υποθέσεων/παραδοχών.
- Βήμα 3:** Επίλυση του μαθηματικού προβλήματος με τη χρήση υπαρχόντων, είτε με τη δημιουργία νέων, μαθηματικών εργαλείων.
- Βήμα 4:** Έλεγχος των προβλέψεων του μοντέλου μέσω πειραματικών παρατηρήσεων.
- Βήμα 5:** Αν οι προβλέψεις του μοντέλου δεν είναι ικανοποιητικές απαιτείται βελτίωση του μοντέλου και των υποθέσεων στις οποίες έχει βασισθεί και επανάληψη της διαδικασίας.

Η παραπάνω διαδικασία περιγράφεται στο σχήμα 1.1.



Σχήμα 1.1: Διαγραμματική περιγραφή της διαδικασίας της μαθηματικής μοντελοποίησης.

Ας δούμε πιο αναλυτικά μια περίπτωση και πιο συγκεκριμένα την ανάπτυξη της Κλασικής Μηχανικής. Κατά τη διάρκεια της ιστορίας έγιναν πολλές προσπάθειες να περιγράψουν του νόμους που διέπουν την κίνηση των σωμάτων. Αυτό ήταν ένα από τα προβλήματα για τα οποία υπήρχε πληθώρα διαθέσιμων δεδομένων από πειραματικές (κυρίως αστρονομικές) παρατηρήσεις (Βήμα 1). Το μαθηματικό μοντέλο, οι εξισώσεις δηλαδή που περιγράφουν τη δυναμική των σωμάτων, δημιουργήθηκε από την εργασία πολλών επιστημόνων, κυρίως του Νεύτωνα (Βήμα 2). Η ανάγκη επίλυσης των εξισώσεων αυτών οδήγησε στη δημιουργία νέων μαθηματικών εργαλείων και στην ανάπτυξη του απειροστικού λογισμού (Βήμα 3). Η ερμηνεία των αποτελεσμάτων του μοντέλου, ο έλεγχος των προβλέψεων του και η συμφωνία του σε σχέση με τις πειραματικές παρατηρήσεις (Βήμα 4 και 5), οδήγησε στην καθιέρωση του και στην περιγραφή του ως «νόμου» της Κλασικής Μηχανικής, ή νόμοι του Νεύτωνα.

1.1.3 Παράμετροι / Μεταβλητές των Μοντέλων

Από τα βήματα που παρουσιάζονται παραπάνω, ιδιαίτερα σημαντικό είναι η δημιουργία του μαθηματικού μοντέλου, δηλαδή των κατάλληλων μαθηματικών μορφών – σχέσεων (εξισώσεων, αριθμών, κλπ.), οι οποίες περιγράφουν το πρόβλημα. Για να γίνει αυτό απαιτείται αρχικά να οριστούν οι μεταβλητές που περιγράφουν το φαινόμενο, δηλαδή οι παράμετροι του μοντέλου.

Χαρακτηριστικές παράμετροι σε ένα τυπικό μαθηματικό μοντέλο, μπορεί να είναι:

- Οι θέσεις σωματιδίων σε μικροσκοπικό επίπεδο, ή φυσικών σωμάτων σε μακροσκοπικό (μοντέλα Φυσικών επιστημών).
- Ο πληθυσμός ενός συγκεκριμένου βιολογικού είδους (σε Βιολογικά μοντέλα).
- Οικονομικές μεταβλητές, όπως κόστος παραγωγής ή κέρδος (σε Οικονομικά μοντέλα).
- Μεταβλητές που σχετίζονται με ανθρώπινες δραστηριότητες, παράδειγμα ποιότητα της ζωής σε μια μεγαλούπολη (σε μοντέλα Ανθρωπιστικών σπουδών).
- κλπ.

Προσέξτε ότι στις περισσότερες από τις παραπάνω περιπτώσεις, οι μεταβλητές εξαρτώνται από το χρόνο και αυτό που ενδιαφέρει κυρίως είναι η πρόβλεψη της χρονικής τους εξάρτησης.

1.1.4 Μαθηματικά Εργαλεία

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω η επίλυση του μαθηματικού μοντέλου γίνεται με τη χρήση διάφορων μαθηματικών εργαλείων.

Χαρακτηριστικά παραδείγματα μαθηματικών εργαλείων είναι τα εξής:

- Μέθοδοι επίλυσης γραμμικών εξισώσεων.
- Μέθοδοι επίλυσης συνήθων και μερικών διαφορικών εξισώσεων, όπως χωρισμός μεταβλητών κλπ.
- Μέθοδοι επίλυσης στοχαστικών εξισώσεων.
- Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης ΣΔΕ, όπως Newton–Raphson, Runge–Kutta κλπ.
- Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης ΜΔΕ, όπως πεπερασμένες διαφορές, πεπερασμένα στοιχεία, φασματικά στοιχεία, κλπ.
- Μέθοδοι προσομοίωσης, όπως Μοριακή Δυναμική (Molecular Dynamics) και μέθοδοι Monte Carlo.
- κλπ.

1.2 Διαστατική Ανάλυση

Όπως είδαμε παραπάνω οι μεταβλητές και οι παράμετροι, που επιλέγονται για τη μελέτη ενός φαινομένου, είναι το πρώτο βήμα στη δημιουργία του μαθηματικού μοντέλου, που περιγράφει το συγκεκριμένο σύστημα. Σε πολλές περιπτώσεις οι αρχικές μεταβλητές οδηγούν στη δημιουργία μαθηματικών σχέσεων, συνήθως διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες είναι αρκετά πολύπλοκες, ενώ μπορεί επίσης να εξαρτώνται από πολλές παραμέτρους. (Barnes & Fulford, 2011; Logan, 2010)

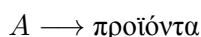
Στην περίπτωση αυτή, πολύ συχνά οι εξισώσεις του μοντέλου μπορούν να απλοποιηθούν επιλέγοντας νέες, συνήθως αδιάστατες, μεταβλητές και επαναδιατυπώνοντας την περιγραφή του φαινομένου, χρησιμοποιώντας τις νέες μεταβλητές. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται αδιαστατοποίηση (rationalization) και απαιτεί αρχικά μια διαστατική ανάλυση (dimensional analysis) του προβλήματος.

Η παραπάνω διαδικασία είναι μια ιδιαίτερα χρήσιμη, αλλά και συχνά αναγκαία, τακτική στη θεωρητική ανάλυση – μελέτη φυσικών προβλημάτων. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελούν οι μέθοδοι διαταραχών (perturbation methods), οι οποίες μέσω κατάλληλης αδιαστατοποίησης οδηγούν στη μελέτη της επίδρασης «μικρών» και μεγάλων» τιμών των παραμέτρων στη συμπεριφορά ενός μοντέλου.

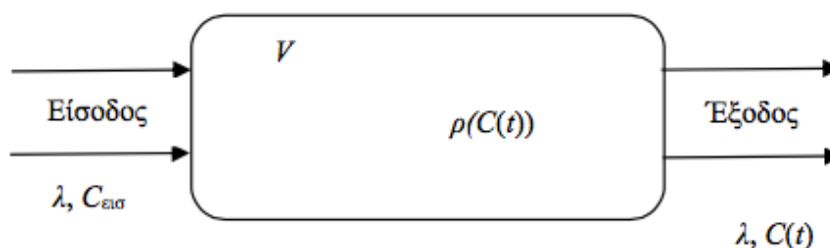
Εδώ θα παρουσιάσουμε, πολύ συνοπτικά, τη μέθοδο της αδιαστατοποίησης μέσω ενός χαρακτηριστικού παραδείγματος το οποίο αφορά τη μοντελοποίηση μιας χημικής αντίδρασης.

1.2.1 Μία Χημική Αντίδραση

Έστω η παρακάτω, αρκετά γενική, χημική αντίδραση, στην οποία αντιδρώντα, μετατρέπονται σε προϊόντα:



Θεωρούμε ότι η αντίδραση συμβαίνει σε ένα χημικό αντιδραστήρα, όπως στο σχήμα 1.2.



Σχήμα 1.2: Τυπικός χημικός αντιδραστήρας του παραδείγματος μοντελοποίησης χημικής αντίδρασης που μελετάμε εδώ. Ο όγκος του αντιδραστήρα είναι V ενώ λ είναι η παροχή αντιδρώντων στην είσοδο του αντιδραστήρα, δηλαδή ο όγκος αντιδρώντων A ο οποίος εισέρχεται στον αντιδραστήρα ανά μονάδα χρόνου.

Στη γενική περίπτωση τα αντιδρώντα είναι N διαφορετικές ουσίες (χημικές ενώσεις). Θα παραστήσουμε με C_i , $i = 1, 2, \dots, N$ οι συγκεντρώσεις των ουσιών δηλαδή η μάζα κάθε ουσίας ανά μονάδα όγκου. Για να διευκολύνουμε τη μελέτη του προβλήματος θεωρούμε απλοποιήσεις για τη χημική αντίδραση και κάνουμε τις παρακάτω υποθέσεις:

- Θεωρούμε «απλή» χημική αντίδραση, τα αντιδρώντα είναι μόνο μία ουσία ($N = 1$), την οποία θα ονομάσουμε A .
- Θεωρούμε ισόθερμο αντιδραστήρα συνεχούς ανάδευσης. Σε αυτή την περίπτωση η θερμοκρασία μέσα στον αντιδραστήρα είναι σταθερή, $T = T_0$ και η συγκέντρωση του αντιδρώντος C είναι συνάρτηση μόνο του χρόνου και όχι του χώρου, δηλαδή $C = C(t)$.
- Θεωρούμε σταθερή παροχή λ για το αντιδρών στην είσοδο του αντιδραστήρα, όπου λ είναι ο όγκος ουσίας A ο οποίος παρέχεται ανά μονάδα χρόνου.

Επίσης, θα απλοποιήσουμε σε έναν βαθμό τις παραμέτρους του προβλήματος:

- Θεωρούμε ότι η παροχή στην έξοδο είναι ίση με την παροχή στην είσοδο λ , δηλαδή ο όγκος της ουσίας που αποβάλλεται είναι συνεχώς ίσος με τον όγκο της ουσίας που εισάγεται.
- Θεωρούμε ότι ο όγκος του αντιδραστήρα V είναι μοναδιαίος ($V = 1$).

Παρότι θεωρήσαμε την παροχή στην έξοδο ίση με την παροχή στην είσοδο, η συγκέντρωση όμως της ουσίας C στην έξοδο θα είναι διαφορετική από αυτή στην είσοδο και αυτή μπορεί να μεταβάλλεται με τον χρόνο t . Το πρόβλημα λοιπόν που έχουμε να μελετήσουμε είναι το πώς μεταβάλλεται στο χρόνο η συγκέντρωση $C = C(t)$ του αντιδρώντος στην έξοδο του αντιδραστήρα. Για να πετύχουμε την περιγραφή της συγκέντρωσης εξόδου χρειαζόμαστε ένα μαθηματικό μοντέλο, το οποίο θα περιγράφει

πως μεταβάλλεται στο χρόνο η συγκέντρωση $C = C(t)$. Αν θεωρήσουμε τη C ως συνεχή μεταβλητή, η παράγωγος της οποίας υπάρχει, χρειαζόμαστε την μεταβολή της με τον χρόνο. Χρειαζόμαστε δηλαδή μια σχέση της μορφής:

$$\frac{d}{dt}C(t) = F(t, C) \quad (1.1)$$

όπου $F(t, C)$ είναι μια συνάρτηση η οποία εξαρτάται από τον χρόνο και τη συγκέντρωση C . Το δεύτερο στάδιο λοιπόν της διαδικασίας αφορά την εύρεση της, καταρχήν άγνωστης, συνάρτησης $F(t, C)$.

Για την πλήρη περιγραφή της αντίδρασης χρειάζεται να γνωρίζουμε τις διεργασίες που συμβαίνουν στο εσωτερικό του αντιδραστήρα. Ας ορίσουμε ως:

- $V\rho(C) = \rho(C)$ τον ρυθμό αντίδρασης (reaction rate), ή ρυθμό κατανάλωσης της ουσίας A εντός του αντιδραστήρα. Η ρ δίνει τη συγκέντρωση ουσίας ανά μονάδα χρόνου η οποία καταναλώνεται και η $V\rho = \rho$ είναι η μάζα ουσίας ανά μονάδα χρόνου (έχει μονάδες kg/sec). Η εξάρτησή της ρ από την C μπορεί να έχει διάφορες μορφές οι οποίες θα δώσουν διαφορετικά προβλήματα.

Για να βρούμε τη μορφή της συνάρτησης $F(t, C)$ θα θεωρήσουμε το ισοζύγιο μάζας για το αντιδρών κατά τη διαδικασία της αντίδρασης. Δεδομένων των παραπάνω ορισμών, έχουμε:

- $\lambda C_{\text{εισ}}$: μάζα ουσίας ανά μονάδα χρόνου στην είσοδο του αντιδραστήρα.
- $\lambda C(t)$: μάζα ουσίας ανά μονάδα χρόνου στην έξοδο του αντιδραστήρα.
- $V\rho(C(t)) = \rho(C(t))$: μάζα ουσίας ανά μονάδα χρόνου που καταναλώνεται μέσα στον αντιδραστήρα (θυμηθείτε ότι ο όγκος V θεωρήθηκε μοναδιαίος).
- $VC(t) = C(t)$: μάζα ουσίας μέσα στον αντιδραστήρα, σε χρόνο t .

Στον αντιδραστήρα εισέρχεται λοιπόν μάζα $\lambda C_{\text{εισ}}$, ενώ απορρίπτεται (εξέρχεται) και καταναλώνεται μάζα $\lambda C(t) + \rho(C(t))$. Θα θεωρήσουμε ότι δεν έχουμε μεταβολή της μάζας εντός του αντιδραστήρα ώστε το ισοζύγιο μάζας εκφράζεται από τη συνθήκη:

$$\text{μάζα στην είσοδο} = \text{μάζα στην έξοδο},$$

η οποία επιβάλλεται αν ικανοποιείται η εξίσωση

$$\lambda C_{\text{εισ}} = \lambda C(t) + \rho(C(t)).$$

Γενικεύοντας την παραπάνω σκέψη μπορούμε να γράψουμε μία εξίσωση της μορφής (1.1) για το ισοζύγιο μάζας στη γενική περίπτωση που η μάζα των αντιδρώντων μέσα στον αντιδραστήρα μεταβάλλεται με τον χρόνο. Εφόσον η μάζα του αντιδρώντος εντός του αντιδραστήρα είναι $VC = C$, είναι:

$$\frac{d}{dt}C(t) = \lambda C_{\text{εισ}} - \lambda C(t) - \rho(C(t)). \quad (1.2)$$

Η παραπάνω εξίσωση εκφράζει ότι η διαφορά του ρυθμού εισόδου μάζας με τον ρυθμό εξόδου μάζας ισούται με τη μεταβολή της μάζας του αντιδρώντος εντός του αντιδραστήρα.

Για να προχωρήσουμε στην επίλυση της Εξ. (1.2) χρειαζόμαστε μια σχέση για την εξάρτηση του ρυθμού αντίδρασης ρ από τη συγκέντρωση C . Υποθέτοντας μία απλή γραμμική εξάρτηση (χημική αντίδραση 1ης τάξης) γράφουμε:

$$\rho(C) = kC$$

όπου k είναι μια σταθερά με μονάδες αντιστρόφου χρόνου. Η σχέση αυτή υποθέτει ότι ο ρυθμός αντίδρασης αυξάνεται γραμμικά με τη συγκέντρωση του αντιδρώντος, πράγμα που μπορεί να θεωρηθεί μία λογική προσέγγιση της χημικής διαδικασίας. Σε αυτήν την περίπτωση η Εξ. (1.2) γίνεται:

$$\frac{d}{dt}C(t) = \lambda C_{\text{εισ}} - \lambda C(t) - kC(t). \quad (1.3)$$

Με μια γενική αρχική συνθήκη για την αρχική συγκέντρωση, έστω $C(t = 0) = C_0$, το παραπάνω γίνεται ένα κλασικό Πρόβλημα Αρχικών Τιμών (ΠΑΤ).

Στο επόμενο στάδιο εξετάζουμε πως το ΠΑΤ (1.3) μπορεί να απλοποιηθεί επιλέγοντας κατάλληλες νέες και αδιάστατες μεταβλητές. Αυτές θα προκύψουν από την κατάλληλη κανονικοποίηση των αρχικών μεταβλητών για τη συγκέντρωση C και τον χρόνο t με χαρακτηριστικές σταθερές. Στο παράδειγμά μας υπάρχουν οι ακόλουθες παράμετροι:

- Ο ρυθμός k , ο οποίος καθορίζει τον ρυθμό με τον οποίο καταναλώνεται το αντιδρών, άρα εισάγει έναν χαρακτηριστικό χρόνο $1/k$ στον οποίο συμβαίνουν οι μεταβολές της μεταβλητής C .
- Άλλος χαρακτηριστικός χρόνος εισάγεται από τον συνδυασμό παραμέτρων $V/\lambda = 1/\lambda$.
- Η συγκέντρωση εισόδου $C_{\text{εισ}}$ είτε η αρχική συγκέντρωση C_0 εντός του αντιδραστήρα καθορίζουν χαρακτηριστικές συγκεντρώσεις της ουσίας στο παρόν πρόβλημα.

Οι ζητούμενες νέες μεταβλητές μπορεί να προέρχονται από κανονικοποίηση του χρόνου t και της συγκέντρωσης C με βάση τις χαρακτηριστικές τιμές που εξηγήθηκαν παραπάνω. Θα δούμε δύο διαφορετικές δυνατότητες.

A) Έστω ότι επιλέγουμε ως χαρακτηριστικές τιμές για τη συγκέντρωση την $C_{\text{εισ}}$ και για τον χρόνο τον $T = 1/k$. Ορίζουμε τις νέες μεταβλητές ως:

$$\tilde{C} = \frac{C}{C_{\text{εισ}}}, \quad \tau = \frac{t}{T} = kt. \quad (1.4)$$

Παρατηρήστε ότι οι νέες μεταβλητές είναι αδιάστατες, δηλαδή δεν δίνουν τιμές σε φυσικές μονάδες (sec κλπ), αλλά μετρούν τα αντίστοιχα μεγέθη σε σχέση με τις φυσιολογικές μονάδες του παρόντος προβλήματος. Με τη χρήση των νέων μεταβλητών το αρχικό ΠΑΤ γίνεται

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{C}(\tau) = \frac{1}{\beta} (1 - \tilde{C}(\tau)) - \tilde{C}(\tau) \quad (1.5)$$

όπου έχουμε ορίσει την παράμετρο

$$\beta = \frac{k}{\lambda} \quad (1.6)$$

και παρατηρούμε ότι αυτή είναι η μόνη παράμετρος η οποία εμφανίζεται στην εξίσωση.

B) Κάνοντας μία διαφορετική επιλογή για τον χαρακτηριστικό χρόνο, $T = 1/\lambda$, μπορούμε να ορίσουμε τις νέες μεταβλητές, ως:

$$\tilde{C} = \frac{C}{C_{\text{εισ}}}, \quad \tau = \frac{t}{T} = \lambda t. \quad (1.7)$$

Σε αυτή την περίπτωση το αρχικό ΠΑΤ γίνεται

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{C}(\tau) = 1 - \tilde{C}(\tau) - \beta \tilde{C}(\tau) \quad (1.8)$$

όπου εμφανίζεται η ίδια παράμετρος β όπως και στην (1.5).

Σύντομο πρόβλημα 1.1. Δείξτε τις παραπάνω σχέσεις, Εξ. (1.5), (1.8).

Ένα σημαντικό πλεονέκτημα του αδιάστατου προβλήματος αρχικών τιμών και στις δύο μορφές του (A και B), σε σχέση με το αρχικό, είναι ότι σε αυτό έχουμε μόνο μια σταθερά, (β) ενώ στο αρχικό πρόβλημα (1.3) οι σταθερές ήταν τρεις: k , λ , $C_{\text{εισ}}$. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό αν σκεφτούμε ότι στόχος μας είναι η πρόβλεψη της εξέλιξης της συγκέντρωσης, η επίλυση δηλαδή του ΠΑΤ, για διαφορετικές τιμές των σταθερών. Με άλλα λόγια στη δεύτερη περίπτωση θα είναι πολύ πιο εύκολο να εξετάσουμε τη συμπεριφορά του μοντέλου για διαφορετικές τιμές των (σταθερών) παραμέτρων.

Ερώτηση κατανόησης 1.1. Ποια είναι η φυσική σημασία της νέας σταθεράς β ;

Σύντομο πρόβλημα 1.2. Ποια είναι η σταθερά β και πως γίνονται οι παραπάνω συνθήκες στην περίπτωση που ο όγκος του αντιδραστήρα δεν είναι μοναδιαίος;

Ας αναρωτηθούμε τώρα ποιά από τις δύο παραπάνω μορφές του μοντέλου είναι καλύτερο να επιλέξουμε. Δηλαδή είναι καλύτερα η αδιάστατη χρονική μεταβλητή να οριστεί μέσω του $T = k^{-1}$ ή του $T = \lambda^{-1}$; Η επιλογή αυτή μπορεί να είναι σημαντική σε προβλήματα όπου οι δύο όροι διαφέρουν σε μεγάλο βαθμό (περισσότερο της μίας τάξης μεγέθους). Ως κανόνα θα χρησιμοποιήσουμε τον εξής:

- Αν $k \gg \lambda$, τότε $\beta \gg 1$ και επιλέγουμε τη μορφή (1.5).
- Αν $k \ll \lambda$, τότε $\beta \ll 1$ και επιλέγουμε τη μορφή (1.8).

Ως παράδειγμα ας εξετάσουμε τη δεύτερη περίπτωση, δηλαδή $\beta \ll 1$. Σε αυτή την περίπτωση η Εξ. (1.8) είναι προσεγγιστικά ίδια με την

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{C}(\tau) = 1 - \tilde{C}(\tau) \quad (1.9)$$

η λύση της οποίας, με την αρχική συνθήκη $\tilde{C}(0) = C_0/C_{\text{εισ}} = \gamma$, βρίσκεται εύκολα και είναι:

$$\tilde{C}(\tau) = 1 + (\gamma - 1) e^{-\tau}. \quad (1.10)$$

Για να καταλάβουμε τι αντιπροσωπεύει αυτή η λύση όσον αφορά το πρόβλημα της χημικής αντίδρασης θα πρέπει να επαναφέρουμε τις αρχικές παραμέτρους του προβλήματος στη λύση. Χρησιμοποιώντας τους ορισμούς (1.4) η λύση (1.10) γράφεται στις αρχικές μεταβλητές του προβλήματος ως

$$\frac{C(t)}{C_{\text{εισ}}} = 1 + (\gamma - 1) e^{-kt} \Rightarrow C(t) = C_{\text{εισ}} + (C_0 - C_{\text{εισ}}) e^{-kt}. \quad (1.11)$$

Βλέπουμε ότι η αρχική συγκέντρωση είναι $C(t=0) = C_0$ (όπως έχει επιβληθεί από την αρχική συνθήκη), ενώ $C(t \rightarrow \infty) = C_{\text{εισ}}$, δηλαδή η συγκέντρωση στον αντιδραστήρα εξισώνεται τελικά με τη συγκέντρωση εισόδου. Η λύση με τέτοια συμπεριφορά μπορεί να θεωρηθεί «αναμενόμενη» καθώς η αντίδραση είναι «αργή» ($k \gg \lambda$) και η παροχή (με ρυθμό λ) αναπληρώνει άμεσα την απώλεια από την αντίδραση εντός του αντιδραστήρα. Φυσικά, η απόλυτη ισότητα των συγκεντρώσεων εισόδου και εξόδου οφείλεται στην προσέγγιση που κάναμε για να γράψουμε την Εξ. (1.9). (Η περίπτωση $\beta \neq 0$ εξετάζεται στην Άσκηση 1.1.)

Προσέξτε ότι αν στην παραπάνω περίπτωση, δηλαδή όταν $\beta \ll 1$, χρησιμοποιήσουμε την Εξ. (1.8) έχουμε:

$$\beta \frac{d}{d\tau} \tilde{C} = (1 - \tilde{C}) - \beta \tilde{C}.$$

Αυτή δείχνει ότι η συγκέντρωση είναι περίπου, $\tilde{C}(\tau) \simeq 1$.

Ερώτηση κατανόησης 1.2. Είναι η παραπάνω λύση «ικανοποιητική»; Υπακούει την αρχική συνθήκη;

Σύντομο πρόβλημα 1.3. Επαναλάβετε την παραπάνω διαδικασία για την περίπτωση $\beta \gg 1$.

1.3 Μελέτη

1.3.1 Ασκήσεις

Άσκηση 1.1. Χημική αντίδραση σε αντιδραστήρα

Θεωρείστε τη χημική αντίδραση που είδαμε στην παράγραφο 1.2.1. (α) Επιλύστε το τελικό αδιάστατο ΠΑΤ (1.5) ή (1.8). (β) Δώστε τη λύση στις αρχικές μεταβλητές. (γ) Εξετάστε τη μεταβολή της συγκέντρωσης του αντιδρώντος ως προς το χρόνο για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου β (δώστε γραφικές παραστάσεις).

Άσκηση 1.2. Μετάπτωση μαγνητικής ροπής

Η εξίσωση κίνησης του διανύσματος της μαγνητικής ροπής $\boldsymbol{\mu}$ ενός ατόμου το οποίο βρίσκεται μέσα σε μαγνητικό πεδίο \boldsymbol{H} είναι

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{H}$$

όπου γ είναι μία φυσική σταθερά η οποία λέγεται *γυρομαγνητικός λόγος*. Μία τυπική τιμή του μέτρου μαγνητικής ροπής ατόμου είναι η σταθερά μ_B η οποία λέγεται *μαγνητόνη του Bohr*. (α) Δείξτε ότι το διάνυσμα της μαγνητικής ροπής δεν μεταβάλλει το μέτρο του κατά την κίνηση σε μαγνητικό πεδίο. (β) Ορίστε νέες μεταβλητές και δώστε μία αδιάστατη μορφή της εξίσωσης (θεωρήστε $|\boldsymbol{\mu}| = \mu_B$ και ένα σταθερό μαγνητικό πεδίο). (γ) Δώστε τη γενική λύση της εξίσωσης στις αδιάστατες μεταβλητές (εδώ θεωρήστε $\boldsymbol{H} = H\hat{z}$). (δ) Μετατρέψτε τη λύση στις αρχικές (φυσικές) μεταβλητές.

Βιβλιογραφία

- Barnes, B., & Fulford, G. R. (2011). *Mathematical modelling with case studies: A differential equations approach using maple and matlab* (Second ed.). CRC Press.
- Logan, J. D. (2010). *Εφαρμοσμένα Μαθηματικά*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.

Κεφάλαιο 2

Αναλυτική Μηχανική

Περίληψη

Οι νόμοι του Νεύτωνα αποτελούν τη βάση για την κατανόηση της στατικής και της δυναμικής των υλικών σωμάτων. Δίνουμε τους νόμους του Νεύτωνα και επίσης παραδείγματα. Μελετάμε πιο περίπλοκα συστήματα στο επίπεδο χρησιμοποιώντας πολικές συντεταγμένες. Δίνονται ορισμένα σημαντικά παραδείγματα από τη Φυσική και τη Χημεία. Η Μηχανική βρίσκει μία πιο γενική περιγραφή μέσω των εξισώσεων Euler-Lagrange. Εξάγουμε τις εξισώσεις Euler-Lagrange από την αρχή μεταβολής του Hamilton χρησιμοποιώντας τον λογισμό μεταβολών. Συνοπτικά περιγράφονται και οι εξισώσεις του Hamilton. Τέλος, περιγράφουμε μία μέθοδο για να περιληφθούν μη-διατηρητικοί όροι στην λαγκρανζιανή περιγραφή. Το κεφάλαιο αυτό έχει σκοπό να εισάγει τον φοιτητή στην Αναλυτική Μηχανική και να αποτελέσει αναφορά για επόμενα κεφάλαια.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Αναλυτική γεωμετρία: διανύσματα, καμπύλες στον χώρο και παραμετρική τους έκφραση.
- Παράγωγος συνάρτησης, κλίση συνάρτησης.
- Διαφορικές εξισώσεις πρώτης και δεύτερης τάξης.

2.1 Νόμοι του Νεύτωνα για σημειακά σωματίδια

2.1.1 Θέση, ταχύτητα και τροχιά σωματίου

Στη Μηχανική (Fowles & Cassiday, 2004; Kibble & Bershire, 2004; Goldstein, Poole Jr, & Safko, 2001) υποθέτουμε πολλές φορές ότι τα σωματίδια δεν έχουν μέγεθος και παριστάνουμε τη θέση τους με ένα σημείο. Η θέση λοιπόν ενός *σημειακού σωματίου* δίνεται από ένα διάνυσμα \mathbf{r} το οποίο παριστάνεται σε καρτεσιανές συντεταγμένες ως

$$\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}} + z\hat{\mathbf{k}}, \quad (2.1)$$

όπου $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$ είναι μοναδιαία διανύσματα και x, y, z είναι οι συντεταγμένες του σωματίου σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Η θέση του σωματίου είναι γενικά συνάρτηση του χρόνου $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Η παραμετρική μορφή $\mathbf{r}(t)$ περιγράφει μία καμπύλη στον χώρο την οποία ονομάζουμε *τροχιά* του σωματίου.

Ταχύτητα λέγεται η χρονική παράγωγος της θέσης, δηλαδή το διάνυσμα

$$\mathbf{v} := \frac{d\mathbf{r}}{dt}. \quad (2.2)$$

Παράδειγμα 2.1. Έστω θέση σωματίου επάνω στον οριζόντιο άξονα

$$\mathbf{r}(t) = \alpha t \hat{\mathbf{i}},$$

όπου α είναι μία σταθερά. Αν υποθεθεί ότι η μεταβλητή t παριστάνει τον χρόνο, τότε η παραπάνω εξίσωση δίνει τη θέση σημειακού σωματίου το οποίο κινείται ευθύγραμμα με σταθερή ταχύτητα $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt = \alpha \hat{\mathbf{i}}$ επάνω στον άξονα x . \square

Παράδειγμα 2.2. Έστω το διάνυσμα θέσης σωματίου

$$\mathbf{r}(t) = \alpha t \hat{\mathbf{i}} - \frac{1}{2} g t^2 \hat{\mathbf{j}},$$

ώστε η ταχύτητά του είναι

$$\mathbf{v}(t) = \alpha \hat{\mathbf{i}} - g t \hat{\mathbf{j}}.$$

\square

Παράδειγμα 2.3. (*Κυκλική κίνηση*) Έστω το διάνυσμα θέσης σωματίου σε κυκλική κίνηση, όπως στο Σχήμα 2.1,

$$\mathbf{r}(t) = \alpha [\sin(\omega t) \hat{\mathbf{i}} + \cos(\omega t) \hat{\mathbf{j}}].$$

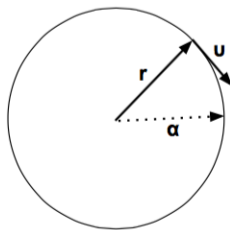
Πραγματικά το σωματίο αυτό βρίσκεται πάντα επάνω σε κύκλο ακτίνας $|\mathbf{r}| = \sqrt{\alpha^2 \sin^2(\omega t) + \alpha^2 \cos^2(\omega t)} = \alpha$. Η ταχύτητά του είναι

$$\mathbf{v}(t) := \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \omega \alpha [\cos(\omega t) \hat{\mathbf{i}} - \sin(\omega t) \hat{\mathbf{j}}].$$

Παρατηρούμε ότι η ταχύτητα έχει μέτρο $|\mathbf{v}| = \omega \alpha$ σταθερό στον χρόνο. Επίσης $\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} = 0$, δηλαδή το διάνυσμα ταχύτητας είναι κάθετο στο διάνυσμα θέσης. \square

Παράδειγμα 2.4. (*Κυκλοειδής κίνηση*) Έστω το διάνυσμα θέσης σωματίου

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_1(t) &= \alpha \omega t \hat{\mathbf{i}} + \alpha \hat{\mathbf{j}} \\ \mathbf{r}_2(t) &= -[\alpha \sin(\omega t) \hat{\mathbf{i}} + \alpha \cos(\omega t) \hat{\mathbf{j}}]. \end{aligned}$$



Σχήμα 2.1: Σωματίο σε κυκλική κίνηση ακτίνας α . Σημειώνεται το διάνυσμα θέσης \mathbf{r} και ταχύτητας \mathbf{v} σε μία χρονική στιγμή.

Η θέση του σωματίου περιγράφεται από μία ευθύγραμμη ομαλή κίνηση κατά τη διεύθυνση x στην οποία προστίθεται μία κυκλική κίνηση ακτίνας α . Η καμπύλη την οποία διαγράφει το σωματίο λέγεται κυκλοειδής και έχει παραμετρική έκφραση:

$$\mathbf{r}(t) = \alpha [\omega t - \sin(\omega t)] \hat{\mathbf{i}} + \alpha [1 - \cos(\omega t)] \hat{\mathbf{j}}.$$

Η ταχύτητά του είναι

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}_1}{dt} + \frac{d\mathbf{r}_2}{dt} = \omega\alpha[1 - \cos(\omega t)] \hat{\mathbf{i}} + \omega\alpha \sin(\omega t) \hat{\mathbf{j}}.$$

Παρατηρούμε ότι

- Για $t = 0$ το σωματίο έχει θέση και ταχύτητα

$$\mathbf{r} = 0, \quad \mathbf{v} = 0.$$

- Για $t = \pi/\omega$ (μία ημιπερίοδος της κυκλικής τροχιάς)

$$\mathbf{r} = \alpha\pi\hat{\mathbf{i}} + 2\alpha\hat{\mathbf{j}}, \quad \mathbf{v} = 2\omega\alpha.$$

- Για $t = 2\pi/\omega$ (μία πλήρης περίοδος της κυκλικής τροχιάς)

$$\mathbf{r} = 2\alpha\pi\hat{\mathbf{i}}, \quad \mathbf{v} = 0.$$

Αρα το σωματίο έχει $\mathbf{v} = 0$ κάθε φορά που βρίσκεται επάνω στον άξονα x . □

Σύντομο πρόβλημα 2.1. Σχεδιάστε την κυκλοειδή τροχιά στο επίπεδο κίνησης xy .

2.1.2 Πολικές συντεταγμένες

Είναι πολύ συχνά ευκολότερο να περιγράψουμε τη θέση ή την κίνηση ενός σωματίου σε πολικές συντεταγμένες (παρά στις συνήθεις καρτεσιανές). Θεωρούμε τις πολικές συντεταγμένες (r, θ) και τα αντίστοιχα μοναδιαία διανύσματα $\hat{\mathbf{e}}_r, \hat{\mathbf{e}}_\theta$ τα οποία είναι (δες Σχ. 2.2)

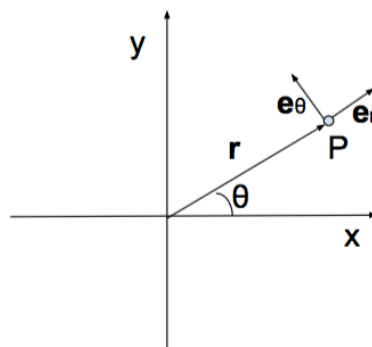
$$\hat{\mathbf{e}}_r = \cos \theta \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \hat{\mathbf{j}}, \quad \hat{\mathbf{e}}_\theta = -\sin \theta \hat{\mathbf{i}} + \cos \theta \hat{\mathbf{j}}. \quad (2.3)$$

Η θέση σωματίου δίνεται από το διάνυσμα

$$\mathbf{r} = r \hat{\mathbf{e}}_r. \quad (2.4)$$

Η ταχύτητα του σωματίου είναι

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{dr}{dt} \hat{\mathbf{e}}_r + r \frac{d\hat{\mathbf{e}}_r}{dt}, \quad (2.5)$$



Σχήμα 2.2: Οι πολικές συντεταγμένες (r, θ) ενός σημείου P του επιπέδου. Το διάνυσμα θέσης του είναι \mathbf{r} . Τα μοναδιαία διανύσματα του συστήματος συντεταγμένων που ορίζονται στο P είναι $\hat{\mathbf{e}}_r, \hat{\mathbf{e}}_\theta$.

όπου έχουμε

$$\frac{d\hat{\mathbf{e}}_r}{dt} = \frac{d}{dt}(\cos \theta \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \hat{\mathbf{j}}) = -\sin \theta \frac{d\theta}{dt} \hat{\mathbf{i}} + \cos \theta \frac{d\theta}{dt} \hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{d\theta}{dt}. \quad (2.6)$$

Χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό $d\theta/dt := \dot{\theta}$ και $dr/dt := \dot{r}$ και γράφουμε τελικά

$$\mathbf{v} = \dot{r} \hat{\mathbf{e}}_r + r\dot{\theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta. \quad (2.7)$$

Παράδειγμα 2.5. Αν γράψουμε $\mathbf{r} = r \hat{\mathbf{e}}_r = r(\cos \theta \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \hat{\mathbf{j}})$, παρατηρούμε ότι στο παράδειγμα (2.3), οι πολικές συντεταγμένες είναι $r = \alpha$, $\theta = \omega t$. Ωστε $\dot{r} = 0$, $\dot{\theta} = \omega$ και άρα έχουμε ταχύτητα

$$\mathbf{v} = \dot{r} \hat{\mathbf{e}}_r + r\dot{\theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta = \alpha\omega \hat{\mathbf{e}}_\theta.$$

□

2.1.3 Νόμοι του Νεύτωνα

Παρατήρηση 2.1. (1ος νόμος του Νεύτωνα) Σώμα στο οποίο δεν επιδρούν δυνάμεις κινείται σε ευθύγραμμη κίνηση με σταθερή ταχύτητα.

Ας υποθέσουμε ότι παρατηρούμε ένα σώμα το οποίο βρίσκεται σε ευθύγραμμη κίνηση με σταθερή ταχύτητα. Είναι προφανές ότι ένας περιστρεφόμενος παρατηρητής δεν θα βλέπει το ίδιο σώμα να βρίσκεται σε ευθύγραμμη κίνηση. Άρα με τον 1ο νόμο του Νεύτωνα εισάγεται η έννοια ενός *αδρανειακού συστήματος αναφοράς* ως προς το οποίο γίνονται οι παρατηρήσεις.

Προχωρούμε τώρα να μελετήσουμε αλληλεπίδραση δύο σωμάτων. Όταν δύο σώματα αλληλεπιδρούν το πείραμα δείχνει ότι έχουμε μεταβολή των ταχυτήτων τους σε αντίθετες κατευθύνσεις:

$$\frac{d\mathbf{v}_1}{dt} = -c \frac{d\mathbf{v}_2}{dt},$$

όπου c είναι μία σταθερά. Γράφουμε αυτή τη σχέση ως

$$m_1 \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} = -m_2 \frac{d\mathbf{v}_2}{dt} \Rightarrow \frac{d(m_1 \mathbf{v}_1)}{dt} = -\frac{d(m_2 \mathbf{v}_2)}{dt}.$$

Οι m_1, m_2 είναι σταθερές, λέγονται μάζες των σωμάτων, χαρακτηρίζουν το κάθε σώμα και δεν εξαρτώνται από το ζευγάρι των σωμάτων που μελετάμε.

Η παραπάνω σχέση δίνει αφορμή να ορίσουμε την *γραμμική ορμή*

$$\mathbf{p} := m\mathbf{v}. \quad (2.8)$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι μεταβολή της ορμής ενός σώματος προκαλείται από την επίδραση άλλου σώματος. Θα θεωρήσουμε λοιπόν ότι το κάθε σώμα ασκεί στο άλλο μία *δύναμη*.

Παρατήρηση 2.2. (2ος νόμος του Νεύτωνα) *Λέμε ότι σε σώμα του οποίου αλλάζει η κινητική κατάσταση (δηλαδή, του οποίου αλλάζει η ορμή) ασκείται δύναμη η οποία είναι ίση με τη μεταβολή της ορμής του:*

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (2.9)$$

Δύο σώματα μπορεί να ασκούν δυνάμεις το ένα στο άλλο, είτε εξ επαφής είτε εξ αποστάσεως. Οι δυνάμεις που ασκούνται μεταξύ δύο σωμάτων λέγονται δυνάμεις αλληλεπίδρασης.

Παρατήρηση 2.3. (3ος νόμος του Νεύτωνα) *Οι δυνάμεις που ασκούνται μεταξύ δύο σωμάτων είναι ίσες και αντίθετες:*

$$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2 \quad (2.10)$$

και τις ονομάζουμε δράση και αντίδραση.

Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι οι μεταβολές της ορμής για ένα ζευγάρι σωμάτων είναι αντίθετες, ώστε γράφουμε

$$\frac{d\mathbf{p}_1}{dt} = -\frac{d\mathbf{p}_2}{dt} \Rightarrow \frac{d}{dt}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) = 0 \Rightarrow \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \text{σταθ.}$$

Η σχέση αυτή είναι βέβαια η ίδια με εκείνη που γράψαμε πριν τον 2ο νόμο, αλλά τώρα για ένα σύστημα δύο σωμάτων.

Με τη μεταβολή της ορμής $d\mathbf{p}/dt = m d\mathbf{v}/dt$ έχουμε ουσιαστικά εισάγει μία ακόμα βασική ποσότητα, εκείνη της επιτάχυνσης

$$\mathbf{a} := \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}. \quad (2.11)$$

Η δύναμη είναι ανάλογη της επιτάχυνσης με βάση τον 2ο νόμο:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}. \quad (2.12)$$

Παράδειγμα 2.6. Για το σώματιο του παραδείγματος (2.1) βρίσκουμε την επιτάχυνση

$$\mathbf{r} = \alpha t \hat{\mathbf{i}} \Rightarrow \mathbf{v} = \alpha \hat{\mathbf{i}} \Rightarrow \mathbf{a} = 0.$$

Αυτό το αποτέλεσμα περιγράφει τον 1ο νόμο του Νεύτωνα. Για το παράδειγμα (2.2)

$$\mathbf{r} = \alpha t \hat{\mathbf{i}} - \frac{1}{2} g t^2 \hat{\mathbf{j}} \Rightarrow \mathbf{v} = \alpha \hat{\mathbf{i}} - g t \hat{\mathbf{j}} \Rightarrow \mathbf{a} = -g \hat{\mathbf{j}}$$

έχουμε μία σταθερή επιτάχυνση και άρα, σύμφωνα με τον 2ο νόμο Νεύτωνα, μία σταθερή δύναμη η οποία ασκείται στο σώμα. Για το παράδειγμα (2.3)

$$\mathbf{a} = -\omega^2 \alpha [\sin(\omega t) \hat{\mathbf{i}} + \cos(\omega t) \hat{\mathbf{j}}] = -\omega^2 \mathbf{r}$$

η επιτάχυνση εξαρτάται από τη θέση του σώματος. □

2.1.4 Ενέργεια

Θεωρούμε σώματιο το οποίο κινείται από μία αρχική θέση \mathbf{r}_0 στην οποία βρίσκεται στον χρόνο $t = 0$ σε μία τελική θέση \mathbf{r} σε τυχόντα χρόνο t . Ολοκληρώνουμε την εξίσωση του Νεύτωνα στον χώρο, κατά μήκος της τροχιάς ενός σωματίου από την αρχική στην τελική του θέση

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot d\mathbf{r}.$$

Στο δεύτερο ολοκλήρωμα αντικαθιστούμε $d\mathbf{r} = \mathbf{v} dt$ και παίρνουμε

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot d\mathbf{r} = \int_{t_0}^t m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \mathbf{v} dt = \int_{t_0}^t \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right) dt = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - \frac{1}{2} m \mathbf{v}_0^2.$$

Για το παραπάνω αποτέλεσμα θεωρήσαμε ότι το σωματίο την αρχική χρονική στιγμή $t = 0$ είναι στη θέση \mathbf{r}_0 και έχει ταχύτητα \mathbf{v}_0 και τη χρονική στιγμή t είναι στη θέση \mathbf{r} και έχει ταχύτητα \mathbf{v} . Έχουμε τελικά το αποτέλεσμα

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = T - T_0, \quad T := \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2, \quad (2.13)$$

όπου T λέγεται *κινητική ενέργεια* του σωματίου.

Θα εξετάσουμε την ειδική περίπτωση όπου υπάρχει πραγματική συνάρτηση $V(\mathbf{r})$ τέτοια ώστε η δύναμη μπορεί να γραφεί ως

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Παρατήρηση 2.4. *Τη συνάρτηση $V(\mathbf{r})$ ονομάζουμε δυναμική ενέργεια και αυτή εξαρτάται από τη θέση του σωματίου. Η δύναμη σε κάθε θέση \mathbf{r} δίνεται από την κλίση της δυναμικής ενέργειας μέσω της Εξ. (2.14).*

Τότε

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = - \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = V(\mathbf{r}_0) - V(\mathbf{r}).$$

Από τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει

$$V(\mathbf{r}_0) - V(\mathbf{r}) = T - T_0 \Rightarrow V(\mathbf{r}) + T = V(\mathbf{r}_0) + T_0.$$

Ορίζουμε την ποσότητα

$$\mathcal{E} := \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + V(\mathbf{r}), \quad (2.15)$$

η οποία ονομάζεται μηχανική ενέργεια και είναι μία συνάρτηση της θέσης και της ταχύτητας του σωματίου. Έχουμε λοιπόν την εξίσωση $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$ όπου $\mathcal{E}_0 = V(\mathbf{r}_0) + T_0$ είναι μία σταθερά, δηλαδή η ενέργεια είναι σταθερή (διατηρήσιμη) ποσότητα κατά την κίνηση του σωματίου.

Διατήρηση ενέργειας σε μία διάσταση

Η εξίσωση $T + V = \mathcal{E}_0$ για τη διατήρηση της ενέργειας είναι μία διαφορική εξίσωση πρώτης τάξεως για τη θέση $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Στην περίπτωση κίνησης σε μία διάσταση η θέση σωματίου είναι $x = x(t)$ και η εξίσωση αυτή λύνεται ως εξής

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V(x) = \mathcal{E}_0 \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{m} [\mathcal{E}_0 - V(x)]}. \quad (2.16)$$

Η Εξ. (2.16) προσδιορίζει το μέτρο της ταχύτητας σε κάθε θέση του σωματίου.

Ας θεωρήσουμε ότι το σωματίο ξεκινάει την κίνησή του σε χρόνο t_0 και κινείται από μία αρχική θέση $x(t = t_0) = x_0$ μέχρι την τυχούσα θέση $x(t) = x$ σε χρόνο t . Το χρονικό διάστημα της κίνησης βρίσκεται ολοκληρώνοντας την παραπάνω σχέση:

$$\int_{t_0}^t dt = \pm \int_{x_0}^x \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} [\mathcal{E}_0 - V(x)]}} \Rightarrow t - t_0 = \pm \int_{x_0}^x \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} [\mathcal{E}_0 - V(x)]}}. \quad (2.17)$$

Αντιστρέφοντας το αποτέλεσμα αυτό μπορούμε, κατ' αρχήν, να πάρουμε τη θέση του σωματίου ως συνάρτηση του χρόνου $x = x(t)$.

Παράδειγμα 2.7. Έστω ένα παραβολικό (αρμονικό) δυναμικό

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2.$$

Η Εξ. (2.16) δίνει

$$\begin{aligned} t - t_0 &= \pm \int_{x_0}^x \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} [\mathcal{E}_0 - \frac{1}{2} kx^2]}} = \pm \int_{x_0}^x \frac{dx}{\sqrt{\frac{k}{m} \sqrt{\frac{2\mathcal{E}_0}{k} - x^2}}} \Rightarrow \\ \sqrt{\frac{k}{m}} (t - t_0) &= \pm \int_{x_0}^x \frac{dx}{\sqrt{\frac{2\mathcal{E}_0}{k} - x^2}} = \pm \int_{x_0}^x \frac{\sqrt{\frac{k}{2\mathcal{E}_0}} dx}{\sqrt{1 - \frac{k}{2\mathcal{E}_0} x^2}} \end{aligned}$$

Για την απλοποίηση των υπολογισμών μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις μεταβλητές

$$\bar{t} = \sqrt{\frac{k}{m}} t, \quad \bar{x} = \sqrt{\frac{k}{2\mathcal{E}_0}} x, \quad (2.18)$$

Όστε τώρα έχουμε

$$\bar{t} - \bar{t}_0 = \pm \int_{\bar{x}_0}^{\bar{x}} \frac{d\bar{x}}{\sqrt{1 - \bar{x}^2}} = \pm [-\arccos(\bar{x})]_{\bar{x}_0}^{\bar{x}} = \pm [\arccos(\bar{x}_0) - \arccos(\bar{x})],$$

όπου έχουμε βέβαια θέσει $\bar{t}_0 = \sqrt{k/m} t_0$ και $\bar{x}_0 = \sqrt{k/(2\mathcal{E}_0)} x_0$. Θέτουμε τη γωνία $\theta_0 := \arccos(\bar{x}_0) = \arccos(\sqrt{k/(2\mathcal{E}_0)} x_0)$ και έχουμε

$$\begin{aligned} \bar{t} - \bar{t}_0 &= \pm [\theta_0 - \arccos(\bar{x})] \Rightarrow \\ \arccos(\bar{x}) &= \pm (\bar{t} - \bar{t}_0) + \theta_0 \Rightarrow \\ \bar{x} &= \cos[\pm (\bar{t} - \bar{t}_0) + \theta_0], \end{aligned}$$

ή, απλούστερα

$$\bar{x}(\bar{t}) = \cos(\bar{t} + \phi_0)$$

όπου ϕ_0 είναι μία σταθερή γωνία. Επιστρέφουμε τελικά στις αρχικές μεταβλητές στις οποίες η λύση έχει την έκφραση

$$x(t) = \sqrt{\frac{2\mathcal{E}_0}{k}} \cos \left[\sqrt{\frac{k}{m}} t + \phi_0 \right].$$

□

Θα μπορούσαμε να ακολουθήσουμε την παραπάνω μέθοδο για τη λύση του προβλήματος φροντίζοντας όμως να απλοποιήσουμε πρώτα τις αρχικές εκφράσεις πριν προχωρήσουμε στην ολοκλήρωση της εξίσωσης. Γράφουμε την ενέργεια

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2 = \mathcal{E}_0. \quad (2.19)$$

Θα πρέπει, πριν προχωρήσουμε στην ολοκλήρωση της εξίσωσης, να αναρωτηθούμε ποιές είναι οι πιο κατάλληλες μεταβλητές για αυτό το πρόβλημα, δηλαδή, να βρούμε κατάλληλες αδιάστατες μεταβλητές. Συγκρίνοντας τον πρώτο και δεύτερο όρο (στο αριστερό μέλος) στην εξίσωση της ενέργειας παρατηρούμε ότι η ποσότητα $\sqrt{m/k}$ έχει διαστάσεις χρόνου. Επίσης συγκρίνοντας τον δεύτερο όρο (στο αριστερό μέλος) και το δεξιό μέλος βλέπουμε ότι η ποσότητα $\sqrt{2\mathcal{E}_0/k}$ έχει διαστάσεις μήκους. Άρα οι αδιάστατες μεταβλητές για τον χρόνο και τη θέση είναι οι \bar{t} και \bar{x} τις οποίες έχουμε ήδη ορίσει στην Εξ. (2.18). Τις εισάγουμε στην εξίσωση για την ενέργεια και έχουμε

$$\left(\frac{d\bar{x}}{d\bar{t}} \right)^2 + \bar{x}^2 = 1 \Rightarrow \bar{t} - \bar{t}_0 = \pm \int_{\bar{x}_0}^{\bar{x}} \frac{d\bar{x}}{\sqrt{1 - \bar{x}^2}} \quad (2.20)$$

η οποία είναι η εξίσωση την οποία ήδη βρήκαμε και στο παραπάνω παράδειγμα.

2.1.5 Δυναμική ενέργεια και δυνάμεις

Παράδειγμα 2.8. (Σταθερό δυναμικό) Αν θεωρήσουμε τη δυναμική ενέργεια

$$V(x) = \text{σταθ.}$$

τότε εύκολα υπολογίζουμε τη δύναμη $F = -dV/dx = 0$. Η εξίσωση του Νεύτωνα είναι $m\ddot{x} = 0 \Rightarrow \dot{x} = \text{σταθ.}$ και εκφράζει ουσιαστικά τον 1ο νόμο του Νεύτωνα. \square

Παράδειγμα 2.9. (Γραμμικό δυναμικό) Αν θεωρήσουμε τη δυναμική ενέργεια

$$V(x) = -cx, \quad c : \text{σταθ.}$$

τότε εύκολα υπολογίζουμε τη δύναμη $F = -dV/dx = c$. Ο νόμος του Νεύτωνα είναι $m\ddot{x} = c$.

Για το βαρυτικό πεδίο κοντά στην επιφάνεια της Γης έχουμε $c = -mg$ όπου m η μάζα σώματος και g η επιτάχυνση της βαρύτητας. Τότε το δυναμικό $V = mgx$ είναι το βαρυτικό δυναμικό και η εξίσωση σώματος σε βαρυτικό δυναμικό γράφεται και λύνεται ως εξής

$$m\ddot{x} = -mg \Rightarrow \ddot{x} = -g \Rightarrow \dot{x} = -gt + \alpha \Rightarrow x(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + \alpha t + \beta,$$

όπου α, β είναι σταθερές. \square

Παράδειγμα 2.10. (Αρμονικός ταλαντωτής) Θα μελετήσουμε και πάλι το παραβολικό δυναμικό του παραδείγματος του προηγούμενου κεφαλαίου, ακολουθώντας όμως διαφορετική μέθοδο. Αφού γνωρίζουμε το δυναμικό μπορούμε να υπολογίσουμε τη δύναμη:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow F = -\frac{dV}{dx} = -kx.$$

Ωστε η εξίσωση του Νεύτωνα γίνεται

$$m\ddot{x} + kx = 0. \quad (2.21)$$

Μας ενδιαφέρει να βρούμε τη γενική λύση της εξίσωσης η οποία δίνει τη θέση του σωματίου x σαν συνάρτηση του χρόνου t . Πρόκειται για μια γραμμική εξίσωση και για να βρούμε λύσεις δοκιμάζουμε τη συνάρτηση

$$x(t) = C e^{i\omega t},$$

όπου το C είναι μιγαδική σταθερά. Αντικατάσταση στην εξίσωση κίνησης δίνει

$$-m\omega^2 x + kx = 0 \Rightarrow \omega^2 = \frac{k}{m}.$$

Ας θεωρήσουμε $\omega = \sqrt{k/m}$ και $C = Ae^{i\phi_0}$ όπου A και ϕ_0 είναι πραγματικές σταθερές. Η γενική λύση γράφεται

$$x(t) = A e^{i(\omega t + \phi_0)}$$

όπου οι A και ϕ_0 είναι αυθαίρετες σταθερές.

Μία σημαντική παρατήρηση είναι ότι η λύση που βρήκαμε είναι μιγαδική και άρα δεν μπορεί να περιγράψει τη θέση ενός σωματίου. Όμως, επειδή η αρχική διαφορική εξίσωση είναι γραμμική, ξέρουμε ότι και το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της λύσης είναι λύσεις της εξίσωσης. Άρα η πραγματική λύση μπορεί να γραφεί, π.χ., ως

$$x(t) = A \cos(\omega t + \phi_0).$$

Η λύση αυτή περιέχει δύο αυθαίρετες σταθερές (A, ϕ_0) και άρα είναι η γενική λύση της εξίσωσης δεύτερης τάξης (2.21).

Η λύση (2.22) περιγράφει μία περιοδική κίνηση η οποία είναι αρμονική ταλάντωση με πλάτος (δηλ., μέγιστη απόκλιση από το κέντρο $x = 0$ της ταλάντωσης) ίσο με A και συχνότητα $\omega = \sqrt{k/m}$. Σημειώνουμε ότι η γενική λύση μπορεί να γραφεί και στη μορφή

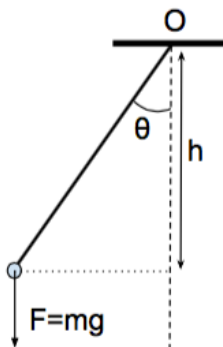
$$x(t) = A \sin(\omega t + \phi_0). \quad (2.22)$$

\square

Απλό εκκρεμές

Υποθέτουμε ότι μία σημειακή μάζα m εξαρτάται από σημείο O μέσω μιας αβαρούς ράβδου με μήκος ℓ όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.3. Η δυναμική ενέργεια αυτού του συστήματος είναι $V = -mgh$ όπου η απόσταση h μετράται κατά την κατακόρυφο από το O και θεωρείται θετικό όταν η μάζα είναι χαμηλότερα του σημείου O . Το σημείο αναφοράς γι' αυτήν τη δυναμική ενέργεια είναι το O , όπου $h = 0$ και άρα $V = 0$. Από το σχήμα βλέπουμε ότι $h = \ell \cos \theta$, όπου θ είναι η γωνιά σε πολικές συντεταγμένες που μετράται από την κατακόρυφο (διακεκομμένη γραμμή στο Σχήμα 2.3). Ωστε βρίσκουμε δυναμική ενέργεια

$$V(\theta) = -mg\ell \cos \theta. \quad (2.23)$$



Σχήμα 2.3: Το απλό εκκρεμές. Η μάζα m εξαρτάται από σταθερό σημείο O από ράβδο μήκους ℓ .

Για να γράψουμε την εξίσωση κίνησης ορίζουμε το μήκος τόξου που διανύει το σώματιο $s = \ell\theta$ από την κατακόρυφη θέση ισορροπίας του. Η επιτάχυνσή του είναι $\ddot{s} = \ell\ddot{\theta}$. Από αυτήν προκύπτει η εξίσωση κίνησης

$$m\ddot{s} = -\frac{dV}{ds} \Rightarrow m\ell\ddot{\theta} = -\frac{1}{\ell} \frac{dV}{d\theta} \Rightarrow m\ell\ddot{\theta} = -mg \sin \theta \Rightarrow \ddot{\theta} + \frac{g}{\ell} \sin \theta = 0. \quad (2.24)$$

Μία απλή λύση που μπορούμε να βρούμε είναι η $\theta(t) = 0$ πράγμα που σημαίνει ότι η κατακόρυφη θέση $\theta = 0$ είναι μία θέση ισορροπίας του εκκρεμούς. Γενικά, η παραπάνω εξίσωση είναι μη γραμμική και η γενική λύση της είναι περίπλοκη.

Μπορούμε όμως να μελετήσουμε μία προσέγγισή της στην περίπτωση που το εκκρεμές δεν αποκλίνει πολύ από την κατακόρυφη θέση ισορροπίας του, δηλαδή για $\theta \ll 1$. Η προσέγγιση μπορεί να γίνει με τους ακόλουθους δύο τρόπους.

Ο πρώτος τρόπος είναι να κάνουμε την προσέγγιση στην εξίσωση κίνησης. Χρησιμοποιούμε το ανάπτυγμα Taylor για τη συνάρτηση $\sin \theta$ και θεωρούμε ότι η προσέγγιση είναι επαρκής αν κρατήσουμε μόνο τον πρώτο όρο στο ανάπτυγμα:

$$\sin \theta \approx \theta, \quad \theta \ll 1.$$

Κάνουμε αντικατάσταση στην εξίσωση κίνησης και βρίσκουμε

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{\ell} \theta = 0. \quad (2.25)$$

Εδώ έχουμε τελικά αντικαταστήσει τον μη γραμμικό όρο ($\sin \theta$) στην αρχική Εξ. (2.24) με έναν προσεγγιστικό (θ) ο οποίος είναι γραμμικός. Λέμε ότι έχουμε *γραμμικοποιήσει* την αρχική διαφορική εξίσωση. Η λύση της γραμμικής εξίσωσης (2.25) είναι

$$\theta(t) = A \cos(\omega t + \phi_0), \quad \omega := \sqrt{\frac{g}{\ell}}. \quad (2.26)$$

Δηλαδή έχουμε περιοδική κίνηση με συχνότητα ω και περίοδο $T = 2\pi/\omega = 2\pi\sqrt{\ell/g}$.

Ο δεύτερος τρόπος είναι να γράψουμε το ανάπτυγμα Taylor για τη συνάρτηση $\cos \theta$ στη δυναμική ενέργεια όπου θα θεωρήσουμε ότι η προσέγγιση είναι επαρκής αν κρατήσουμε όρους μέχρι τον πρώτο μη σταθερό όρο στο ανάπτυγμα. Έχουμε

$$\cos \theta \approx 1 - \frac{\theta^2}{2}, \quad \theta \ll 1,$$

την οποία αντικαθιστούμε στη δυναμική ενέργεια και βρίσκουμε

$$V(\theta) = \frac{1}{2} mgl \theta^2 - mgl. \quad (2.27)$$

Ο σταθερός όρος στη δυναμική ενέργεια $-mgl$ δίνει μηδενική δύναμη, όπως έχουμε δει παραπάνω και άρα δεν θα επηρεαστεί η εξίσωση κίνησης αν τον παραλήψουμε. Γράφουμε τελικά για το προσεγγιστικό δυναμικό

$$V(\theta) = \frac{1}{2} mgl \theta^2. \quad (2.28)$$

Η εξίσωση κίνησης προκύπτει τώρα ως εξής

$$m\ell\ddot{\theta} = -\frac{1}{\ell} \frac{dV}{d\theta} \Rightarrow \ddot{\theta} + \frac{g}{\ell} \theta = 0, \quad (2.29)$$

και συμπίπτει με αυτήν που βρήκαμε με τον πρώτο τρόπο.

Μπορούμε να έχουμε μία εκτίμηση της συχνότητας της κίνησης πριν καν λύσουμε τις εξισώσεις κίνησης. Παρατηρούμε ότι οι φυσικές σταθερές και οι αντίστοιχες διαστάσεις τους είναι m : [μάζα], g : [μήκος]/[χρόνος]², ℓ : [μήκος]. Ο μόνος συνδυασμός τους που δίνει διαστάσεις [χρόνος] είναι ο $\sqrt{\ell/g}$. Είναι λοιπόν σαφές ότι αυτή η τελευταία σταθερά θα είναι ο χαρακτηριστικός χρόνος του συστήματος (στην προκειμένη περίπτωση σχετίζεται με την περίοδο της ταλάντωσης).

Για να γίνει πιο σαφής η αξία αυτής της παρατήρησης, θα μπορούσε κανείς να ορίσει μια νέα αδιάστατη μεταβλητή \bar{t} για τον χρόνο από τη σχέση

$$t := \bar{t} \sqrt{\frac{\ell}{g}}. \quad (2.30)$$

Με τη βοήθεια αυτής η Εξ. (2.25) γράφεται

$$\frac{d^2\theta}{d\bar{t}^2} + \theta = 0 \quad (2.31)$$

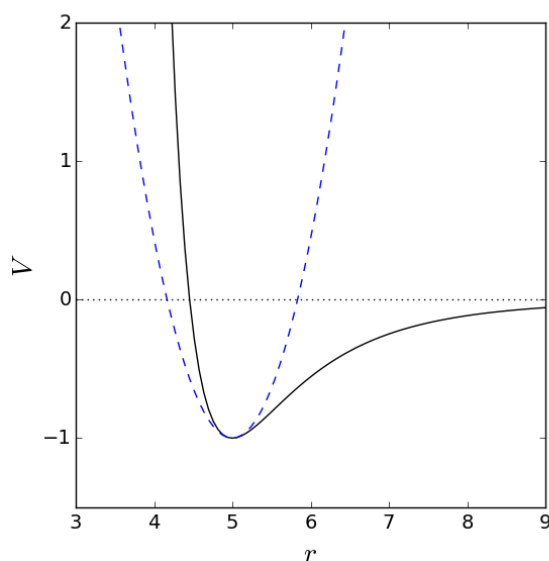
όπου δεν εμφανίζεται καμία φυσική σταθερά.

Δυναμικό χημικού δεσμού

Ο χημικός δεσμός μεταξύ δύο ατόμων προκύπτει από την αλληλεπίδραση μεταξύ τους. Μπορούμε να περιγράψουμε τέτοιες αλληλεπιδράσεις με τη βοήθεια δυναμικών και ένα εμπειρικό τέτοιο δυναμικό είναι το λεγόμενο δυναμικό Lennard-Jones

$$V(r) = D \left(\frac{R}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R}{r} \right)^6. \quad (2.32)$$

Αυτή η μορφή δυναμικού (η οποία παριστάνεται στο Σχήμα 2.4 με τη συνεχή γραμμή) περιγράφει δεσμούς Van der Waals μεταξύ των ατόμων, δηλαδή αλληλεπιδράσεις διπόλου-διπόλου. Η απόσταση μεταξύ των ατόμων είναι r , ενώ D και R είναι εμπειρικές σταθερές.



Σχήμα 2.4: Το δυναμικό Lennard Jones (για $D = 1$, $R = 5$) παριστάνεται με τη συνεχή γραμμή. Ένα παραβολικό δυναμικό παριστάνεται με τη διακεκομμένη γραμμή.

Για να σχεδιάσουμε το γράφημα της $V(r)$ παρατηρούμε κατ' αρχήν ότι

$$\begin{aligned} V(r) &\rightarrow \infty, & \text{όταν } r &\rightarrow 0 \\ V(r) &\rightarrow 0, & \text{όταν } r &\rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Για να αποκτήσουμε πληρέστερη εικόνα του γραφήματος της V πρέπει να βρούμε τις παραγώγους της. Η πρώτη παράγωγος είναι

$$\frac{dV}{dr} = \frac{12}{r} \left[\left(\frac{R}{r} \right)^6 - D \left(\frac{R}{r} \right)^{12} \right] \quad (2.33)$$

και βρίσκουμε ότι το δυναμικό έχει ακρότατο στη θέση $r = r_0$, όπου

$$\left. \frac{dV}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \Rightarrow r_0 = D^{1/6} R, \quad (2.34)$$

με τιμή

$$V(r = r_0) = -\frac{1}{D}. \quad (2.35)$$

Συμπεραίνουμε ότι τα άτομα είναι σε κατάσταση ισορροπίας όταν βρίσκονται σε απόσταση το ένα από το άλλο $r = r_0$, αφού εκεί η δύναμη μεταξύ τους $F = -dV/dr$ μηδενίζεται. Με υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου βρίσκουμε ότι

$$\frac{d^2V}{dr^2}(r = r_0) = \frac{72}{R^2 D^{4/3}} \quad (2.36)$$

και άρα (αφού αυτή είναι θετική) έχουμε ελάχιστο.

Η σημασία της παραμέτρου D φαίνεται στην Εξ. (2.35) και δίνει το βάθος του ελαχίστου δυναμικού, δηλαδή καθορίζει πόσο ισχυρός είναι ο χημικός δεσμός. Η παράμετρος R καθορίζει την απόσταση μεταξύ των ατόμων στην κατάσταση ισορροπίας, όπως φαίνεται στην Εξ. (2.34). Για να γράψουμε ένα ρεαλιστικό μοντέλο Lennard-Jones θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τα σχετικά πειραματικά δεδομένα από τα οποία θα προκύψουν οι δύο αυτές παράμετροι.

Αν και η γενική περιγραφή της δυναμικής των ατόμων είναι συνήθως περίπλοκη, μπορούμε όμως να την περιγράψουμε σχετικά απλά όταν αυτά βρίσκονται κοντά στη θέση ισορροπίας τους. Προσεγγίζουμε το δυναμικό με το ανάπτυγμα Taylor γύρω από το σημείο $r = r_0$:

$$V \approx V_0 + \left. \frac{dV}{dr} \right|_{r=r_0} (r - r_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_0} (r - r_0)^2 = V_0 + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_0} (r - r_0)^2,$$

όπου οι $V_0 = V(r = r_0)$ και $d^2V/dr^2(r = r_0)$ είναι σταθερές οι οποίες έχουν δοθεί παραπάνω. Τελικά, για μικρές τιμές της απόκλισης $\xi := r - r_0$ από τη θέση ισορροπίας, το σύστημά μας περιγράφεται προσεγγιστικά από το δυναμικό

$$V(r) = \frac{1}{2} k \xi^2, \quad (2.37)$$

όπου ορίσαμε τη σταθερά

$$k := \frac{d^2V}{dr^2}(r = r_0) = \frac{72}{R^2 D^{4/3}}.$$

Επίσης, παραλείψαμε τη σταθερά V_0 η οποία δεν θα επηρεάσει τις εξισώσεις κίνησης. Η παραβολική αυτή προσεγγιστική μορφή του δυναμικού γύρω από το ελάχιστο $r = r_0$ παριστάνεται στο Σχήμα 2.4 με τη διακεκομμένη γραμμή. Είναι φανερό ότι η προσέγγιση ισχύει για μικρές αποκλίσεις από τη θέση ισορροπίας, $\xi \ll R$.

Σύντομο πρόβλημα 2.2. Τι κίνηση θα κάνει το σύστημα των ατόμων όταν ισχύει η προσέγγιση (2.37);

Επίλυση. Θα κάνει αρμονική ταλάντωση με συχνότητα

$$\omega = \sqrt{k/\mu}$$

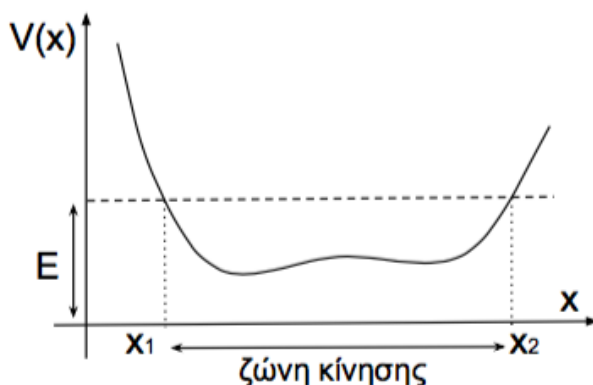
όπου μ είναι η κατάλληλη μάζα. (Ποιά είναι η μάζα μ την οποία πρέπει να χρησιμοποιήσουμε σε αυτό το σύστημα;)

Δυναμικά γενικότερης μορφής

Ας υποθέσουμε ένα δυναμικό το οποίο έχει ένα τοπικό ελάχιστο όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.5. Για να καταλάβουμε ποιοτικά την κίνηση σωματίου γύρω από το ελάχιστο του δυναμικού θα χρησιμοποιήσουμε τη σχέση που προκύπτει από τη διατήρηση της ενέργειας (2.16) και την οποία ήδη συζητήσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο:

$$v = \pm \sqrt{\frac{2}{m} [\mathcal{E} - V(x)]}, \quad (2.38)$$

όπου \mathcal{E} είναι η σταθερά που δίνει την ενέργεια του σωματίου.



Σχήμα 2.5: Ένα δυναμικό το οποίο παρουσιάζει τοπικά ελάχιστα.

Ας υποθέσουμε ότι η \mathcal{E} είναι μεγαλύτερη από το ελάχιστο του $V(x)$ και ότι έχουμε δύο σημεία x_1, x_2 εκατέρωθεν της θέσης του ελαχίστου για τα οποία ισχύει $\mathcal{E} = V(x_1)$ και $\mathcal{E} = V(x_2)$. Πρέπει να είναι σαφές ότι η κίνηση είναι δυνατή μόνο στο διάστημα $x_1 \leq x \leq x_2$ όπου $\mathcal{E} > V(x)$, δηλαδή στο διάστημα όπου η υπόριζος ποσότητα στην Εξ. (2.38) είναι μη αρνητική. Στα άκρα του διαστήματος η Εξ. (2.38) δίνει $v(x_1) = 0$, $v(x_2) = 0$ και, με βάση το Σχήμα 2.5, βλέπουμε ότι η ταχύτητα ενός σωματίου που κινείται μέσα σε αυτό το δυναμικό αλλάζει πρόσημο κάθε φορά που αυτό φθάνει στα σημεία x_1 ή x_2 . Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι ένα σωματίο θα παλινδρομεί μεταξύ των x_1 και x_2 .

Παρατηρούμε επίσης ότι η ταχύτητα v είναι συνάρτηση της θέσης $v = v(x)$ και μόνο. Αυτή η παρατήρηση σε συνδυασμό με την Εξ. (2.38) (ή ακριβέστερα την (2.16)) δείχνει ότι η χρονική διάρκεια της κίνησης από το x_1 στο x_2 και πάλι στο x_1 είναι σταθερή και άρα μπορεί κανείς τελικά να συμπεράνει ότι η κίνηση ενός σωματίου μέσα σε ένα τυχαίο δυναμικό, σαν αυτό του σχήματος, είναι *περιοδική*.

Σύντομο πρόβλημα 2.3. Εφαρμόστε τις ιδέες αυτής της παραγράφου για το δυναμικό Lennard-Jones. Περιγράψτε τις πιθανές κινήσεις του συστήματος. Γράψτε την έκφραση για την περίοδο της κίνησης (όταν αυτή είναι περιοδική). Συγκρίνετε με το αποτέλεσμα που δίνει η παραβολική προσέγγιση γύρω από το $r = r_0$.

Ερώτηση κατανόησης 2.1. Σε ποιές περιπτώσεις (για ποιές ενέργειες) το σύστημα που περιγράφεται από δυναμικό Lennard-Jones δεν θα κάνει περιοδική κίνηση;

Ερώτηση κατανόησης 2.2. Στην περίπτωση του απλού εκκρεμούς το οποίο έχει μεγάλος πλάτος ταλάντωσης, η περίοδος ταλάντωσης μικρότερη ή μεγαλύτερη από την περίοδο ταλάντωσης στην αρμονική προσέγγιση;

2.2 Εξισώσεις Euler-Lagrange και Hamilton

2.2.1 Γενικευμένες συντεταγμένες

Η θέση κάθε σωματίου στον χώρο μπορεί να περιγραφεί από τρεις καρτεσιανές συντεταγμένες. Αν θεωρήσουμε ένα σύστημα N σωματίων, τότε αυτό περιγράφεται (δηλαδή, οι θέσεις των σωματίων καθορίζονται πλήρως) από $3N$ συντεταγμένες. Σε πολλές όμως περιπτώσεις αυτές δεν είναι οι πιο κατάλληλες μεταβλητές για την περιγραφή του συστήματος, ενώ υπάρχουν κάποιες άλλες μεταβλητές οι οποίες περιγράφουν με απλούστερο τρόπο το συγκεκριμένο σύστημα. Για παράδειγμα, θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε πολικές συντεταγμένες ή σφαιρικές συντεταγμένες. Μία κατηγορία συστημάτων όπου συχνά χρειαζόμαστε κατάλληλα επιλεγμένες μεταβλητές για να τα περιγράψουμε είναι για κινήσεις οι οποίες υπόκεινται σε δεσμούς. Είναι τότε μάλιστα δυνατόν να χρειάζονται λιγότερες από $3N$ μεταβλητές για να περιγράψουν το σύστημα. Ένα τέτοιο παράδειγμα είναι ένα σωματίο το οποίο είναι περιορισμένο να κινείται πάνω σε μία σφαίρα. Στην περίπτωση αυτή δεν είναι αναγκαίες τρεις μεταβλητές (π.χ., οι τρεις καρτεσιανές συντεταγμένες) για να περιγράψουν την κίνηση, αλλά, π.χ., μόνο οι δύο γωνίες σφαιρικών συντεταγμένων αρκούν. Επίσης, η θέση ενός σωματίου το οποίο είναι περιορισμένο να κινείται επάνω σε κύκλο δεδομένης ακτίνας ℓ (π.χ., το απλό εκκρεμές) περιγράφεται από μία μόνο μεταβλητή, η οποία είναι μία γωνία θ .

Για να περιγράψουμε γενικότερα συστήματα με μεταβλητές οι οποίες είναι ενδεχομένως κατάλληλες για το συγκεκριμένο κάθε φορά σύστημα εισάγουμε την έννοια των *γενικευμένων συντεταγμένων* (Goldstein et al., 2001). Για ένα σύστημα N σωματίων ορίζουμε τις n μεταβλητές q_i έτσι ώστε να περιγράφουν πλήρως το σύστημα. Εφόσον οι γενικευμένες συντεταγμένες καθορίζουν πλήρως τις θέσεις του συστήματος σωματίων θα πρέπει να είναι βέβαια δυνατόν να καθορίσουμε τις καρτεσιανές συντεταγμένες του συστήματος. Με άλλα λόγια οι καρτεσιανές συντεταγμένες θα δίνονται από σχέσεις της μορφής

$$x_i = x_i(q_1, q_2, \dots, q_n, t), \quad i = 1, \dots, 3N. \quad (2.39)$$

Έχουμε δηλαδή σχέσεις μετασχηματισμού των γενικευμένων σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Σαν παράδειγμα μετασχηματισμού της μορφής (2.39) σκεφθείτε ότι οι q_i μπορεί να είναι οι πολικές συντεταγμένες r, θ , οπότε έχουμε $x_1 = r \cos \theta$, $x_2 = r \sin \theta$. Σύμφωνα με τη συζήτηση στην προηγούμενη παράγραφο περιμένουμε ότι γενικά θα ισχύει $n \leq 3N$.

2.2.2 Αρχή του Hamilton

Ας υποθέσουμε ένα σύστημα που περιγράφεται από τις γενικευμένες συντεταγμένες q_1, \dots, q_n . Σε κάθε χρονική στιγμή η κατάσταση του συστήματος δίνεται από τις τιμές των συντεταγμένων. Άρα η εξέλιξη του στον χρόνο μπορεί να περιγραφεί σαν κίνηση στον n -διάστατο χώρο των συντεταγμένων. Είμαστε τώρα σε θέση να δώσουμε μία πιο γενική αιτιολόγηση για τις εξισώσεις κίνησης ενός συστήματος σωμάτων, δηλαδή να εξάγουμε τις εξισώσεις Euler-Lagrange από μία γενική αρχή.

Γνωρίζουμε ήδη ότι η κίνηση ενός συστήματος σωμάτων περιγράφεται από τις εξισώσεις του Νεύτωνα. Θα δούμε όμως στη συνέχεια ότι είμαστε σε θέση να δώσουμε μία διαφορετική διατύπωση των νόμων κίνησης του συστήματος. Στη διατύπωση μάλιστα αυτή μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε οποιεσδήποτε γενικευμένες συντεταγμένες είναι πιο βολικές για το εκάστοτε σύστημα που θα μελετήσουμε. Η νέα διατύπωση θα γίνει με τη βοήθεια μίας πραγματικής συνάρτησης L η οποία ονομάζεται Λαγκρανζιανή και παίζει το ρόλο ενός γενικευμένου δυναμικού. Οι νόμοι της κίνησης θα προκύψουν από την *αρχή του Hamilton*. Αυτή η τελευταία βασίζεται στο ολοκλήρωμα της L στον χρόνο, από μία αρχική στιγμή t_1 σε μία τελική στιγμή t_2 :

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) dt. \quad (2.40)$$

Το I είναι ένα συναρτησιακό και η μελέτη του γίνεται από τον λογισμό μεταβολών. Οι βασικές έννοιες και αποτελέσματα του λογισμού μεταβολών δίνονται στο υποκεφάλαιο 2.3 και αυτά θα χρησιμοποιήσουμε αρκετά στις επόμενες παραγράφους.

Παρατήρηση 2.5. Η *αρχή του Hamilton* ορίζει ότι από όλες τις πιθανές κινήσεις στον χώρο το σώμα επιλέγει να κινηθεί σε αυτήν για την οποία το I έχει ελάχιστη τιμή. Αυτό μας παραπέμπει κατευθείαν στον λογισμό μεταβολών. Άρα μπορούμε αμέσως να δούμε ότι η *αρχή του Hamilton* διατυπώνεται και ως (δείτε την Εξ. (2.89))

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) dt = 0, \quad (2.41)$$

όπου το σύμβολο δI δηλώνει τη μεταβολή του I .

2.2.3 Ολοκλήρωμα δράσης

Το ολοκλήρωμα (2.40), του οποίου η ολοκληρωταία ποσότητα είναι η Λαγκρανζιανή και η ολοκλήρωση είναι στον χρόνο, λέγεται *ολοκλήρωμα δράσης* (τέτοια ολοκληρώματα μελετώνται στο υποκεφάλαιο 2.3). Το I είναι ένα συναρτησιακό όπου τον ρόλο του x παίζει ο χρόνος t . Πρέπει όμως να προσέξουμε ότι το I εξαρτάται από n συναρτήσεις q_i και όχι από μία μόνο συνάρτηση y όπως το $J(y)$ στην Εξ. (2.79).

Ζητάμε ελάχιστα του ολοκληρώματος δράσης (2.40). Θα θέλαμε δηλαδή τις συνθήκες για τις οποίες η μεταβολή δI είναι μηδέν, όπως στην Εξ. (2.41) και συνεπώς ζητάμε μία γενίκευση του αποτελέσματος (2.97) το οποίο δίνει τις εξισώσεις Euler-Lagrange για συναρτησιακό το οποίο εξαρτάται από μία μόνο συνάρτηση.

Η γενίκευση θα δίνει εξισώσεις Euler-Lagrange για συναρτησιακό το οποίο εξαρτάται από n συναρτήσεις $I = I(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t)$. Από τη συνθήκη $\delta I = 0$ προκύπτουν οι εξής n εξισώσεις

Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (2.42)$$

Κάθε μία από αυτές έχει τη μορφή της Εξ. (2.97), τώρα όμως έχουμε ένα σύστημα n τέτοιων εξισώσεων.

2.2.4 Λαγκρανζιανή

Για να μπορέσουμε να μελετήσουμε οποιοδήποτε σύστημα με βάση την αρχή του Hamilton και τις εξισώσεις Euler-Lagrange θα πρέπει πρώτα να έχουμε τη Λαγκρανζιανή του συστήματος L . Θα δούμε σε αυτή την παράγραφο πώς αυτή προκύπτει για μία κατηγορία συστημάτων για τα οποία μπορούμε να ορίσουμε κινητική και δυναμική ενέργεια (Fowles & Cassiday, 2004; Kibble & Bershire, 2004; Goldstein et al., 2001).

Η κινητική ενέργεια ενός συστήματος σωματίων γνωρίζουμε ότι είναι ανάλογη του τετραγώνου της ταχύτητάς τους όταν εργαζόμαστε σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Σε γενικευμένες συντεταγμένες η κινητική ενέργεια θα έχει μία τετραγωνική μορφή ως προς \dot{q}_i :

$$T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(q_1, \dots, q_n) \dot{q}_i \dot{q}_j, \quad (2.43)$$

όπου οι $a_{ij}(q_1, \dots, q_n)$ είναι συναρτήσεις των γενικευμένων συντεταγμένων q_i . Ονομάζουμε τις \dot{q}_i γενικευμένες ταχύτητες.

Παράδειγμα 2.11. Η ταχύτητά σωματίου σε κυλινδρικές συντεταγμένες είναι $\mathbf{v} = \dot{r}\hat{e}_r + r\dot{\theta}\hat{e}_\theta + \dot{z}\hat{e}_z$. Ωστε η κινητική του ενέργεια, αν η μάζα του είναι m , είναι

$$T = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2)$$

η οποία είναι της μορφής (2.43). □

Η δυναμική ενέργεια θεωρούμε (στην απλή περίπτωση) ότι είναι συνάρτηση των q_i και ίσως και του χρόνου t (αλλά όχι των γενικευμένων ταχυτήτων \dot{q}_i), δηλαδή είναι της μορφής:

$$V = V(q_1, \dots, q_n, t). \quad (2.44)$$

Για συστήματα για τα οποία υπάρχει η δυναμική ενέργεια ορίζουμε τη Λαγκρανζιανή ως

$$L = L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) := T - V. \quad (2.45)$$

Ας περάσουμε αμέσως σε παραδείγματα για τις σχέσεις που είδαμε σε αυτή την παράγραφο.

Παράδειγμα 2.12. Έστω ο αρμονικός ταλαντωτής σε μία διάσταση με κινητική και δυναμική ενέργεια

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2, \quad V = \frac{1}{2}kx^2.$$

Βρείτε τις εξισώσεις κίνησης.

Επίλυση. Η Λαγκρανζιανή είναι

$$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2.$$

Εδώ έχουμε μία συντεταγμένη, την x . Υπολογίζουμε

$$\frac{dL}{d\dot{x}} = m\dot{x}, \quad \frac{dL}{dx} = -kx$$

και άρα η εξίσωση Euler-Lagrange γράφεται

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dL}{d\dot{x}} \right) = \frac{dL}{dx} \Rightarrow \frac{d}{dt}(m\dot{x}) = -kx \Rightarrow m\ddot{x} + kx = 0.$$

□

Παράδειγμα 2.13. Έστω το απλό εκκρεμές με κινητική και δυναμική ενέργεια

$$T = \frac{1}{2} m(\ell\dot{\theta})^2 = \frac{1}{2} m\ell^2 \dot{\theta}^2, \quad V = -mg\ell \cos \theta.$$

Βρείτε τις εξισώσεις κίνησης.

Επίλυση. Η Λαγκρανζιανή είναι

$$L = T - V = \frac{1}{2} m\ell^2 \dot{\theta}^2 + mg\ell \cos \theta.$$

Έχουμε μία γενικευμένη συντεταγμένη, τη γωνία θ . Υπολογίζουμε

$$\frac{dL}{d\dot{\theta}} = m\ell^2 \dot{\theta}, \quad \frac{dL}{d\theta} = -mg\ell \sin \theta$$

και άρα η εξίσωση Euler-Lagrange γράφεται

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{dL}{d\dot{\theta}} \right) = \frac{dL}{d\theta} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m\ell^2 \dot{\theta}) = -mg\ell \sin \theta \Rightarrow \ddot{\theta} + \frac{g}{\ell} \sin \theta = 0.$$

□

Παράδειγμα 2.14. Έστω ένα σώματιο το οποίο κινείται στο επίπεδο (σε δύο διαστάσεις) και βρίσκεται σε κεντρικό δυναμικό, δηλαδή, όταν χρησιμοποιήσουμε πολικές συντεταγμένες (r, θ) , το δυναμικό γράφεται $V = V(r)$. Βρείτε τις εξισώσεις κίνησης.

Επίλυση. Η κινητική του ενέργεια σε πολικές συντεταγμένες είναι

$$T = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) \quad (2.46)$$

και άρα η Λαγκρανζιανή είναι

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - V(r). \quad (2.47)$$

Έχουμε δύο γενικευμένες συντεταγμένες r, θ και άρα δύο εξισώσεις Euler-Lagrange. Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} &= m\dot{r}, & \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} &= mr^2 \dot{\theta} \\ \frac{\partial L}{\partial r} &= mr\dot{\theta}^2 - \frac{dV}{dr}, & \frac{dL}{d\theta} &= 0 \end{aligned}$$

και άρα οι εξισώσεις Euler-Lagrange είναι οι

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial r} \Rightarrow m\ddot{r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{dV}{dr} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial \theta} \Rightarrow \frac{d}{dt} (mr^2 \dot{\theta}) = 0. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι η τελευταία εξίσωση δίνει το αποτέλεσμα ότι η ποσότητα $mr^2 \dot{\theta}$ παραμένει σταθερή κατά τη διάρκεια της κίνησης: $r^2 \dot{\theta} = c$.

□

2.2.5 Ενέργεια

Οι εξισώσεις Euler-Lagrange είναι σε μορφή η οποία υποδεικνύει την ύπαρξη ποσοτήτων οι οποίες διατηρούνται κατά τη διάρκεια της κίνησης. Για να βρούμε τέτοιες ποσότητες θα πρέπει να αποδείξουμε ότι η ολική παράγωγος τους στον χρόνο μηδενίζεται.

Ο βασικότερος νόμος διατήρησης παράγεται ως εξής. Γράφουμε το ολικό διαφορικό της Λαγκρανζιανής

$$\frac{dL}{dt} = \sum_k \left[\frac{\partial L}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{d\dot{q}_k}{dt} \right] + \frac{\partial L}{\partial t}, \quad (2.48)$$

και χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις Euler-Lagrange (2.42)

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum_k \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{d\dot{q}_k}{dt} \right] + \frac{\partial L}{\partial t} = \sum_k \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k \right) \right] + \frac{\partial L}{\partial t} \Rightarrow \\ \frac{d}{dt} \left(\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L \right) + \frac{\partial L}{\partial t} &= 0. \end{aligned}$$

Προκύπτει άμεσα ότι, στην περίπτωση $\partial L / \partial t = 0$, η ποσότητα

$$H(q_k, \dot{q}_k) := \sum_k \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L(q_k, \dot{q}_k) \quad (2.49)$$

είναι διατηρήσιμη. Αυτή λέγεται *ενέργεια* του συστήματος.

Παράδειγμα 2.15. Έστω ένα μονοδιάστατο σύστημα με Λαγκρανζιανή $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$. Η ενέργειά του είναι

$$H = \dot{x} \frac{dL}{dx} - L = (m\dot{x})\dot{x} - \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) \right] = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x).$$

Η ενέργεια H διατηρείται αφού $\partial L / \partial t = 0$. □

Παράδειγμα 2.16. Έστω ένα σύστημα το οποίο περιγράφεται σε πολικές συντεταγμένες και έχει Λαγκρανζιανή

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r, \theta). \quad (2.50)$$

Για να υπολογίσουμε την ενέργεια έχουμε

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta},$$

και άρα

$$\begin{aligned} &= \dot{r} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} + \dot{\theta} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} - \left[\frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r, \theta) \right] \\ &= m\dot{r}^2 + mr^2\dot{\theta}^2 - \frac{1}{2}m\dot{r}^2 - \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 + V(r, \theta) \\ &= \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + V(r, \theta). \end{aligned}$$

□

Ας δούμε τώρα κάποιες γενικές ιδιότητες για τις Λαγκρανζιανές συστημάτων για τα οποία μπορούμε να ορίσουμε κινητική και δυναμική ενέργεια. Ας υποθέσουμε τις γενικευμένες συντεταγμένες οι οποίες ορίζονται από τις

$$x_i = x_i(q_k). \quad (2.51)$$

Έχουμε για τις ταχύτητες:

$$\dot{x}_i = \sum_k \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \dot{q}_k. \quad (2.52)$$

Οπότε η κινητική ενέργεια γράφεται

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{x}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_i m_i \sum_j \sum_k \left(\frac{\partial x_i}{\partial q_j} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \right) \dot{q}_j \dot{q}_k = \frac{1}{2} \sum_{j,k} a_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k \quad (2.53)$$

όπου τα a_{jk} ορίζονται από την παραπάνω σχέση, δηλαδή,

$$a_{jk} = \sum_i m_i \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \quad (2.54)$$

και ισχύει $a_{jk} = a_{kj}$.

Είδαμε λοιπόν στην Εξ. (2.53) ότι η κινητική ενέργεια είναι μία ομογενής συνάρτηση δευτέρου βαθμού. Από το θεώρημα του Euler για ομογενείς συναρτήσεις παίρνουμε

$$\sum_k \dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = 2T. \quad (2.55)$$

Θεωρούμε επίσης ότι η δυναμική ενέργεια είναι $V = V(q_k)$, οπότε

$$\sum_k \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \sum_k \dot{q}_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = 2T. \quad (2.56)$$

Βρίσκουμε τελικά

$$H = \sum_k \dot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - L = 2T - (T - V) = T + V. \quad (2.57)$$

2.2.6 Γενικευμένη ορμή

Η μορφή των εξισώσεων Euler-Lagrange υποδεικνύει τις εξής σημαντικές ποσότητες

$$p_k := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \quad (2.58)$$

οι οποίες ονομάζονται *γενικευμένες ορμές*. Για κάθε γενικευμένη συντεταγμένη q_k υπάρχει η αντίστοιχη γενικευμένη ορμή p_k . Άλλος όρος που χρησιμοποιείται για τις ποσότητες p_k είναι *κανονική ορμή*. Με αυτό τον ορισμό μπορούμε να γράψουμε τις εξισώσεις Euler-Lagrange στη μορφή

$$\frac{dp_k}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q_k} \quad (2.59)$$

οπότε βλέπουμε ότι η μεταβολή στον χρόνο μιας γενικευμένης ορμής ισούται με ποσότητα η οποία είναι, στις συνήθεις περιπτώσεις, ίση με μία γενικευμένη δύναμη - έτσι δικαιολογείται και το όνομά τους.

Παράδειγμα 2.17. Έστω ένα μονοδιάστατο πρόβλημα με $T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$ και $L = T - V(x)$. Έχουμε τη γενικευμένη ορμή

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = m \dot{x},$$

η οποία συμπίπτει με τη συνήθη ορμή. □

Παράδειγμα 2.18. Έστω ένα σωματίο που βρίσκεται σε κεντρικό δυναμικό (σε δύο διαστάσεις) και περιγράφεται από πολικές συντεταγμένες. Έχουμε

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2), \quad L = T - V(r),$$

ώστε οι δύο γενικευμένες ορμές είναι

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \quad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta}.$$

Η p_r μοιάζει με συνήθη ορμή, ενώ η p_θ έχει μία ασυνήθιστη μορφή και ονομάζεται *στροφορμή* καθώς είναι ανάλογη (μέσω του $\dot{\theta}$) με τον ρυθμό περιστροφής του σωματίου. \square

Η σημαντικότερη ιδιότητα των γενικευμένων ορμών προκύπτει από τις εξισώσεις (2.59). Έχουμε μία ιδιαίτερα απλή σχέση στην περίπτωση κατά την οποία κάποια συντεταγμένη q_k δεν εμφανίζεται στη Λαγκρανζιανή L :

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}(p_k) = 0 \Rightarrow p_k = \text{σταθ.} \quad (2.60)$$

Παρατήρηση 2.6. Στην περίπτωση που κάποια συντεταγμένη q_k (για συγκεκριμένο k) δεν περιέχεται στην Λαγκρανζιανή, τότε η αντίστοιχη γενικευμένη ορμή p_k είναι διατηρήσιμη ποσότητα.

Παράδειγμα 2.19. Για το κεντρικό δυναμικό που είδαμε στο προηγούμενο παράδειγμα, η Λαγκρανζιανή

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - V(r)$$

δεν περιέχει τη συντεταγμένη θ , δηλ., $\partial L / \partial \theta = 0$. Άρα η αντίστοιχη γενικευμένη ορμή $p_\theta = mr^2 \dot{\theta}$ (η στροφορμή) είναι διατηρήσιμη ποσότητα. Αυτό σημαίνει ότι η γωνιακή ταχύτητα ενός σωματίου είναι αντιστόφως ανάλογη της ακτινικής του συντεταγμένης

$$\dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2}$$

όπου p_θ είναι μία σταθερά.

Τέτοιες σχέσεις είναι πολύ χρήσιμες. Στο παράδειγμά μας, μπορούμε να επιστρέψουμε στην εξίσωση κίνησης για το r (που έχουμε δει σε προηγούμενο παράδειγμα)

$$m\ddot{r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{dV}{dr}$$

και να αντικαταστήσουμε το $\dot{\theta}$ από τον νόμο διατήρησης:

$$m\ddot{r} - \frac{p_\theta^2}{mr^3} + \frac{dV}{dr} = 0,$$

οπότε έχουμε καταλήξει σε μία εξίσωση που περιέχει μόνο το r . \square

2.2.7 Γενικευμένες δυνάμεις

Ας θυμηθούμε το απλό παράδειγμα ενός σώματος μάζας m το οποίο κινείται σε μία διάσταση και βρίσκεται σε ένα παραβολικό δυναμικό $V = V(x)$. Η Λαγκρανζιανή του είναι

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x).$$

Η εξίσωση Euler-Lagrange είναι

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x} \Rightarrow m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (2.61)$$

Το αριστερό μέλος είναι η μάζα επί την επιτάχυνση ενώ το δεξιό είναι η δύναμη που ασκείται λόγω του δυναμικού. Αν, για παράδειγμα, το δυναμικό είναι παραβολικό $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, τότε η δύναμη είναι $F = -dV/dx = -kx$, δηλαδή μία δύναμη επαναφοράς όπως στα ελατήρια. Η εξίσωση κίνησης είναι

$$m\ddot{x} = -kx$$

και περιγράφει ταλαντώσεις του σώματος.

Ας επαναλάβουμε τα παραπάνω για την περίπτωση μίας γενικευμένης συντεταγμένης q , οπότε θα έχουμε εξισώσεις Euler-Lagrange της μορφής

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial L}{\partial q}.$$

Οι δυνάμεις που ασκούνται προέρχονται από δυναμικό $V = V(q)$ και περιλαμβάνονται στο δεξιό μέλος της εξίσωσης. Θα ονομάσουμε τον όρο $Q_q = -dV/dq$ *γενικευμένη δύναμη* που αντιστοιχεί στη γενικευμένη συντεταγμένη q .

Παράδειγμα 2.20. Το δυναμικό του απλού εκκρεμούς είναι $V(\theta) = -mg \cos \theta$, ώστε η γενικευμένη δύναμη είναι

$$Q_\theta = -\frac{dV}{d\theta} = mg \sin \theta.$$

□

Πρέπει να προσέξουμε ότι, ενώ μία παράγωγος δυναμικού V ως προς χωρική μεταβλητή x δίνει μία συνήθη δύναμη (όπως στο παράδειγμα με το ελατήριο), η παράγωγος της V ως προς θ δεν δίνει μία δύναμη όπως αυτή συνήθως εννοείται στη Φυσική. Γενικότερα, υποθέτουμε ένα δυναμικό που εξαρτάται από n γενικευμένες συντεταγμένες q_k και είναι $V = V(q_1, \dots, q_n)$ και ονομάζουμε όλες τις ποσότητες $Q_k = -\partial V / \partial q_k$ γενικευμένες δυνάμεις.

Θα μας φανεί πολύ χρήσιμο να δούμε πώς συνδέονται οι γενικευμένες δυνάμεις με τις συνήθεις δυνάμεις. Ας υποθέσουμε λοιπόν ότι οι q_k μπορούν να δωθούν ως συναρτήσεις m συνήθων συντεταγμένων x_i , δηλαδή $q_k = q_k(x_1, \dots, x_m)$, $k = 1, \dots, n$. Με τον κανόνα της αλυσίδας γράφουμε

$$Q_k := -\frac{\partial V}{\partial q_k} = -\sum_i \frac{\partial V}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial q_k}, \quad k = 1, \dots, n. \quad (2.62)$$

Στην εξίσωση αυτή οι συνήθεις δυνάμεις είναι οι $F_i := -\partial V / \partial x_i$ και οι γενικευμένες δυνάμεις Q_k δίνονται από ένα συνδυασμό των συνήθων δυνάμεων. Μπορούμε λοιπόν να γράψουμε

$$Q_k = \sum_i F_i \frac{\partial x_i}{\partial q_k}, \quad k = 1, \dots, n. \quad (2.63)$$

2.2.8 Μη-διατηρητικά συστήματα

Παράδειγμα 2.21. *Αρμονικός ταλαντωτής με απόσβεση*) Θεωρούμε έναν αρμονικό ταλαντωτή ο οποίος συναντά κάποια αντίσταση κατά την κίνησή του (π.χ., τριβή, αντίσταση του αέρα, κλπ). Μία τέτοια διαδικασία παριστάνεται από έναν επιπλέον όρο στο δεξιό μέλος της εξίσωσης του Νεύτωνα (2.21), μία δύναμη της μορφής $f_\tau = -\lambda \dot{x}$ όπου λ είναι μία σταθερά. Αυτός ο όρος παριστάνει δύναμη ανάλογη της

ταχύτητας η οποία μειώνει την επιτάχυνση, όταν $\lambda > 0$. Αυτή η δύναμη τριβής θα πρέπει να προστεθεί στη δύναμη επαναφοράς στην εξίσωση κίνησης, ώστε έχουμε

$$m\ddot{x} = -kx + f_\tau \Rightarrow m\ddot{x} = -kx - \lambda\dot{x}. \quad (2.64)$$

Η λύση είναι της μορφής $x(t) = Ce^{\mu t}$, την οποία αντικαθιστούμε στην

$$m\ddot{x} + \lambda\dot{x} + kx = 0$$

για να βρούμε τη συνθήκη

$$m\mu^2 + \lambda\mu + k = 0 \Rightarrow \mu = \frac{-\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4mk}}{2m}.$$

Βλέπουμε ότι το μ έχει αρνητικό πραγματικό μέρος. Στην περίπτωση σχετικά μικρής απόσβεσης, όπου $\lambda^2 < 4mk$, γράφουμε

$$\mu = -\alpha \pm i\omega, \quad \alpha := \frac{\lambda}{2m}, \quad \omega := \frac{\sqrt{4mk - \lambda^2}}{2m},$$

η λύση γράφεται

$$x(t) = Ce^{-\alpha t} e^{\pm i\omega t}$$

και παριστάνει ταλάντωση με μειούμενο πλάτος.

Αν πάρουμε την ενέργεια του ταλαντωτή η οποία είναι η

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 + \frac{1}{2} kx^2,$$

παρατηρούμε ότι θα μειώνεται καθώς το πλάτος της ταλάντωσης θα μειώνεται. Μπορούμε να υπολογίσουμε τον ρυθμό μεταβολής της ενέργειας ως εξής

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = m\dot{x}\ddot{x} + kx\dot{x} = (m\ddot{x} + kx)\dot{x} = -\lambda\dot{x}^2 < 0, \quad (2.65)$$

έτσι δείχνουμε ότι, πραγματικά, η ενέργεια \mathcal{E} μειώνεται με τον χρόνο. Παρατηρήστε ότι το αποτέλεσμα (2.65) για την μονότονη μείωση της ενέργειας προκύπτει χωρίς να χρειάζεται να γνωρίζουμε τη λύση $x(t)$ της εξίσωσης κίνησης. \square

Παρατήρηση 2.7. Δεν υπάρχει τρόπος να εξαχθεί από δυναμικό V μία δύναμη τριβής όπως η f_τ και έτσι δεν μπορεί να περιληφθεί σε οποιαδήποτε μορφή Λαγκρανζιανής και άρα ούτε στις εξισώσεις Euler-Lagrange όπως τις έχουμε γνωρίσει ως τώρα.

Αν περιοριστούμε στην περίπτωση του αρμονικού ταλαντωτή με απόσβεση που είδαμε, μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση κίνησης στη μορφή

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x} + f_\tau, \quad (2.66)$$

όπου L είναι η ήδη γνωστή Λαγκρανζιανή του και η δύναμη f_τ που δεν δίνεται από το δυναμικό του συστήματος έχει προστεθεί στο δεξιό μέλος.

Ας γενικεύσουμε την περιγραφή μας για ένα σύστημα το οποίο περιγράφεται από n γενικευμένες συντεταγμένες q_k , $k = 1 \dots, n$. Υποθέτουμε ότι στο σύστημα ασκούνται δυνάμεις και ορισμένες μόνο από αυτές παράγονται από δυναμικό $V(q_1, \dots, q_n)$, δηλαδή, οι συνάμεις γράφονται στη μορφή

$$Q_k = -\frac{\partial V}{\partial q_k} + Q'_k, \quad (2.67)$$

όπου Q_k είναι η συνολική δύναμη (η οποία αντιστοιχεί στην κάθε γενικευμένη συντεταγμένη q_k) και Q'_k είναι το μέρος της δύναμης το οποίο δεν παράγεται από το δυναμικό V . Κανουμε μία επέκταση των εξισώσεων Euler-Lagrange προσθέτοντας τις δυνάμεις Q'_k , ώστε έχουμε τη μορφή

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = Q'_k, \quad k = 1, \dots, n. \quad (2.68)$$

Οι γενικευμένες δυνάμεις Q'_k δίνονται από εξίσωση ανάλογη της (2.63):

$$Q'_k := \sum_i F'_i \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \quad (2.69)$$

όπου F'_i είναι τώρα οι συνήθεις δυνάμεις που δεν παράγονται από το δυναμικό.

Παράδειγμα 2.22. Έστω αρμονικός ταλαντωτής σε μία διάσταση στον οποίο ασκείται μία επιπλέον δύναμη τριβής $f_\tau = -c\dot{x}$, όπου c μία σταθερά. Γράψτε τις εξισώσεις κίνησης χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις Euler-Lagrange.

Επίλυση. Η Λαγκρανζιανή είναι (όπου αγνοείται η δύναμη τριβής)

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} k x^2.$$

Στις εξισώσεις Euler-Lagrange πρέπει να λάβουμε επιπλέον υπ' όψιν τη δύναμη τριβής. Αυτή είναι ίση με τη γενικευμένη δύναμη $Q'_x = f_\tau$, η οποία θα προστεθεί στο δεξιό μέλος της εξίσωσης. Η πλήρης εξίσωση είναι

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x} + Q'_x \Rightarrow m\ddot{x} = -kx - c\dot{x} \Rightarrow m\ddot{x} + kx + c\dot{x} = 0.$$

□

Παράδειγμα 2.23. Έστω ένα σώματιο το οποίο βρίσκεται σε δυναμικό $V = V(r)$, όπου (r, θ) είναι πολικές συντεταγμένες. Μία επιπλέον δύναμη τριβής $\mathbf{f} = -\lambda \mathbf{v}$ (η οποία δεν περιέχεται στο δυναμικό) ασκείται σε αυτό το σώματιο, όπου λ είναι μία σταθερά και \mathbf{v} είναι η ταχύτητά του. Γράψτε τις εξισώσεις κίνησής του.

Επίλυση. Χρειάζεται να βρούμε τις γενικευμένες δυνάμεις που προκύπτουν από τη δύναμη τριβής. Εφαρμόζουμε την Εξ. (2.62) η οποία εδώ γράφεται ως εξής

$$Q'_r = \mathbf{f} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r}, \quad Q'_\theta = \mathbf{f} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta}.$$

Εφόσον $\mathbf{r} = r \hat{\mathbf{e}}_r$, έχουμε $\partial \mathbf{r} / \partial r = \hat{\mathbf{e}}_r$ και επίσης, χρησιμοποιώντας τον ορισμό του $\hat{\mathbf{e}}_r = \cos \theta \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \hat{\mathbf{j}}$, βρίσκουμε $\partial \mathbf{r} / \partial \theta = r \hat{\mathbf{e}}_\theta$. Άρα οι γενικευμένες δυνάμεις είναι

$$Q'_r = \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r, \quad Q'_\theta = r \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\theta.$$

Η δύναμη τριβής σε πολικές συντεταγμένες είναι

$$\mathbf{f} = -\lambda \mathbf{v} = -\lambda (\dot{r} \hat{\mathbf{e}}_r + r \dot{\theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta)$$

και άρα έχουμε τελικά

$$Q'_r = -\lambda \dot{r}, \quad Q'_\theta = -\lambda r^2 \dot{\theta}.$$

Αυτές οι γενικευμένες δυνάμεις πρέπει να προστεθούν στο δεξιό μέλος των εξισώσεων Euler-Lagrange (τις οποίες έχουμε βρει σε προηγούμενο παράδειγμα). Έχουμε

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial r} + Q'_r \Rightarrow m\ddot{r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{dV}{dr} - \lambda \dot{r} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial \theta} + Q'_\theta \Rightarrow \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = -\lambda r^2\dot{\theta}.\end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι η 2η εξίσωση μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = -\frac{\lambda}{m}(mr^2\dot{\theta}).$$

Αν θέσουμε

$$J := mr^2\dot{\theta},$$

η εξίσωση κίνησης γράφεται και λύνεται ως εξής

$$\frac{dJ}{dt} = -\frac{\lambda}{m}J \Rightarrow J(t) = J_0 e^{-\frac{\lambda}{m}t}.$$

Η ποσότητα J λέγεται *στροφορμή* του σωματίου. Η σταθερά της ολοκλήρωσης J_0 είναι η στροφορμή τη χρονική στιγμή $t = 0$, δηλ., $J(t = 0) = J_0$. Βλέπουμε ότι η στροφορμή μειώνεται με τον χρόνο λόγω της δύναμης τριβής.

□

2.2.9 Εξισώσεις Hamilton

Στην παράγραφο 2.2.5 είδαμε ότι η ενέργεια του συστήματος είναι μία διατηρήσιμη ποσότητα. Παρατηρούμε ότι, χρησιμοποιώντας τον ορισμό για τις γενικευμένες ορμές στην παράγραφο 2.2.6, η συνάρτηση για την ενέργεια (2.49) γράφεται

$$H = \sum_k \dot{q}_k p_k - L. \quad (2.70)$$

Εφόσον οι γενικευμένες ορμές ορίζονται μέσω της Λαγκρανζιανής θα πρέπει να είναι $p_k = p_k(q_k, \dot{q}_k)$. Αντιστρέφοντας αυτές τις εξισώσεις μπορούμε να εκφράσουμε τις ταχύτητες ως $\dot{q}_k = \dot{q}_k(q_k, p_k)$. Από αυτό το σημείο και πέρα μπορούμε να θεωρούμε την (2.70) ως συνάρτηση των q_k, p_k :

$$H(q_k, p_k) = \sum_k \dot{q}_k(q_k, p_k) p_k - L \quad (2.71)$$

και θα τη λέμε *Χαμιλτονιανή* του συστήματος (Fowles & Cassiday, 2004; Kibble & Bershire, 2004; Goldstein et al., 2001).

Θα αναζητήσουμε μία αρχή ελαχίστου για την Χαμιλτονιανή, παρόμοια με αυτή που είδαμε για τη Λαγκρανζιανή. Για τον σκοπό αυτό παίρνουμε τη μεταβολή της H , η οποία είναι

$$\delta H = \sum_k \left[p_k \delta \dot{q}_k + \dot{q}_k \delta p_k - \frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right].$$

Εισάγωντας τον ορισμό των γενικευμένων ορμών (2.58) βλέπουμε ότι ο πρώτος και τέταρτος όρος στο δεξιό μέλος είναι αντίθετοι. Επίσης εισάγουμε τις εξισώσεις Euler-Lagrange στη μορφή (2.59) στον τρίτο όρο στο δεξιό μέλος και τελικά παίρνουμε

$$\delta H = \sum_k [\dot{q}_k \delta p_k - \dot{p}_k \delta q_k] \quad (2.72)$$

Αυτή είναι στη μορφή που χρειαζόμαστε εφόσον θεωρούμε την H συνάρτηση των q_k, p_k . Ως τέτοια συνάρτηση γνωρίζουμε ότι η μεταβολή της δH πρέπει να έχει τη μορφή

$$\delta H = \sum_k \left[\frac{\partial H}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} \delta p_k \right].$$

Για να προκύπτει αυτή η μορφή θα πρέπει να ισχύουν οι

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad (2.73)$$

Τις εξισώσεις που εξαγάγαμε τις ονομάζουμε *εξισώσεις Hamilton* του συστήματος. Επίσης ονομάζονται και *κανονικές εξισώσεις* της κίνησης, είτε λέμε ότι οι εξισώσεις της κίνησης είναι γραμμένες στην κανονική μορφή.

Παρατήρηση 2.8. Στην περιγραφή του *Hamilton* η βασική συνάρτηση που περιγράφει το σύστημα (Χαμιλτονιανή) είναι συνάρτηση των θέσεων q_k και των κανονικών τους ορμών p_k , όπως αυτές προκύπτουν από την Εξ. (2.58). Οι εξισώσεις της κίνησης είναι αυτές για τις q_k, p_k που δίνονται στις Εξ. (2.73).

Παράδειγμα 2.24. Βρείτε τις εξισώσεις *Hamilton* για τον αρμονικό ταλαντωτή.

Επίλυση. Η Χαμιλτονιανή είναι

$$H = T + V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2.$$

Η ορμή η οποία αντιστοιχεί στη θέση x είναι

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}.$$

Με τη βοήθεια της τελευταίας γράφουμε την Χαμιλτονιανή ως συνάρτηση των x, p :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2.$$

Έχουμε ένα ζευγάρι εξισώσεων *Hamilton* οι οποίες είναι

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx.$$

Μπορούμε από αυτές να εξαγάγουμε μία εξίσωση δεύτερης τάξης για τη θέση x η οποία είναι η γνωστή εξίσωση του αρμονικού ταλαντωτή

$$\ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0.$$

□

2.3 Παράρτημα: Λογισμός μεταβολών

2.3.1 Μεταβολικά προβλήματα

Κάνοντας μία επισκόπηση του απειροστικού λογισμού μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι ένα από τα κεντρικά του προβλήματα είναι η εύρεση ακροτάτων μίας δεδομένης συνάρτησης. Π.χ., μία συνάρτηση μίας μεταβλητής $f(x)$ έχει ελάχιστο στη θέση x_0 αν ισχύει $f(x_0) \leq f(x)$ για κάθε x στο πεδίο ορισμού της τέτοιο ώστε $|x - x_0| < \delta$, για κάποιο $\delta > 0$. Αν η f είναι διαφορίσιμη τότε είναι αναγκαία η συνθήκη

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} = 0. \quad (2.74)$$

Ο λογισμός μεταβολών ασχολείται με γενικεύσεις του παραπάνω προβλήματος. Ασχολείται με ελαχιστοποίηση (ή μεγιστοποίηση) γενικότερων ποσοτήτων που λέγονται συναρτησοειδή (Logan, 2010).

Ορισμός. Ένα συναρτησοειδές (ή συναρτησιακό) αντιστοιχίζει σε κάθε συνάρτηση $y(x)$ έναν αριθμό. Αν θεωρήσουμε ένα σύνολο συναρτήσεων A και μία συνάρτηση $y \in A$, τότε ένα συναρτησοειδές J δίνει τον αριθμό $J(y)$. Είναι δηλαδή $J : A \rightarrow \mathbb{R}$. \square

Παράδειγμα 2.25. Έστω A το σύνολο των συνεχώς διαφορίσιμων συναρτήσεων $y(x)$ οι οποίες ορίζονται σε διάστημα $[a, b]$ και πληρούν τις συνοριακές συνθήκες $y(a) = y_a, y(b) = y_b$. Γράψτε μία έκφραση για το μήκος τόξου επί του A .

Επίλυση. Θα θεωρήσουμε το γράφημα μίας συνάρτησης $y \in A$ και θα γράψουμε μία έκφραση για το μήκος τόξου αυτού του γραφήματος, από το σημείο (a, y_a) στο (b, y_b) . Πρόκειται για το συναρτησοειδές

$$J(y) = \int_a^b \sqrt{1 + y_x(x)^2} dx, \quad (2.75)$$

όπου $y_x := dy/dx$. Σε κάθε $y \in A$ το συναρτησοειδές αντιστοιχίζει έναν πραγματικό αριθμό που είναι το μήκος τόξου της καμπύλης $y = y(x)$ μεταξύ των δύο ακραίων σημείων.

 \square

Παράδειγμα 2.26. Έστω A το σύνολο των μη αρνητικών συνεχών συναρτήσεων που ορίζονται σε διάστημα $[x_1, x_2]$ Μπορούμε να ορίσουμε, επί του A , το συναρτησοειδές

$$J(y) = \int_{x_1}^{x_2} y(x) dx \quad (2.76)$$

το οποίο δίνει το εμβαδόν της επιφάνειας που βρίσκεται μεταξύ του άξονα x και της καμπύλης $y = y(x)$. \square

Ένα θεμελιώδες πρόβλημα του λογισμού μεταβολών είναι η ελαχιστοποίηση ενός συναρτησοειδούς. Δηλαδή, η αναζήτηση συνάρτησης για την οποία το συναρτησοειδές έχει ελάχιστο. Στο παράδειγμα με το μήκος τόξου, αναζητούμε την καμπύλη $y = y(x)$ για την οποία το μήκος τόξου είναι ελάχιστο. Είναι γνωστό ότι αυτό επιτυγχάνεται από μία συνάρτηση που δίνει ευθεία γραμμή (μεταξύ των ακραίων σημείων). Στο παράδειγμα με το εμβαδόν παρατηρούμε ότι το ολοκλήρωμα (2.76) είναι θετικά ορισμένο (αφού $y(x) \geq 0$), ώστε εύκολα συμπεραίνουμε ότι η $y(x) = 0$, για την οποία το εμβαδόν μηδενίζεται, ελαχιστοποιεί το συναρτησοειδές (δηλ., το εμβαδόν).

Στον κλασικό λογισμό μεταβολών τα συναρτησοειδή που έχουν ενδιαφέρον είναι της μορφής

$$J(y) = \int_a^b L(x, y(x), y_x(x)) dx. \quad (2.77)$$

Εδώ η $L = L(x, y(x), y_x(x))$ είναι μία έκφραση που περιέχει τη συνάρτηση $y(x)$ αλλά και την παράγωγο της $y_x(x)$, καθώς επίσης και την ανεξάρτητη μεταβλητή x . Σε προηγούμενο παράδειγμα είχαμε $L = \sqrt{1 + y'(x)^2}$.

Η συνάρτηση L ονομάζεται Λαγκρανζιανή (από το όνομα του Lagrange) και εμφανίζεται σε προβλήματα μηχανικής. Εκεί η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι ο χρόνος και έτσι γράφουμε συνήθως τη μορφή

$$J(y) = \int_a^b L(t, y, \dot{y}) dt, \quad (2.78)$$

όπου εννοείται $y = y(t)$.

2.3.2 Συνθήκη για ακρότατα

Ας δούμε αναλυτικά το θεμελιώδες πρόβλημα του λογισμού μεταβολών, δηλαδή την ελαχιστοποίηση ενός συναρτησοειδούς. Θα ήταν ενδιαφέρον αν μπορούσαμε να είχαμε μία συνθήκη ελαχίστου όπως συμβαίνει στον συνήθη απειροστικό λογισμό, όπου αναγκαία συνθήκη είναι ο μηδενισμός της παραγώγου. Είναι όμως προφανές ότι για να πετύχουμε κάτι τέτοιο θα πρέπει πρώτα να ορίσουμε κάτι ανάλογο της παραγώγου για συναρτησοειδή (Logan, 2010; Thornton & Marion, n.d.).

Ας υποθέσουμε μία συνάρτηση $y = y(x)$ (μίας μεταβλητής x) και ενδιαφερόμαστε για το ολοκλήρωμα

$$J(y) = \int_{x_1}^{x_2} L(x, y, y_x) dx, \quad (2.79)$$

όπου $y_x := dy/dx$ και έστω οι συναρτήσεις $y(x)$ οι οποίες είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμες, $y \in C^2[x_1, x_2]$. Θα ονομάσουμε στα επόμενα το σύνολο αυτών των συναρτήσεων A .

Ας θεωρήσουμε ότι υπάρχει μία συνάρτηση $y_0(x) \in A$ για την οποία το συναρτησιακό J έχει ελάχιστο, δηλαδή $J(y_0) \leq J(y)$ για κάθε y στη γειτονιά του y_0 . Υποθέτουμε τώρα μία συνάρτηση $\eta(x)$ με συνεχή δεύτερη παράγωγο και με $\eta(x_1) = 0 = \eta(x_2)$. Εισάγουμε την παράμετρο ϵ και γράφουμε συναρτήσεις στη γειτονιά της συνάρτησης $y_0(x) \in A$ ως

$$y(x, \epsilon) = y_0(x) + \epsilon \eta(x). \quad (2.80)$$

Σημειώστε ότι έχουμε $y_0(x) = y(x, \epsilon = 0)$ και επίσης με τη συνθήκη μηδενισμού της $\eta(x)$ στα άκρα του διαστήματος βλέπουμε ότι $y(x, \epsilon) \in A$. Η συνάρτηση $y(x)$ μπορεί να μεταβάλλεται ως προς την αρχική συνάρτηση $y_0(x)$. Η μεταβολή μίας συνάρτησης y συμβολίζεται γενικά με δy και στην περίπτωση της συνάρτησης η οποία ορίζεται στην Εξ. (2.80) ως μεταβολή της συνάρτησης νοείται η $\delta y = \eta(x)$. Η συνολική μεταβολή της συνάρτησης είναι ανάλογη του ϵ , είναι δηλαδή $\epsilon \delta y$. Η μεταβολή του συναρτησοειδούς που οφείλεται στη μεταβολή $\epsilon \delta y$ ορίζεται ως

$$\Delta J = J(y_0 + \epsilon \eta) - J(y_0). \quad (2.81)$$

Ορίσαμε λοιπόν στα παραπάνω κάποιες έννοιες και ποσότητες σε αναλογία με συνήθεις συναρτήσεις. Πηγαίνοντας ένα βήμα παραπέρα βλέπουμε ότι το συναρτησιακό J , με τον δεδομένο ορισμό του $y(x, \epsilon)$, γίνεται μία συνάρτηση του ϵ . Αυτή θα τη συμβολίσουμε με το νέο σύμβολο \mathcal{J} και γράφουμε

$$\mathcal{J}(\epsilon) = \int_{x_1}^{x_2} L(x, y(x, \epsilon), y_x(x, \epsilon)) dx. \quad (2.82)$$

Έχουμε

$$\mathcal{J}(0) = J(y_0), \quad \mathcal{J}(\epsilon) = J(y_0 + \epsilon \eta). \quad (2.83)$$

Εφόσον θεωρήσουμε ότι το $J(y)$ έχει ελάχιστο για $y = y_0$, τότε, για κάθε αποδεκτή επιλογή για το $\eta(x)$, βλέπουμε ότι η $\mathcal{J}(\epsilon)$ πρέπει να έχει ελάχιστο στη θέση $\epsilon = 0$. Άρα η συνθήκη

$$\mathcal{J}'(\epsilon = 0) = 0 \quad (2.84)$$

είναι αναγκαία για την ύπαρξη ελαχίστου της $J(y)$.

Ο συμβολισμός δ για τη μεταβολή

Ας δούμε τη συνθήκη (2.84) στα πλαίσια του συμβολισμού του λογισμού μεταβολών. Από τον λογισμό πραγματικών συναρτήσεων μπορούμε να γράψουμε το ανάπτυγμα Taylor

$$\mathcal{J}(\epsilon) = \mathcal{J}(0) + \epsilon \mathcal{J}'(0) + \dots \quad (2.85)$$

Εισάγοντας πάλι το σύμβολο J μπορούμε να βρούμε τη μεταβολή του συναρτησοειδούς:

$$J(y_0 + \epsilon\eta) = J(y_0) + \epsilon \mathcal{J}'(0) + \dots \Rightarrow \Delta J = \epsilon \mathcal{J}'(0) + \dots \quad (2.86)$$

Με βάση την τελευταία σχέση ορίζουμε ως *πρώτη μεταβολή του J κατά τη διεύθυνση $\eta(x)$* την ποσότητα

$$\delta J(y_0, \eta) := \mathcal{J}'(\epsilon = 0) = \frac{d}{d\epsilon} J(y_0 + \epsilon\eta) \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.87)$$

Είναι βέβαια σαφές ότι η μεταβολή δJ εξαρτάται από την επιλογή της $\eta(x)$.

Παρατηρούμε ότι

$$\delta J(y_0, \eta) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J(y_0 + \epsilon\eta) - J(y_0)}{\epsilon}, \quad (2.88)$$

δηλαδή ο ορισμός για τη μεταβολή του J είναι αντίστοιχος του ορισμού *παραγώγου κατά κατεύθυνση* για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών. Η κατεύθυνση στην παρούσα περίπτωση είναι η συνάρτηση $\eta(x)$ και υπάρχουν, κατ' αρχήν, άπειρες επιλογές για αυτή τη συνάρτηση.

Η συνθήκη (2.84) γράφεται επίσης και $\delta J(y_0, \eta) = 0$. Έχουμε δηλαδή καταλήξει στο συμπέρασμα ότι αν $y_0 \in A$ είναι σημείο όπου το J έχει τοπικό ελάχιστο τότε η μεταβολή του J μηδενίζεται

$$\delta J(y_0, \eta) = 0 \quad (2.89)$$

για όλες τις αποδεκτές συναρτήσεις $\eta(x)$.

2.3.3 Εξισώσεις Euler-Lagrange

Για να δούμε αναλυτικότερα τη συνθήκη για το ελάχιστο θα χρειαστεί να υπολογίσουμε τη μεταβολή του J , δηλαδή την έκφραση

$$\frac{d}{d\epsilon} J(y + \epsilon\eta) = \frac{d}{d\epsilon} \int_{x_1}^{x_2} L(x, y + \epsilon\eta, y_x + \epsilon\eta_x) dx. \quad (2.90)$$

Θα θεωρήσουμε συναρτήσεις $L(x, y, y_x)$ οι οποίες είναι δύο φορές διαφορίσιμες ως προς όλες τις μεταβλητές. Με τον κανόνα της αλυσιδωτής παραγώγισης έχουμε

$$\frac{dJ}{d\epsilon} = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial L}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \epsilon} + \frac{\partial L}{\partial y_x} \frac{\partial y_x}{\partial \epsilon} \right) dx. \quad (2.91)$$

Ο δεύτερος όρος στο δεξιό μέλος, με κατά παράγοντες ολοκλήρωση, γίνεται

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial L}{\partial y_x} \frac{\partial y_x}{\partial \epsilon} dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial L}{\partial y_x} \frac{\partial^2 y}{\partial x \partial \epsilon} dx = \frac{\partial L}{\partial y_x} \frac{\partial y}{\partial \epsilon} \Big|_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y_x} \right) \frac{\partial y}{\partial \epsilon} dx. \quad (2.92)$$

Έχουμε $\partial y / \partial \epsilon = \eta(x)$ και άρα

$$\frac{dJ}{d\epsilon} = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y_x} \right) \right] \eta(x) dx + \frac{\partial L}{\partial y_x} \eta(x) \Big|_{x_1}^{x_2}. \quad (2.93)$$

Εφόσον έχουμε υποθέσει $\eta(x) = 0$ στα άκρα του διαστήματος $x = x_1, x = x_2$, οι συνοριακοί όροι μηδενίζονται. Άρα έχουμε

$$\frac{dJ}{d\epsilon} = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y_x} \right) \right] \eta(x) dx. \quad (2.94)$$

Η συνθήκη (2.84) για να έχουμε ακρότατο σημαίνει τον μηδενισμό της έκφρασης στο δεξιό μέλος της (2.94) για κάθε αποδεκτή συνάρτηση $\eta(x)$.

Στο σημείο αυτό χρειαζόμαστε το ακόλουθο:

Λήμμα. (Θεμελιώδες Λήμμα του Λογισμού Μεταβολών.) Αν $\phi(x)$ είναι συνεχής συνάρτηση και

$$\int_{x_1}^{x_2} \phi(x)\eta(x) dx = 0 \quad (2.95)$$

ισχύει για κάθε συνάρτηση $\eta(x)$ η οποία είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη και μηδενίζεται στα όρια, τότε έχουμε $\phi(x) = 0$.

Σύντομη απόδειξη. Έστω $\phi(x) \neq 0$, π.χ., $\phi(x = \xi) > 0$. Τότε υπάρχει γειτονιά G του x ($\xi_0 < x < \xi_1$) όπου $\phi(x) > 0$. Τώρα εκλέγουμε $\eta(x) = (x - \xi_0)^4(x - \xi_1)^4$ στο G και $\eta(x) = 0$ εκτός του G . Στην περίπτωση αυτή θα έχουμε $\int_{x_1}^{x_2} \phi\eta dx > 0$, το οποίο όμως αντιβαίνει στην υπόθεση. \square

Χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό που έχουμε εισαγάγει ως γράψουμε την (2.94) ως

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y_x} \right) \right] \delta y dx. \quad (2.96)$$

Η συνθήκη $\delta J = 0$ με τη βοήθεια του προηγούμενου λήμματος (2.95) δίνει την ακόλουθη αναγκαία συνθήκη για να έχει ακρότατο το J :

$$\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y_x} \right) = 0. \quad (2.97)$$

Η διαφορική αυτή εξίσωση λέγεται εξίσωση Euler-Lagrange. Οι λύσεις $y(x)$ εξασφαλίζουν ότι $\delta J(y, \eta) = 0$ για κάθε $\eta(x)$ και λέμε ότι το $y(x)$ είναι στάσιμο σημείο του $J(y)$.

Παράδειγμα 2.27. Βρείτε την καμπύλη $y = y(x)$ η οποία συνδέει δύο σημεία $(x_1, y(x_1))$ και $(x_2, y(x_2))$ και έχει το ελάχιστο μήκος.

Επίλυση. Έχουμε δει σε προηγούμενο παράδειγμα ότι το μήκος της καμπύλης δίνεται από το συναρτησιακό

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + y_x^2} dx.$$

Για να βρούμε ακρότατα για το J πρέπει να βρούμε τις $y(x)$ για τις οποίες $\delta J = 0$, δηλαδή αρκεί να λύσουμε την εξίσωση Euler-Lagrange (2.97). Έχουμε

$$f = \sqrt{1 + y_x^2} \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial y_x} = \frac{y_x}{\sqrt{1 + y_x^2}}, \quad (2.98)$$

ώστε η εξίσωση (2.97) γράφεται

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{y_x}{\sqrt{1 + y_x^2}} \right) = 0 \Rightarrow \frac{y_x}{\sqrt{1 + y_x^2}} = c \Rightarrow y_x = a \Rightarrow y = ax + b, \quad (2.99)$$

όπου a, b, c είναι σταθερές (και μάλιστα $c = a/\sqrt{1 + a^2}$). Άρα η ζητούμενη καμπύλη είναι μία ευθεία. Τα a, b πρέπει να προσδιορισθούν έτσι ώστε η ευθεία να περνάει από τα δεδομένα σημεία.

\square

2.4 Μελέτη

2.4.1 Ασκήσεις

Άσκηση 2.1. Ταχύτητα και επιτάχυνση σε κυλινδρικές συντεταγμένες

Βρείτε τις συντεταγμένες της ταχύτητας σωματίου (v_ρ, v_ϕ, v_z) και της επιτάχυνσής του (a_ρ, a_ϕ, a_z) σε κυλινδρικές συντεταγμένες (ρ, ϕ, z) , όπου $\mathbf{v} = v_\rho \hat{e}_\rho + v_\phi \hat{e}_\phi + v_z \hat{e}_z$ και $\mathbf{a} = a_\rho \hat{e}_\rho + a_\phi \hat{e}_\phi + a_z \hat{e}_z$. Γράψτε τη Λαγκρανζιανή και τις εξισώσεις Euler-Lagrange για ένα γενικό δυναμικό $V = V(\rho, \phi, z)$.

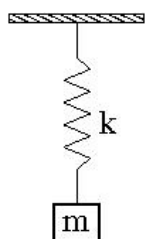
Άσκηση 2.2. Ενέργεια και εξίσωση κίνησης

Από την εξίσωση διατήρησης της ενέργειας (2.15) να παραχθεί μία διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης.

Άσκηση 2.3. Κίνηση σε παραβολικό δυναμικό σε μία διάσταση Έστω ένα σώμα το οποίο βρίσκεται σε δυναμικό $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Δίνεται ότι η θέση του σωματίου κατά τη χρονική στιγμή $t = 0$ είναι $x(t=0) = 0$ και η ταχύτητά του είναι $v(t=0) = 1$. Βρείτε τη θέση του σαν συνάρτηση του χρόνου.

Άσκηση 2.4. Μάζα εξαρτώμενη από ελατήριο

Έστω ότι ένα σωματίο μάζας m εξαρτάται από ελατήριο σταθεράς k και φυσικού μήκους ℓ και είναι ελεύθερο να κινείται κατακόρυφα. Η δύναμη που ασκείται στο σώμα είναι η δύναμη του ελατηρίου συν την βαρυτική δύναμη.



- (α) Γράψτε τη δύναμη που ασκείται στο σώμα.
- (β) Ποιά είναι η δυναμική ενέργεια που δίνει αυτή τη δύναμη;
- (γ) Βρείτε την εξίσωση κίνησης και δώστε τη λύση της.

[Υπόδειξη: βρείτε τη θέση ισορροπίας του συστήματος. Ορίστε την μεταβλητή που δίνει την απόκλιση από τη θέση ισορροπίας και γράψτε την εξίσωση κίνησης με βάση την νέα αυτή μεταβλητή.]

Άσκηση 2.5. Σώμα εξαρτώμενο από ελαστική ράβδο

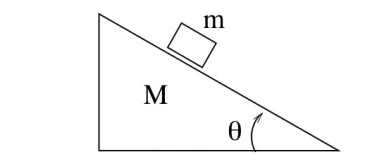
Έστω ένα σωματίο μάζας m το οποίο εξαρτάται από ελαστική ράβδο. Η ράβδος έχει φυσικό μήκος ℓ αλλά το μήκος της μπορεί να μεταβάλλεται όπως ένα ελατήριο σταθεράς k . (α) Βρείτε γενικευμένες συντεταγμένες οι οποίες περιγράφουν το σύστημα. (β) Γράψτε τη δυναμική ενέργεια. (γ) Γράψτε τις εξισώσεις κίνησης.

Άσκηση 2.6. Σημεία ισορροπίας εκκρεμούς

Βρείτε όλα τα σημεία ισορροπίας του απλού εκκρεμούς. Κάνετε για όλα τα σημεία την αρμονική προσέγγιση.

Άσκηση 2.7. Σώμα σε κεκλιμένο επίπεδο

Σωματίο μάζας m είναι ελεύθερο να ολισθαίνει επάνω σε κεκλιμένο επίπεδο. Το κεκλιμένο επίπεδο έχει μάζα M και είναι ελεύθερο να ολισθαίνει επάνω σε επίπεδη οριζόντια βάση. (α) Γράψτε κατάλληλες γενικευμένες συντεταγμένες για το σύστημα, (β) γράψτε την Λαγκρανζιανή του συστήματος, (γ) γράψτε και λύστε τις εξισώσεις κίνησης.



Άσκηση 2.8. Δυναμικό με εκθετικό

Σώμα μάζας m κινείται στον άξονα x σε δυναμική ενέργεια

$$V(x) = -Ax e^{-\alpha x},$$

όπου A, α είναι θετικές σταθερές. Βρείτε τη θέση ισορροπίας της μάζας. Επίσης, κάνετε την αρμονική προσέγγιση για κινήσεις κοντά στη θέση ισορροπίας και βρείτε την περίοδο αρμονικών ταλαντώσεων γύρω από αυτήν.

Άσκηση 2.9. Κίνηση σε κύκλο

Έστω σώμα μάζας m το οποίο κινείται σε κύκλο ακτίνας a . (α) Θεωρήστε ότι στο σώμα δεν ασκούνται δυνάμεις και (i) γράψτε τη Λαγκρανζιανή, (ii) γράψτε την εξίσωση κίνησης και (iii) βρείτε μία διατηρήσιμη ποσότητα της κίνησης. (β) Θεωρήστε τώρα ότι το ίδιο σώμα δέχεται δύναμη τριβής ανάλογη της ταχύτητάς του $\mathbf{f} = -\lambda \mathbf{v}$. Γράψτε την εξίσωση κίνησής του.

Άσκηση 2.10. Κεντρικό δυναμικό

Ένα σώμα μάζας m βρίσκεται σε βαρυτικό δυναμικό $V = V(r)$ όπου r, θ είναι πολικές συντεταγμένες.

(α) Γράψτε τη Λαγκρανζιανή και τις εξισώσεις κίνησης του συστήματος σε πολικές συντεταγμένες.

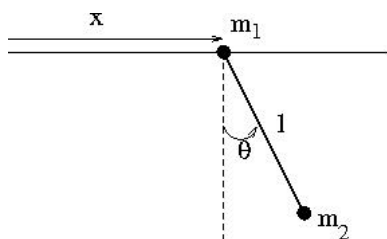
(β) Βρείτε τη στροφορμή (η οποία είναι διατηρήσιμη ποσότητα).

(γ) Θεωρήστε τώρα ότι στο σώμα ασκείται μία επιπλέον δύναμη τριβής $\mathbf{f} = -\lambda \mathbf{v}$ όπου λ είναι μία σταθερά και \mathbf{v} είναι η ταχύτητά του. Γράψτε τις εξισώσεις κίνησης του συστήματος. [Υπόδειξη: η γενικευμένη δύναμη τριβής που αντιστοιχεί στην συντεταγμένη r είναι $(\mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{e}}_r)$ και η γενικευμένη δύναμη για την θ είναι $(r\mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\theta)$.]

(δ) Εάν δίνεται η αρχική στροφορμή του συστήματος (έστω J_0 για χρόνο $t = 0$), βρείτε τη στροφορμή για τους χρόνους $t \geq 0$.

Άσκηση 2.11. Εκκρεμές με ολισθαίνον σημείο εξάρτησης

Έστω ένα σωματίο μάζας m_2 το οποίο εξαρτάται από αβαρή ράβδο μήκους ℓ και η οποία μπορεί να ταλαντώνεται στο επίπεδο (x, y) , όπου x είναι η οριζόντια διεύθυνση και y είναι η κάθετη διεύθυνση. Στο σημείο εξάρτησης της ράβδου υπάρχει μάζα m_1 η οποία μπορεί να ολισθαίνει επάνω σε οριζόντιο νήμα κατά τη διεύθυνση x . Γράψτε τις εξισώσεις κίνησης της μάζας.

**Άσκηση 2.12.** Αρχή του Fermat

Στη γεωμετρική οπτική η αρχή του Fermat ορίζει ότι ο χρόνος που χρειάζεται μία ακτίνα φωτός για να ταξιδέψει μεταξύ δύο σημείων είναι ελάχιστος μεταξύ όλων των διαδρομών που συνδέουν τα δύο σημεία. Περιοριστείτε στο επίπεδο και θεωρήστε μέσο με δείκτη διάθλασης $n(x, y)$ (δηλαδή, η ταχύτητα στο μέσο είναι $c(x, y) = 1/n(x, y)$). Βρείτε την καμπύλη $y = y(x)$ την οποία ακολουθεί μία ακτίνα φωτός.

Άσκηση 2.13. Πρόβλημα βραχυστοχρόνου

Θεωρούμε ένα σωματίο μάζας m το οποίο κινείται σε πεδίο σταθερής δύναμης F (έστω με κατεύθυνση προς τον αρνητικό άξονα x). Το σωματίο είναι αρχικά σε ηρεμία στη θέση (x_1, y_1) και κινείται έως το σημείο (x_2, y_2) . Βρείτε την τροχιά για την οποία η κίνηση θα γίνει στον ελάχιστο χρόνο.

2.4.2 Εργασίες

Εργασία 2.1. Απλό εκκρεμές

Σχεδιάστε το δυναμικό (2.23). (α) Τι είδους κίνηση κάνει ένα σωματίο με ενέργεια $-mg\ell < \mathcal{E} < mg\ell$; Είναι η περίοδος της κίνησης μεγαλύτερη ή μικρότερη από $2\pi\sqrt{\ell/g}$, η οποία βρέθηκε για την αρμονική προσέγγιση; (β) Τι κίνηση κάνει ένα σωματίο με ενέργεια $|\mathcal{E}| > mg\ell$; (γ) Τι κίνηση κάνει ένα σωματίο με ενέργεια $\mathcal{E} = mg\ell$; [Υπόδειξη: Δώστε κατ' αρχήν ποιοτικές απαντήσεις στα ερωτήματα. Η πλήρης ποσοτική μελέτη του προβλήματος είναι σχετικά εκτενής.]

Εργασία 2.2. Δυναμικό Lennard-Jones

Θεωρούμε το δυναμικό Lennard-Jones το οποίο περιγράφει χημικούς δεσμούς μεταξύ δύο ατόμων:

$$V(r) = D \left(\frac{R}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R}{r} \right)^6,$$

όπου r είναι η απόσταση μεταξύ των ατόμων τα οποία συμμετέχουν στο χημικό δεσμό και D, R είναι θετικές σταθερές. (α) Μελετήστε το δυναμικό και σχεδιάστε το με υπολογιστή. Περιγράψτε τον ρόλο των σταθερών. (β) Περιγράψτε τις πιθανές κινήσεις του συστήματος. (γ) Βρείτε την περίοδο της ταλάντωσης για μικρές αποκλίσεις από το ελάχιστο του δυναμικού. (δ) Για την περίπτωση περιοδικής κίνησης, βρείτε την περίοδο ταλάντωσης ως συνάρτηση της ενέργειας. Συγκρίνετε με το αποτέλεσμα που δίνει η παραβολική προσέγγιση γύρω από τη θέση ισορροπίας.

Εργασία 2.3. Πρόβλημα Kepler

Θεωρήστε το κεντρικό δυναμικό $V(r) = -k/r^2$. (α) Γράψτε τις εξισώσεις κίνησης. (β) Λύστε αναλυτικά τις εξισώσεις κίνησης. (γ) Προσδιορίσθε την κίνηση.

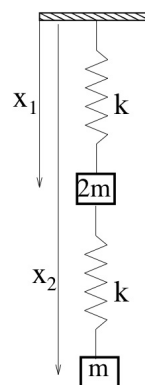
Βιβλιογραφία: (Fowles & Cassiday, 2004).

Εργασία 2.4. Ταλαντώσεις δύο μαζών

Σώμα μάζας $2m$ κρέμεται από κατακόρυφο ελατήριο σταθεράς k και μήκους ισορροπίας ℓ . Από αυτήν τη μάζα κρέμεται δεύτερο ελατήριο της ίδιας σταθεράς (και ίδιου μήκους ισορροπίας) από το οποίο εξαρτάται μια δεύτερη μάζα m . Θεωρήστε μόνο κατακόρυφη κίνηση των μαζών.

(α) Βρείτε τις συχνότητες των κανονικών τρόπων ταλάντωσης του συστήματος.

(β) Η επάνω μάζα $2m$ μετακινείται προς τα κάτω κατά απόσταση d από τη θέση ισορροπίας της, ενώ η δεύτερη μάζα παραμένει στην αρχική θέση ισορροπίας της. Ακολουθώντας το σύστημα αφήνεται να ταλαντωθεί. Βρείτε την κίνηση των δύο μαζών, δηλαδή τη θέση τους σαν συνάρτηση του χρόνου.



Βιβλιογραφία

- Fowles, G. R., & Cassiday, G. L. (2004). *Analytical mechanics*. Cengage Learning.
 Goldstein, H., Poole Jr, C. P., & Safko, J. L. (2001). *Classical mechanics* (3rd ed.). Pearson.
 Kibble, T. W. B., & Berkshire, F. H. (2004). *Classical mechanics*. London: Imperial College Press.
 Logan, J. D. (2010). *Εφαρμοσμένα Μαθηματικά*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
 Thornton, S. T., & Marion, J. B. (n.d.). *Classical dynamics of particles and systems*. Cengage Learning India.

Κεφάλαιο 3

Δυναμικά συστήματα

Περίληψη

Το παρόν κεφάλαιο έχει σκοπό την εισαγωγή στη θεωρία των δυναμικών συστημάτων και θα αποτελέσει τη βάση για την ανάλυση μοντέλων, όπως αυτά σε βιολογικά συστήματα. Τα δυναμικά συστήματα έχουν εξελιχθεί σε έναν σημαντικό και εκτεταμένο κλάδο των μαθηματικών. Το κεφάλαιο αυτό αναφέρεται στις βασικές έννοιες καθώς και σε τεχνικές οι οποίες θα φανούν χρήσιμες στην ανάλυση μοντέλων, περισσότερο από ποιοτική άποψη. Εισάγεται η έννοια του δυναμικού συστήματος η οποία σχετίζεται με τα συστήματα συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Μελετάται διεξοδικά η περίπτωση δύο γραμμικών συνήθων διαφορικών εξισώσεων με κεντρική την έννοια του χώρου φάσεων. Επίσης περιγράφονται τα σημεία ισορροπίας και η ευστάθειά τους (σε έναν βαθμό) και αναδεικνύεται η χρησιμότητά τους στην κατανόηση ιδιοτήτων μοντέλων. Ένα κεφάλαιο αφιερώνεται στην περίπτωση εξισώσεων δεύτερης τάξης. Τέλος δίνονται τα βασικά σημεία εργαλεία για τη μελέτη μη-γραμμικών διαφορικών εξισώσεων, ενώ παραδείγματα τέτοιων θα μελετηθούν σε επόμενα κεφάλαια.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Γραμμική άλγεβρα: ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα πινάκων, γεωμετρική ερμηνεία τους.
- Διαφορικές εξισώσεις πρώτης και δεύτερης τάξεως. Λύσεις γραμμικών διαφορικών εξισώσεων.
- Στοιχεία διαφορικής γεωμετρίας.
- Μιγαδικοί αριθμοί.

3.1 Συστήματα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης

Παρακάτω θα δούμε μια βασική εισαγωγή σε συστήματα διαφορικών εξισώσεων και στα δυναμικά συστήματα (Hirsh, Smale, & Devaney, 2004; Jordan & Smith, 1987; Perko, 2001; Hale, 1994; Strogatz, 2000; Αλικάκος & Καλογερόπουλος, 2003)

3.1.1 Χώρος φάσεων

Στη μελέτη μεταβολής του πληθυσμού για κάποιο βιολογικό είδος θεωρούμε, στην απλούστερη περίπτωση, ότι η αύξησή του είναι ανάλογη του ήδη υπάρχοντος πληθυσμού. Αν θέσουμε $x = x(t)$ τον πληθυσμό, τότε η διαφορική εξίσωση που προκύπτει είναι

$$\dot{x} = ax, \quad (3.1)$$

όπου a είναι μία σταθερά η οποία εξαρτάται από τον ρυθμό των γεννήσεων αλλά και των θανάτων, όπως θα δούμε στο κεφάλαιο 5. Η Εξ. (3.1) είναι μία γραμμική διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης και έχει τη λύση $x(t) = x_0 e^{at}$, όπου x_0 είναι μία σταθερά. Ισχύει $x(t=0) = x_0$, άρα η x_0 δίνει τον πληθυσμό του είδους στον αρχικό χρόνο της μελέτης.

Θα προχωρήσουμε στη μελέτη διαφορικών εξισώσεων για δύο μεταβλητές x, y , οι οποίες θα μπορούσαν να παριστάνουν τους πληθυσμούς δύο διαφορετικών ειδών στη Βιολογία, είτε τη συγκέντρωση δύο διαφορετικών χημικών στοιχείων, είτε οικονομικά μεγέθη κλπ. Για κάθε μεταβλητή θα έχουμε μία διαφορική εξίσωση η οποία περιγράφει τη μεταβολή της στον χρόνο, δηλαδή, τη δυναμική της. Ένα απλό σύστημα εξισώσεων είναι το ακόλουθο

$$\frac{dx}{dt} = by, \quad \frac{dy}{dt} = -ax, \quad a, b > 0. \quad (3.2)$$

Πρόκειται για ένα γραμμικό σύστημα και άρα μπορούμε να πούμε ότι είναι μία γενίκευση του (3.1). Η λύσεις του συστήματος θα είναι στη μορφή $x = x(t)$, $y = y(t)$ και δίνουν, π.χ., τους πληθυσμούς δύο ειδών σαν συνάρτηση του χρόνου. Παρατηρούμε ότι το σύστημα των εξισώσεων (3.2) έχει μία ιδιαίτερα απλή λύση την οποία βρίσκουμε αν ζητήσουμε $\dot{x} = 0$, $\dot{y} = 0$. Για μία τέτοια λύση τα δεξιά μέλη των δύο εξισώσεων πρέπει να μηδενίζονται, άρα η λύση είναι η

$$x(t) = 0, \quad y(t) = 0. \quad (3.3)$$

Πρόκειται για μία σταθερή λύση και γι' αυτό το $(x, y) = (0, 0)$ το ονομάζουμε σημείο ισορροπίας του συστήματος. Το όνομα εκφράζει την ιδιότητα ότι ένα σύστημα με αρχική συνθήκη στο σημείο ισορροπίας παραμένει σε αυτό το σημείο για κάθε χρόνο.

Αν δεν βρισκόμαστε στην κατάσταση εκείνη η οποία είναι σημείο ισορροπίας του συστήματος τότε βέβαια οι πληθυσμοί θα εξελίσσονται στον χρόνο και για κάθε χρονική στιγμή t θα έχουμε μία κατάσταση του συστήματος η οποία περιγράφεται από τις τιμές των μεταβλητών $(x(t), y(t))$. Κάθε τέτοια κατάσταση παριστάνεται στο επίπεδο xy από ένα σημείο (Hirsh et al., 2004; Jordan & Smith, 1987).

Παρατήρηση 3.1. Ονομάζουμε το επίπεδο xy , στο οποίο μπορούν να παρασταθούν όλες οι δυνατές καταστάσεις του συστήματος, χώρο των φάσεων.

Για την περίπτωση πληθυσμιακών μοντέλων, ένα σημείο στο χώρο φάσεων περιγράφει έναν συγκεκριμένο συνδυασμό πληθυσμών. Η περιγραφή του συστήματος με σημεία στον χώρο φάσεων είναι χρήσιμη όταν ενδιαφερόμαστε για τη σχέση της μίας μεταβλητής με την άλλη αφήνοντας σε δεύτερη μοίρα την ακριβή εξέλιξη της καθεμίας με τον χρόνο. Είναι απλό να φανταστούμε ότι με την εξέλιξη του χρόνου t το αντίστοιχο σημείο $(x(t), y(t))$ διαγράφει μία καμπύλη στο χώρο των φάσεων. Μάλιστα, το διάνυσμα $(x(t), y(t))$ δίνει την παραμετρική αναπαράσταση αυτής της καμπύλης.

Γενικότερα, οι λύσεις του συστήματος των εξισώσεων περιγράφονται από οικογένειες καμπυλών στον χώρο των φάσεων. Μπορούμε να εξαγάγουμε μία εξίσωση για τις καμπύλες. Ας θεωρήσουμε τα σημεία στα οποία η παράγωγος $dx/dt(t) \neq 0$, τότε μπορούμε να αντιστρέψουμε τη συνάρτηση και να πάρουμε $t = t(x)$ σε περιοχή γύρω από αυτά τα σημεία. Ωστε θα έχουμε τις καμπύλες $y = y(t(x))$. Ο κανόνας της αλυσίδας μας δίνει

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dt} \frac{dt}{dx} \frac{dx}{dt}. \quad (3.4)$$

Κάτι ανάλογο μπορούμε να κάνουμε και στα σημεία στα οποία $\dot{y}(t) \neq 0$.

Παράδειγμα 3.1. Θεωρούμε το σύστημα

$$\frac{dx}{dt} = y, \quad \frac{dy}{dt} = -ax, \quad a > 0.$$

Οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων βρίσκονται από την εξίσωση

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{ax}{y},$$

η οποία λύνεται με χωρισμό μεταβλητών:

$$\int y \, dy = - \int ax \, dx \Rightarrow ax^2 + y^2 = C. \quad (3.5)$$

Το C μπορεί να πάρει, κατ' αρχήν, οποιαδήποτε τιμή. Για $C = 0$ η Εξ. (3.5) ικανοποιείται μόνο για το σημείο ισορροπίας $(0, 0)$. Για κάθε τιμή $C > 0$ παίρνουμε ελλείψεις που περικλείουν το σημείο ισορροπίας. Άρα, λέμε ότι οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων είναι ελλείψεις. Τέλος, για $C < 0$ η Εξ. (3.5) δεν ικανοποιείται για κανένα σημείο (x, y) , ώστε δεν παίρνουμε καμπύλες στον χώρο φάσεων για αυτές τις τιμές του C . \square

Παράδειγμα 3.2. Θεωρούμε το σύστημα

$$\frac{dx}{dt} = y, \quad \frac{dy}{dt} = ax, \quad a > 0.$$

Οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων βρίσκονται από την

$$\frac{dy}{dx} = \frac{ax}{y} \Rightarrow \int y \, dy = \int ax \, dx \Rightarrow ax^2 - y^2 = C.$$

Για κάθε τιμή $C > 0$ παίρνουμε υπερβολές οι οποίες τέμνουν τον άξονα x . Για κάθε τιμή $C < 0$ παίρνουμε υπερβολές οι οποίες τέμνουν τον άξονα y . Τέλος για $C = 0$ η Εξ. (3.5) δίνει $y = \pm \sqrt{a} x$, δηλαδή δύο ευθείες οι οποίες τέμνονται στο σημείο ισορροπίας $(0, 0)$. \square

Συστήματα δύο διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης

Τα συστήματα τα οποία έχουμε μελετήσει στα παραπάνω παραδείγματα είναι συστήματα δύο διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης. Η γενική μορφή συστήματος δύο συνήθων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης είναι (Hale, 1994; Αλικάκος & Καλογερόπουλος, 2003)

$$\begin{aligned} \dot{x} &= X(x, y) \\ \dot{y} &= Y(x, y). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Παρατήρηση 3.2. Ονομάζουμε λύσεις του συστήματος (3.6) τα ζεύγη συναρτήσεων

$$x = x(t), \quad y = y(t). \quad (3.7)$$

Παρατήρηση 3.3. (Σημεία ισορροπίας) Τα σημεία ισορροπίας του συστήματος είναι εκείνα για τα οποία ισχύουν οι

$$X(x, y) = 0, \quad Y(x, y) = 0. \quad (3.8)$$

Για τις λύσεις $(x, y) = (x^*, y^*)$ των αλγεβρικών εξισώσεων (3.8) έχουμε από το σύστημα (3.6) ότι $\dot{x} = 0, \dot{y} = 0$, δηλαδή οι $x(t) = x^*, y(t) = y^*$ είναι λύσεις του συστήματος οι οποίες είναι σταθερές στον χρόνο (Hirsh et al., 2004; Jordan & Smith, 1987).

Παρατήρηση 3.4. (Διάγραμμα φάσεων) Οι λύσεις $x(t), y(t)$ του συστήματος (3.6) παριστάνονται με καμπύλες στον χώρο των μεταβλητών (x, y) , δηλαδή στο επίπεδο xy . Ο χώρος αυτός λέγεται χώρος φάσεων. Η εξίσωση των καμπυλών είναι

$$\frac{dy}{dx} = \frac{Y(x, y)}{X(x, y)}. \quad (3.9)$$

Το σύνολο των καμπυλών λέγεται διάγραμμα φάσεων.

3.1.2 Συστήματα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων με δύο μεταβλητές

Ένα γραμμικό σύστημα με δύο μεταβλητές έχει τη γενική μορφή (Hirsh et al., 2004; Jordan & Smith, 1987; Perko, 2001; Strogatz, 2000)

$$\begin{aligned} \dot{x} &= ax + by \\ \dot{y} &= cx + dy. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Το σημείο ισορροπίας βρίσκεται από τις αλγεβρικές σχέσεις που προκύπτουν αν μηδενίσουμε τα δεξιά μέλη των εξισώσεων:

$$\begin{cases} ax + by = 0 \\ cx + dy = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = 0 \\ y = 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Η λύση που βρήκαμε είναι μοναδική εκτός εάν η ορίζουσα των συντελεστών του συστήματος εξισώσεων είναι μηδέν.

Παρατήρηση 3.5. Για το σύστημα γραμμικών εξισώσεων (3.10) έχουμε ένα και μοναδικό σημείο ισορροπίας στην αρχή των αξόνων $(x, y) = (0, 0)$ εάν $ad - bc \neq 0$.

Βρίσκουμε λύσεις των Εξ. (3.10) θεωρώντας την εκθετική συνάρτηση

$$x(t) = r e^{\lambda t}, \quad y(t) = s e^{\lambda t}, \quad (3.12)$$

όπου r, s, λ είναι σταθερές. Αντικατάσταση των (3.12) στις (3.10) δίνει το γραμμικό σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων

$$\begin{aligned} (a - \lambda)r + bs &= 0 \\ cr + (d - \lambda)s &= 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Θεωρούμε ως αγνώστους τους r, s και ζητάμε να μηδενίζεται η ορίζουσα του συστήματος, ώστε το σύστημα να έχει λύσεις πέραν της τετριμμένης $(r, s) = (0, 0)$. Η συνθήκη είναι

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} \Rightarrow \lambda^2 - (a + d)\lambda + (ad - bc) = 0. \quad (3.14)$$

Η τελευταία λέγεται *χαρακτηριστική εξίσωση* του συστήματος και στην περίπτωση μας έχει δύο λύσεις λ_1, λ_2 . Για κάθε τιμή του λ οι εξισώσεις (3.13) δίνουν τη σχέση μεταξύ r και s . Θα θέσουμε (r_1, s_1) τη λύση του (3.13) για $\lambda = \lambda_1$ και αντιστοίχως, (r_2, s_2) για $\lambda = \lambda_2$.

Η γραμμικότητα του συστήματος (3.10) μας εξασφαλίζει ότι ο γραμμικός συνδυασμός δύο λύσεων είναι επίσης λύση. Ωστε, η γενική λύση του συστήματος (3.10) είναι γραμμικός συνδυασμός των δύο λύσεων που βρήκαμε:

$$\begin{aligned}x(t) &= r_1 e^{\lambda_1 t} + r_2 e^{\lambda_2 t} \\y(t) &= s_1 e^{\lambda_1 t} + s_2 e^{\lambda_2 t}.\end{aligned}\quad (3.15)$$

Θα επαναλάβουμε τώρα την παραπάνω διαδικασία σε μια διαφορετική γλώσσα. Το γραμμικό σύστημα (3.10) γράφεται στη μορφή

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.\quad (3.16)$$

Έχουμε το διάνυσμα των αγνώστων

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\quad (3.17)$$

και τον πίνακα του συστήματος

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}.\quad (3.18)$$

Ωστε, το γραμμικό σύστημα γράφεται στη μορφή

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A} \mathbf{x}.\quad (3.19)$$

Οι παραπάνω συμβολισμοί θα πρέπει να μας βοηθήσουν καθώς μας θυμίζουν μορφές γνωστές από τη γραμμική άλγεβρα.

Ας θεωρήσουμε τη μορφή (3.12) την οποία γράφουμε

$$\mathbf{x}(t) = e^{\lambda t} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix},\quad (3.20)$$

όπου \mathbf{v} είναι σταθερό διάνυσμα. Παρατηρούμε ότι

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{d}{dt} (e^{\lambda t} \mathbf{v}) = \lambda e^{\lambda t} \mathbf{v}\quad (3.21)$$

και

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A} (e^{\lambda t} \mathbf{v}) = e^{\lambda t} \mathbf{A} \mathbf{v}.\quad (3.22)$$

Αντικατάσταση των δύο τελευταίων σχέσεων στην (3.19) δίνει το πρόβλημα ιδιοτιμών:

$$\mathbf{A} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} \quad \text{ή} \quad \lambda \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix},$$

άρα, το λ μπορεί να πάρει τις δύο τιμές οι οποίες είναι ιδιοτιμές του πίνακα 2×2 του συστήματος \mathbf{A} και τα \mathbf{v} είναι τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματά του.

3.1.3 Πραγματικές ιδιοτιμές

Ας δούμε την περίπτωση που οι λύσεις της χαρακτηριστικής εξίσωσης είναι πραγματικές, δηλαδή, ο πίνακας του συστήματος έχει πραγματικές ιδιοτιμές.

Παράδειγμα 3.3. (Σαγματικό σημείο) Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -x - 3y \\ \dot{y} &= 2y.\end{aligned}\quad (3.23)$$

Βρείτε τα σημεία ισορροπίας και τις λύσεις του συστήματος.

Επίλυση. Βρίσκουμε λύσεις θεωρώντας τη μορφή

$$x(t) = r e^{\lambda t}, \quad y(t) = s e^{\lambda t}.$$

Αντικαθιστούμε στο σύστημα εξισώσεων (3.23) και βρίσκουμε

$$(\lambda + 1)r + 3s = 0, \quad (\lambda - 2)s = 0.$$

Η χαρακτηριστική εξίσωση του συστήματος είναι

$$(\lambda + 1)(\lambda - 2) = 0 \Rightarrow \lambda = -1, \lambda = 2.$$

Για $\lambda = -1$ βρίσκουμε ιδιοδιάνυσμα $(r, s) = (1, 0)$ και για $\lambda = 2$ βρίσκουμε ιδιοδιάνυσμα $(r, s) = (1, -1)$. Ας ονομάσουμε $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = 2$ και

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Η γενική λύση του συστήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{v}_1 + c_2 e^{\lambda_2 t} \mathbf{v}_2$$

και σε αναλυτικότερη μορφή:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = c_1 e^{\lambda_1 t} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + c_2 e^{\lambda_2 t} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x(t) = c_1 e^{-t} + c_2 e^{2t} \\ y(t) = -c_2 e^{2t} \end{cases}$$

όπου c_1, c_2 είναι σταθερές.

□

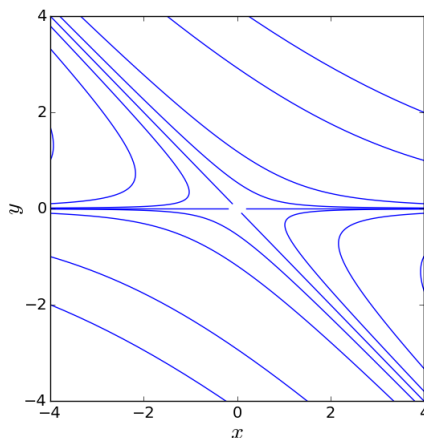
Μπορούμε να δούμε κάποιες ειδικές ενδιαφέρουσες λύσεις. Αν έχουμε αρχική συνθήκη $(x, y)(t = 0) = (1, 0)$ τότε βρίσκουμε τη λύση του συστήματος θέτοντας $c_1 = 1, c_2 = 0$ στη γενική λύση. Έχουμε ειδική λύση $(x, y)(t) = (1, 0)e^{-t}$, η οποία, πραγματικά, ικανοποιεί την αρχική συνθήκη. Με τον διανυσματικό συμβολισμό έχουμε ότι, για αρχική συνθήκη $\mathbf{x}(t = 0) = \mathbf{v}_1$ έχουμε λύση $\mathbf{x}(t) = \mathbf{v}_1 e^{-t}$. Με παρόμοιο τρόπο βλέπουμε ότι για αρχική συνθήκη $\mathbf{x}(t = 0) = \mathbf{v}_2$ έχουμε λύση $\mathbf{x}(t) = \mathbf{v}_2 e^{-2t}$.

Παρατήρηση 3.6. Αν οι αρχικές συνθήκες $(x, y)(t = 0)$ βρίσκονται σε μία από τις ευθείες που ορίζουν τα ιδιοδιανύσματα \mathbf{v}_1 ή \mathbf{v}_2 , τότε η λύση του συστήματος παραμένει επάνω στην ευθεία που ορίζει το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα. Δηλαδή, οι ευθείες που ορίζουν τα ιδιοδιανύσματα αποτελούν κάποιες ειδικές περιοχές του χώρου φάσεων. Αυτές είναι αναλλοίωτοι υπόχωροι του χώρου φάσεων, δηλαδή, η κίνηση για όλους τους χρόνους t περιγράφεται επάνω σε αυτούς του υποχώρους.

Όταν το σύστημα βρίσκεται στην ευθεία που ορίζει το \mathbf{v}_1 , το οποίο αντιστοιχεί σε αρνητική ιδιοτιμή $\lambda_1 = -1$, το σημείο $(x, y)(t)$ θα πλησιάζει την αρχή των αξόνων (το σημείο ισορροπίας) κινούμενο επάνω σε αυτή την ευθεία όταν ο χρόνος πηγαίνει στο άπειρο. Όταν το σύστημα βρίσκεται στην ευθεία του \mathbf{v}_2 , το οποίο αντιστοιχεί σε θετική ιδιοτιμή $\lambda_1 = 2$, το σημείο $(x, y)(t)$ θα απομακρύνεται από την αρχή των αξόνων, κινούμενο επάνω σε αυτή την ευθεία, όταν ο χρόνος πηγαίνει προς το άπειρο.

Συμπεραίνουμε ότι οι ευθείες $c\mathbf{v}_1 = c(1, 0)$ και $c\mathbf{v}_2 = c(1, -1)$ είναι δύο καμπύλες του χώρου φάσεων. Η φορά της κίνησης είναι προς την αρχή των αξόνων όταν κινούμαστε επάνω στην ευθεία $c(1, 0)$ ενώ για την κίνηση στην ευθεία $c(-1, 1)$ έχουμε απομάκρυνση από την αρχή των αξόνων.

Παρατήρηση 3.7. Για ένα σύστημα με πραγματικές και αντίθετες ιδιοτιμές, οι ευθείες που ορίζονται από τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα του συστήματος αποτελούν καμπύλες του χώρου φάσεων.



Σχήμα 3.1: Διάγραμμα φάσεων για το σύστημα (3.23). Το σημείο ισορροπίας στην αρχή των αξόνων είναι σαγματικό.

Μπορούμε να σχεδιάσουμε ποιοτικά όλες τις υπόλοιπες καμπύλες του διαγράμματος εάν σκεφτούμε ότι πρέπει να υπάρχει συνέχεια με τις δύο ευθείες των ιδιοδιανυσμάτων (δείτε Σχήμα 3.1).

Παρατήρηση 3.8. Ένα σημείο ισορροπίας με δύο πραγματικές ετερόσημες ιδιοτιμές λέγεται *σαγματικό σημείο (σάγμα)* και είναι ένα ασταθές σημείο ισορροπίας.

Παράδειγμα 3.4. (Κόμβος) Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned}\dot{x} &= x - 2y \\ \dot{y} &= 3x - 4y\end{aligned}\tag{3.24}$$

Βρείτε τα σημεία ισορροπίας και τις λύσεις του συστήματος. Σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων.

Επίλυση. Η χαρακτηριστική εξίσωση είναι

$$\begin{vmatrix} 1 - \lambda & -2 \\ 3 & -4 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 + 3\lambda + 2 = 0,$$

με λύσεις $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -2$ και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $\mathbf{v}_1 = (1, 1)$, $\mathbf{v}_2 = (2, 3)$. Η γενική λύση είναι

$$\begin{aligned}x(t) &= c_1 e^{-t} + 2c_2 e^{-2t} \\ y(t) &= c_1 e^{-t} + 3c_2 e^{-2t}.\end{aligned}$$

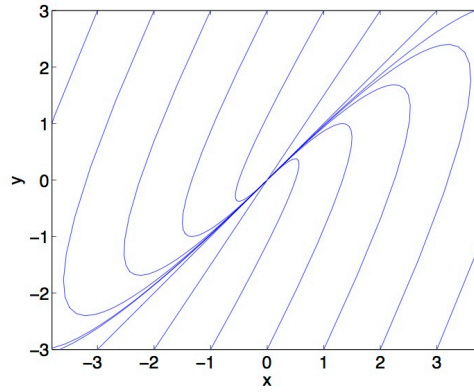
Για να φθάσουμε στη σχεδίαση του διαγράμματος φάσεων ας μελετήσουμε πρώτα τα βασικά του χαρακτηριστικά. Παρατηρούμε ότι η γενική λύση δίνει, για κάθε $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$:

$$(x, y) \rightarrow (0, 0), \quad \text{όταν } t \rightarrow \infty$$

δηλαδή, η κατάσταση του συστήματος για μεγάλους χρόνους ($t \rightarrow \infty$) τείνει, προς το σημείο ισορροπίας $(0, 0)$ από οποιοδήποτε σημείο του χώρου φάσεων κι αν έχουμε ως αρχική συνθήκη. Βλέπουμε ότι όλες οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων καταλήγουν στην αρχή των αξόνων, δηλαδή, στο σημείο ισορροπίας.

Για να καταλάβουμε τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των καμπυλών του διαγράμματος φάσεων σχηματίζουμε τον λόγο

$$\frac{x(t)}{y(t)} = \frac{c_1 e^{-t} + 2c_2 e^{-2t}}{c_1 e^{-t} + 3c_2 e^{-2t}}.\tag{3.25}$$



Σχήμα 3.2: Διάγραμμα φάσεων για το σύστημα (3.24). Το σημείο ισορροπίας στην αρχή των αξόνων είναι κόμβος.

Μπορούμε να διαιρέσουμε αριθμητή και προνομαστή με e^{-t} ώστε έχουμε

$$\frac{x(t)}{y(t)} = \frac{c_1 + 2c_2 e^{-t}}{c_1 + 3c_2 e^{-t}}. \quad (3.26)$$

Βλέπουμε ότι ισχύει

$$\frac{x(t)}{y(t)} = 1, \quad \text{για } t \rightarrow \infty. \quad (3.27)$$

Άρα, αν σχεδιάσουμε μία οποιαδήποτε καμπύλη στο διάγραμμα φάσεων, αυτή θα πρέπει να πλησιάζει προς την αρχή των αξόνων (το σημείο ισορροπίας) κατά τη διεύθυνση της ευθείας $y = x$. Αυτή είναι η διεύθυνση του διανύσματος v_1 της μικρότερης (κατά απόλυτη τιμή) ιδιοτιμής. Ισοδύναμα, μπορούμε να πούμε ότι η ευθεία $y = x$ θα είναι εφαπτομένη κάθε καμπύλης του διαγράμματος φάσεων στο σημείο $(0, 0)$.

Ακολούθως, μπορούμε να διαιρέσουμε αριθμητή και προνομαστή στην Εξ. (3.25) με e^{-2t} ώστε έχουμε

$$\frac{x(t)}{y(t)} = \frac{c_1 e^t + 2c_2}{c_1 e^t + 3c_2}. \quad (3.28)$$

Βλέπουμε ότι ισχύει

$$\frac{x(t)}{y(t)} = \frac{2}{3}, \quad \text{για } t \rightarrow -\infty. \quad (3.29)$$

Άρα, η εφαπτομένη στις φασικές καμπύλες για χρόνους $t \rightarrow -\infty$ είναι παράλληλες στην ευθεία που ορίζει το ιδιοδιάνυσμα $\vec{v}_2 = (2, 3)$ της μεγαλύτερης (κατά απόλυτη τιμή) ιδιοτιμής.

Το διάγραμμα φάσεων για το σύστημα (3.24) έχει σχεδιασθεί στο Σχ. 3.2 και μπορούμε να καταλάβουμε τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των καμπυλών με βάση τις παραπάνω παρατηρήσεις.

□

Παρατήρηση 3.9. Όλες οι φασικές καμπύλες για τον κόμβο του παραδείγματος είναι παράλληλες με την ευθεία που ορίζει το ιδιοδιάνυσμα $v_1 = (1, 1)$ της μικρότερης (κατ' απόλυτη τιμή) ιδιοτιμής για μεγάλους χρόνους ($t \rightarrow -\infty$), ενώ είναι παράλληλες με το ιδιοδιάνυσμα $v_2 = (2, 3)$ της μεγαλύτερης (κατ' απόλυτη τιμή) ιδιοτιμής για χρόνους $t \rightarrow -\infty$.

Παρατήρηση 3.10. Ένα σημείο ισορροπίας με δύο πραγματικές ομόσημες ιδιοτιμές λέγεται κόμβος. Όταν οι ιδιοτιμές είναι αρνητικές (όπως στο προηγούμενο παράδειγμα) έχουμε έναν ευσταθή κόμβο. Στην αντίθετη περίπτωση (δύο θετικές ιδιοτιμές) ο κόμβος είναι ασταθής.

Διαγωνοποίηση πίνακα του συστήματος

Το σύστημα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων (3.10) το οποίο μελετάμε μπορεί επίσης να γραφεί με τη βοήθεια πινάκων όπως είδαμε στην Εξ. (3.19), (την οποία επαναλαμβάνουμε εδώ για την πληρότητα της παραγράφου):

$$\dot{x} = Ax,$$

όπου ο x είναι ο πίνακας των μεταβλητών ο οποίος ορίστηκε στην Εξ. (3.17) και A είναι ο πίνακας 2×2 του συστήματος (3.16) όπως ορίστηκε στην Εξ. (3.18). Θα προχωρήσουμε στη συνέχεια σε μελέτη του πίνακα A και για αυτό τον λόγο ανακαλούμε ένα σημαντικό θεώρημα της γραμμικής άλγεβρας (Hirsh et al., 2004; Perko, 2001).

Θεώρημα. *Εάν οι ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ενός πίνακα A διάστασεων $n \times n$ είναι πραγματικές και διάκριτες, τότε οποιοδήποτε σύνολο των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ είναι βάση του \mathbb{R}^n . Ο πίνακας των ιδιοδιανυσμάτων $P = [v_1, v_2, \dots, v_n]$ είναι αντιστρέψιμος και ισχύει*

$$P^{-1}AP = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]. \quad (3.30)$$

Για να βρούμε τη γενική λύση του γραμμικού συστήματος ορίζουμε ένα νέο διάνυσμα μεταβλητών

$$y = P^{-1}x, \quad (3.31)$$

για το οποίο έχουμε

$$\dot{y} = P^{-1}\dot{x} = P^{-1}Ax = P^{-1}APy. \quad (3.32)$$

Εφαρμόζοντας το παραπάνω θεώρημα έχουμε

$$\dot{y} = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]y. \quad (3.33)$$

Η γενική λύση του διαγώνιου αυτού συστήματος είναι

$$y(t) = \text{diag}[e^{\lambda_1 t}, e^{\lambda_2 t}, \dots, e^{\lambda_n t}] y(0), \quad (3.34)$$

όπου $y(0)$ είναι οι αρχικές συνθήκες εκφρασμένες στις μεταβλητές y . Τελικά, στις αρχικές μεταβλητές έχουμε τη γενική λύση

$$x(t) = P \text{diag}[e^{\lambda_1 t}, e^{\lambda_2 t}, \dots, e^{\lambda_n t}] P^{-1} x(0), \quad (3.35)$$

όπου $x(0)$ είναι οι αρχικές συνθήκες.

Δεδομένου ότι συνήθως μελετάμε συστήματα δύο εξισώσεων είναι χρήσιμο να θυμηθούμε ότι για έναν 2×2 πίνακα P ο αντίστροφος P^{-1} είναι

$$P = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \quad P^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

όπου $\Delta = ad - bc$ η διακρίνουσα του πίνακα P .

Παράδειγμα 3.5. (Σαγματικό σημείο) Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -x_1 - 3x_2 \\ \dot{x}_2 &= 2x_2 \end{aligned}$$

Βρείτε τη γενική λύση του.

Επίλυση. Ο πίνακας του συστήματος είναι

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -3 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα είναι $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = 2$ άρα έχουμε ένα σαγματικό σημείο. Τα δύο αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Άρα έχουμε

$$P = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

και

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Για τις μεταβλητές $y = P^{-1}x$ έχουμε το σύστημα

$$\dot{y}_1 = -y_1$$

$$\dot{y}_2 = 2y_2.$$

Η γενική λύση του είναι $y_1(t) = c_1 e^{-t}$, $y_2(t) = c_2 e^{2t}$ ή, σε μορφή πινάκων

$$y(t) = \begin{bmatrix} e^{-t} & 0 \\ 0 & e^{2t} \end{bmatrix} y(0),$$

όπου θέσαμε $y(0) = [c_1, c_2]^T$. Τελικά έχουμε

$$x(t) = P \begin{bmatrix} e^{-t} & 0 \\ 0 & e^{2t} \end{bmatrix} P^{-1} x(0) \Rightarrow \begin{cases} x_1(t) = x_1(0)e^{-t} + x_2(0)(e^{-t} - e^{2t}) \\ x_2(t) = x_2(0)e^{2t} \end{cases}$$

□

Σύντομο πρόβλημα 3.1. Για το σύστημα του προηγούμενου παραδείγματος σχεδιάστε τα διαγράμματα φάσεων στα επίπεδα (y_1, y_2) και (x_1, x_2) .

3.1.4 Μιγαδικές ιδιοτιμές

Ας δούμε τώρα την περίπτωση που οι λύσεις της χαρακτηριστικής εξίσωσης είναι μιγαδικές, δηλαδή, ο πίνακας του συστήματος έχει μιγαδικές ιδιοτιμές.

Παράδειγμα 3.6. (Εστιά) Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= ax_1 - bx_2 \\ \dot{x}_2 &= bx_1 + ax_2 \end{aligned} \tag{3.37}$$

του οποίου η χαρακτηριστική εξίσωση είναι

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & -b \\ b & a - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (\lambda^2 - a)^2 + b^2 = 0, \Rightarrow \lambda = a \pm ib.$$

Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι $(1, \mp i)$. Άρα

$$\begin{aligned} x_1(t) &= r_1 e^{(a+ib)t} + r_2 e^{(a-ib)t} = e^{at} [r_1 e^{ibt} + r_2 e^{-ibt}] \\ x_2(t) &= -ir_1 e^{(a+ib)t} + ir_2 e^{(a-ib)t} = e^{at} \frac{1}{i} [r_1 e^{ibt} - r_2 e^{-ibt}] \end{aligned}$$

Θέτουμε r_2^* τον μιγαδικό συζυγή του r_2 . Εκλέγουμε $r_2^* = r_1$ και $r_1 := c_1/2 + ic_2/2$ όπου $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$, ώστε να πετύχουμε πραγματική λύση (αφού σε όλα το παρόν κεφάλαιο υποθέτουμε ότι τα x, y είναι πραγματικές μεταβλητές). Αντικαθιστούμε στη γενική λύση και βρίσκουμε

$$\begin{aligned}x_1(t) &= e^{at} 2\operatorname{Re}[r_1 e^{ibt}] = e^{at} [c_1 \cos bt - c_2 \sin bt] \\x_2(t) &= e^{at} 2\operatorname{Im}[r_1 e^{ibt}] = e^{at} [c_1 \sin bt + c_2 \cos bt].\end{aligned}$$

Η λύση αυτή γράφεται και στη μορφή

$$\mathbf{x}(t) = e^{at} \begin{bmatrix} \cos bt & -\sin bt \\ \sin bt & \cos bt \end{bmatrix} \mathbf{x}(0), \quad (3.38)$$

όπου $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$ και $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(t=0)$ είναι οι αρχικές συνθήκες. \square

Παρατηρούμε ότι στην Εξ. (3.38) ο πίνακας στο δεξιό μέλος δίνει στροφή το \mathbf{x}_0 κατά γωνία bt ενώ το εκθετικό δίνει είτε αύξηση (αν $a > 0$) είτε συρρίκνωση (αν $a < 0$) του μέτρου του $\mathbf{x}(t)$.

Εστία σε πολικές συντεταγμένες

Η τελευταία παρατήρηση υποδεικνύει ότι μία απλούστερη και παραστατικότερα μελέτη του συστήματος (3.37) και των λύσεών του μπορεί να επιτευχθεί αν χρησιμοποιήσουμε πολικές συντεταγμένες (Jordan & Smith, 1987). Ξεκινάμε ορίζοντας τη μιγαδική μεταβλητή $z = x_1 + ix_2$. Άμεσος υπολογισμός δείχνει ότι το σύστημα (3.37), γράφεται στη συμπαγή μορφή

$$\dot{z} = (a + ib) z. \quad (3.39)$$

Στη συνέχεια εισάγουμε τις πολικές συντεταγμένες (r, θ) και χρησιμοποιούμε την πολική μορφή για τη μιγαδική μεταβλητή $z = r(t)e^{i\theta(t)}$, οπότε η Εξ. (3.39) γράφεται ως

$$\begin{cases} \dot{r} = ar \\ \dot{\theta} = b \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r = r_0 e^{at} \\ \theta = bt + \theta_0, \end{cases} \quad (3.40)$$

όπου r_0, θ_0 είναι σταθερές. Αυτή η μορφή της λύσης δείχνει ότι η χρονική εξέλιξη κάθε σημείου στο διάγραμμα φάσεων δίνει περιστροφή γύρω από την αρχή των αξόνων, ενώ ταυτοχρόνως πλησιάζει (για $a < 0$) ή απομακρύνεται (για $a > 0$) από αυτό. Λέμε ότι η αρχή των αξόνων είναι ένα *σπειροειδές σημείο* ισορροπίας (εστία). Αυτό είναι ευσταθές για $a < 0$ και ασταθές για $a > 0$.

Παρατήρηση 3.11. (Εστία) Ένα σημείο ισορροπίας με δύο μιγαδικές συζυγείς ιδιοτιμές λέγεται εστία ή σπειροειδές σημείο. Όταν το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών είναι αρνητικό τότε η κίνηση είναι προς τα μέσα (έχουμε μία ευσταθή εστία). Στην αντίθετη περίπτωση (πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών θετικό) η κίνηση είναι προς τα έξω (έχουμε μία ασταθή εστία).

Παρατήρηση 3.12. (Κέντρο) Στην περίπτωση $a = 0$ έχουμε κλειστές τροχιές, οι οποίες είναι κύκλοι ή ελλείψεις και λέμε ότι το σημείο ισορροπίας είναι κέντρο.

Οποιοδήποτε σύστημα της μορφής

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= ax_1 + bx_2 \\ \dot{x}_2 &= cx_1 + dx_2\end{aligned}$$

για τον οποίο έχουμε μιγαδικές ιδιοτιμές έχει ένα σπειροειδές σημείο ισορροπίας. Αυτό προκύπτει από το ακόλουθο θεώρημα (Hirsh et al., 2004; Perko, 2001).

Θεώρημα. Εάν ένας πραγματικός πίνακας \mathbf{A} διαστάσεων $2n \times 2n$ έχει διάκριτες ιδιοτιμές $\lambda_j = a_j + ib_j$ και $\lambda_j^* = a_j - ib_j$ και ιδιοδιανύσματα $\mathbf{w}_j = \mathbf{u}_j + i\mathbf{v}_j$, $\mathbf{w}_j^* = \mathbf{u}_j - i\mathbf{v}_j$, τότε $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{u}_n, \mathbf{v}_n\}$ είναι βάση του \mathbb{R}^{2n} . Ο πίνακας $\mathbf{P} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{v}_n, \mathbf{u}_n]$ είναι αντιστρέψιμος και

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \text{diag} \begin{bmatrix} a_j & -b_j \\ b_j & a_j \end{bmatrix}. \quad (3.41)$$

Ωστε, εάν ορίσουμε ένα νέο διάνυσμα μεταβλητών $\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}$, έχουμε

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{P}^{-1}\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{y} = \text{diag} \begin{bmatrix} a_j & -b_j \\ b_j & a_j \end{bmatrix} \mathbf{y}. \quad (3.42)$$

Άρα ισχύει

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{P} \text{diag} \begin{bmatrix} a_j & -b_j \\ b_j & a_j \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}(0). \quad (3.43)$$

Παράδειγμα 3.7. (Εστιά) Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1 + x_2 \\ \dot{x}_2 &= -5x_1 - 3x_2. \end{aligned}$$

Βρείτε τη γενική λύση του.

Επίλυση. Η χαρακτηριστική εξίσωση του συστήματος είναι

$$\lambda^2 - 2\lambda + 2 = 0 \Rightarrow \lambda_1, \lambda_2 = -1 \pm i$$

Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι $(x_1, x_2) = (1, -2 \pm i)$. Άρα

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Αν κάνουμε τον μετασχηματισμό $\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}$ τότε βρίσκουμε $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{P}^{-1}\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{y}$. Σε συμφωνία με το παραπάνω θεώρημα έχουμε

$$\dot{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{y}.$$

Από το Παράδειγμα 3.6 (όπου θέτουμε $a = -1, b = 1$) συνάγουμε

$$\mathbf{y}(t) = e^{-t} \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{bmatrix} \mathbf{y}(0).$$

Τελικά

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t) &= \mathbf{P}\mathbf{y}(t) = \mathbf{P}e^{-t} \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{bmatrix} \mathbf{y}(0) = \mathbf{P}e^{-t} \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}(0) \\ &\Rightarrow \begin{cases} x_1(t) &= e^{-t} [x_1(0) \cos t + (2x_1(0) + x_2(0)) \sin t] \\ x_2(t) &= e^{-t} [x_2(0) \cos t - (5x_1(0) + 2x_2(0)) \sin t] \end{cases} \end{aligned}$$

Στο διάγραμμα φάσεων στο επίπεδο (x_1, x_2) έχουμε μία ευσταθή εστία.

□

Παράδειγμα 3.8. (Εστιά) Βρείτε τη γενική λύση του συστήματος

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1 + x_2 \\ \dot{x}_2 &= -5x_1 - 3x_2. \end{aligned}$$

Επίλυση. Η χαρακτηριστική εξίσωση μας δίνει

$$\lambda^2 + 2\lambda + 2 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = -1 + i, \quad \lambda_2 = -1 - i,$$

όπου $\lambda_2 = \lambda_1^*$. Για $\lambda = \lambda_1$ και $\lambda = \lambda_2$ βρίσκουμε αντιστοίχως

$$s_1 = (-2 + i)r_1, \quad s_2 = (-2 - i)r_2.$$

Άρα η γενική λύση γράφεται

$$\begin{aligned} x_1(t) &= r_1 e^{(-1+i)t} + r_2 e^{(-1-i)t}, \\ x_2(t) &= r_1(-2 + i) e^{(-1+i)t} + r_2(-2 - i) e^{(-1-i)t}. \end{aligned}$$

Αν ζητάμε πραγματικές λύσεις τότε πρέπει να θέσουμε $r_2 = r_1^*$ και γράφοντας $r_1 = \frac{1}{2}c_1 + \frac{1}{2}ic_2$ παίρνουμε

$$\begin{aligned} x_1(t) &= e^{-t}(c_1 \cos t - c_2 \sin t), \\ x_2(t) &= -e^{-t}[(2c_1 + c_2) \cos t + (c_1 - 2c_2) \sin t]. \end{aligned}$$

Για να σχεδιάσουμε το διάγραμμα φάσεων δουλεύουμε ως εξής. Σχεδιάζουμε μία σπείρα στην οποία τα βέλη οδηγούν προς το σημείο ισορροπίας, διότι το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών είναι αρνητικό. Υπάρχουν δύο τέτοιες σπείρες (αριστερόστροφη και δεξιόστροφη). Επιλέγουμε εκείνη που ικανοποιεί τις εξισώσεις, πράγμα που το ελέγχουμε με υπολογισμό των \dot{x}_1, \dot{x}_2 σε ορισμένα σημεία του διαγράμματος φάσεων.

□

3.1.5 Κατάταξη σημείων ισορροπίας

Έστω η γενική μορφή για το σύστημα δύο γραμμικών διαφορικών εξισώσεων

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= ax_1 + bx_2 \\ \dot{x}_2 &= cx_1 + dx_2. \end{aligned} \tag{3.44}$$

Θέτουμε $\delta = \det \mathbf{A} = ad - bc$ και $\tau = \text{Tr } \mathbf{A} = a + d$. Η χαρακτηριστική εξίσωση γράφεται ως

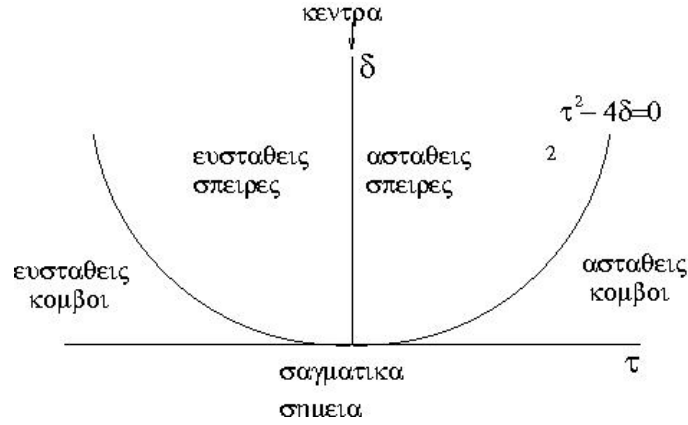
$$\lambda^2 - \tau\lambda + \delta = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \frac{\tau \pm \sqrt{\tau^2 - 4\delta}}{2} \tag{3.45}$$

Έχουμε τις παρακάτω περιπτώσεις, τις οποίες μελετήσαμε στις προηγούμενες παραγράφους.

- (α) Για $\delta < 0$ έχουμε σαγματικό σημείο.
- (β) Για $\delta > 0$ και $\tau^2 - 4\delta \geq 0$ έχουμε κόμβο. Είναι ευσταθής για $\tau < 0$ και ασταθής για $\tau > 0$.
- (γ) Για $\delta > 0$ και $\tau^2 - 4\delta < 0$ έχουμε εστία (για $\tau \neq 0$). Είναι ευσταθής για $\tau < 0$ και ασταθής για $\tau > 0$.
- (δ) Για $\delta > 0$ και $\tau = 0$ έχουμε κέντρο.

3.1.6 Ευστάθεια σημείων ισορροπίας

Είδαμε την περίπτωση του κέντρου ως σημείου ισορροπίας το οποίο περιβάλλεται από κλειστές καμπύλες. Αυτό σημαίνει ότι όταν το σύστημα βρεθεί κοντά σε αυτό το σημείο ισορροπίας θα εξελίσσεται στον χρόνο ώστε να παραμένει συνεχώς στην περιοχή του κέντρου. Στην περίπτωση του σάγματος, οι



Σχήμα 3.3: Διάγραμμα σημείων ισορροπίας στο χώρο των παραμέτρων.

τροχιές στο διάγραμμα φάσης οι οποίες περνούν κοντά από το σάγμα εξελίσσονται στον χρόνο έτσι ώστε η κατάσταση του συστήματος να απομακρύνεται από το σάγμα. Γενικότερα, αν μία μικρή διαταραχή από το σημείο ισορροπίας δεν οδηγεί (μέσω κάποιων φασικών καμπυλών) μακριά από αυτό, τότε ονομάζουμε το σημείο ισορροπίας *ευσταθές*. Εάν, αντίθετα, μία μικρή διαταραχή από το σημείο ισορροπίας οδηγεί (μέσω κάποιων φασικών καμπυλών) μακριά από αυτό, τότε ονομάζουμε το σημείο ισορροπίας *ασταθές*. Θα δούμε στην παράγραφο αυτή μερικά αποτελέσματα σχετικά με την ευστάθεια σημείων ισορροπίας (Hirsh et al., 2004; Perko, 2001; Strogatz, 2000).

Θεώρημα. *Εάν όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα A ενός γραμμικού συστήματος n εξισώσεων έχουν αρνητικό πραγματικό μέρος τότε: για κάθε αρχική συνθήκη $x_0 \in \mathbb{R}^n$ ισχύει $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = \mathbf{0}$ και επίσης, αν $x_0 \neq \mathbf{0}$, $\lim_{t \rightarrow -\infty} |x(t)| = \infty$.*

Θεώρημα. *Εάν όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα A έχουν θετικό πραγματικό μέρος τότε: για κάθε αρχική συνθήκη $x_0 \in \mathbb{R}^n$ ισχύει $\lim_{t \rightarrow -\infty} x(t) = \mathbf{0}$ και επίσης, αν $x_0 \neq \mathbf{0}$, $\lim_{t \rightarrow \infty} |x(t)| = \infty$.*

Ορισμός. Έστω $\lambda_j = a_j + ib_j$ οι ιδιοτιμές του πίνακα ενός γραμμικού συστήματος και $w_j = u_j + iv_j$ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Τότε ονομάζουμε τους χώρους

$$E^s = \text{Span}\{u_j, v_j \mid a_j < 0\}$$

$$E^u = \text{Span}\{u_j, v_j \mid a_j > 0\}$$

$$E^c = \text{Span}\{u_j, v_j \mid a_j = 0\}$$

ευσταθή, ασταθή και κεντρικό υπόχωρο του συστήματος αντίστοιχα. □

Παρατήρηση 3.13. *Για ένα σύστημα δύο εξισώσεων με ένα σαγματικό σημείο ο ευσταθής και ο ασταθής υπόχωρος είναι ο καθένας μία ευθεία.*

Παράδειγμα 3.9. Έστω ο πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 \\ -1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

με ιδιοτιμές $\lambda_{1,2} = -2 \pm i$ και ιδιοδιανύσματα $w_{1,2} = [0, 1, 0]^T \pm i[1, 0, 0]^T$ και επίσης $\lambda_3 = 3$ με ιδιοδιάνυσμα $u_3 = [0, 0, 1]^T$. Ο ευσταθής υπόχωρος E^s είναι το επίπεδο (x_1, x_2) και ο ασταθής υπόχωρος E^u είναι ο άξονας x_3 . □

Θεώρημα. *Οι υπόχωροι E^s, E^u, E^c ενός πίνακα $n \times n$ μένουν αναλλοίωτοι από τις αντίστοιχες εξισώσεις. Επίσης,*

$$\mathbb{R}^n = E^s \oplus E^u \oplus E^c.$$

Ορισμός. Ένα σημείο ισορροπίας x_0 λέγεται *ευσταθές* αν για κάθε $\epsilon > 0$ υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε για κάθε αρχική συνθήκη $x(t=0) \in N_\delta(x_0)$ έχουμε $x(t) \in N_\epsilon(x_0)$ για κάθε χρόνο $t > 0$. Το σημείο ισορροπίας λέγεται *ασταθές* εάν δεν είναι ευσταθές. \square

Για τα σημεία ισορροπίας τα οποία έχουμε δει έχουμε τις ακόλουθες ιδιότητες ευστάθειας.

- Ένα σαγματικό σημείο είναι ασταθές.
- Ένας κόμβος μπορεί να είναι ασταθής (για θετικές ιδιοτιμές) ή ευσταθής (για αρνητικές ιδιοτιμές).
- Μία εστία μπορεί να είναι ασταθής (ιδιοτιμές με θετικό πραγματικό μέρος) ή ευσταθής (ιδιοτιμές με αρνητικό πραγματικό μέρος).
- Ένα κέντρο είναι ευσταθές.

Παρατήρηση 3.14. Ένα σημείο ισορροπίας λέγεται *ασυμπτωτικά ευσταθές* αν υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε για κάθε $x \in N_\delta(x_0)$ έχουμε

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0.$$

Παρατήρηση 3.15. Εάν μία εστία είναι ευσταθής τότε είναι *ασυμπτωτικά ευσταθής*. Ένα κέντρο είναι *ευσταθές*, αλλά *όχι* *ασυμπτωτικά ευσταθές*.

3.2 Διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης

3.2.1 Το απλό εκκρεμές

Ένα σώμα μάζας m το οποίο εξαρτάται από αβαρή ράβδο μήκους ℓ και κινείται υπό την επίδραση της δύναμης βαρύτητας το ονομάζουμε απλό εκκρεμές. Αν ονομάσουμε θ τη γωνία της ράβδου από την κατακόρυφο τότε η εξίσωση κίνησης για το εκκρεμές είναι (Jordan & Smith, 1987)

$$m\ell^2 \ddot{\theta} + mg\ell \sin \theta = 0, \quad (3.46)$$

όπου g είναι η επιτάχυνση της βαρύτητας. Πρόκειται για μία διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης. Αυτή είναι μάλιστα μία μη-γραμμική εξίσωση διότι περιέχει το $\sin \theta$.

Παρατηρούμε ότι

$$\ddot{\theta} = \frac{d\dot{\theta}}{dt} = \frac{d\dot{\theta}}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = \frac{d\dot{\theta}}{d\theta} \dot{\theta}$$

και γράφουμε την εξίσωση (3.46) ως

$$m\ell^2 \dot{\theta} \frac{d\dot{\theta}}{d\theta} + mg\ell \sin \theta = 0.$$

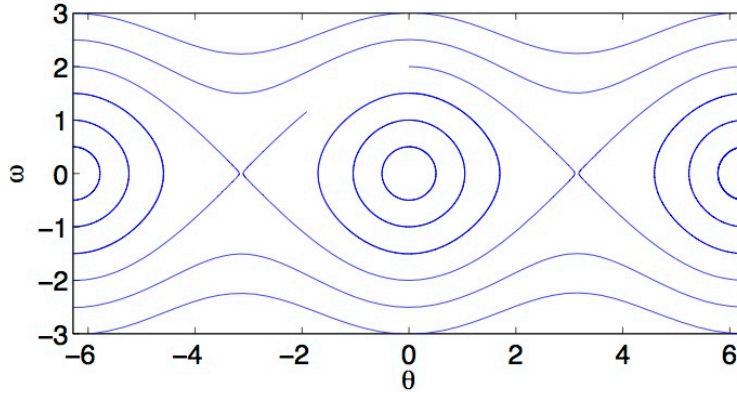
Έτσι, ενώ είχαμε εξίσωση για τη μεταβλητή $\theta = \theta(t)$, τώρα έχουμε περάσει σε μία εξίσωση για την ταχύτητα $\dot{\theta}$ ως συνάρτηση του θ . Ολοκληρώνουμε την τελευταία εξίσωση

$$m\ell^2 \int \dot{\theta} d\dot{\theta} + mg\ell \int \sin \theta d\theta = 0$$

και βρίσκουμε

$$\frac{1}{2} m\ell^2 \dot{\theta}^2 - mg\ell \cos \theta = C, \quad (3.47)$$

το οποίο είναι ολοκλήρωμα της κίνησης (είναι μάλιστα το ολοκλήρωμα της ενέργειας). Η τιμή της C μπορεί να καθορισθεί εάν, π.χ., υποθέσουμε κάποιες αρχικές συνθήκες $\theta_0 = \theta(t=0)$, $\dot{\theta}_0 = \dot{\theta}(t=0)$ τις οποίες θα αντικαταστήσουμε στο αριστερό μέλος της παραπάνω εξίσωσης ώστε θα υπολογίσουμε τη



Σχήμα 3.4: Διάγραμμα φάσεων για το απλό εκκρεμές.

C . Είναι προφανές ότι για κάθε ζευγάρι αρχικών συνθηκών θα βρίσκουμε, εν γένει, διαφορετική σταθερά C , δηλαδή, κάθε τιμή της C αντιστοιχεί σε διαφορετικές λύσεις του προβλήματος.

Για να βρούμε λύση της εξίσωσης κίνησης (3.46) χρειαζόμαστε τις τιμές της γωνίας θ και της ταχύτητας $\dot{\theta}$ ως αρχικές συνθήκες. Άρα η κατάσταση του εκκρεμούς καθορίζεται από τις τιμές του ζεύγους $\theta, \dot{\theta}$. Θα ορίζουμε το επίπεδο των $(\theta, \dot{\theta})$ στον οποίο μπορούμε να καθορίσουμε τις καταστάσεις του εκκρεμούς και να περιγράψουμε την κίνησή του. Αυτός είναι ο χώρος φάσεων για το εκκρεμές.

Παρατηρούμε ότι το ολοκλήρωμα (3.47) δίνει εξισώσεις καμπυλών στον χώρο φάσεων. Κάθε καμπύλη σε αυτό το διάγραμμα περιγράφει μία πιθανή κίνηση του συστήματος στον χώρο των καταστάσεων του.

Ας γράψουμε την Εξ. (3.47) σε μία πιο απλή μορφή αφού διαιρέσουμε με $m\ell^2$:

$$\frac{1}{2} \dot{\theta}^2 - \omega^2 \cos \theta = c, \quad (3.48)$$

όπου θέσαμε $\omega^2 = g/\ell$ και c είναι μία νέα σταθερά. Παρατηρούμε ότι η Εξ. (3.48) δίνει $c \geq -\omega^2 \cos \theta$. Άρα η σταθερά c παίρνει τιμές $c \geq -\omega^2$ και η διερεύνηση του διαγράμματος φάσεων μπορεί να περιοριστεί στις αποδεκτές τιμές του c .

Σημεία ισορροπίας

Θεωρούμε $c = -\omega^2$, οπότε η εξίσωση (3.47) ικανοποιείται μόνο για ταχύτητα $\dot{\theta} = 0$, και για τις γωνίες $\theta = 0, \pm 2\pi, \dots$. Αυτές οι τιμές παριστάνονται με μεμονωμένα σημεία στο διάγραμμα φάσεων, ενώ οι αντίστοιχες λύσεις των εξισώσεων (3.46) είναι οι σταθερές συναρτήσεις $\theta(t) = 0, \pm 2\pi, \dots$. Τα αντίστοιχα σημεία ισορροπίας στο διάγραμμα φάσεων είναι $(\theta, \dot{\theta}) = (0, 0), (\pm 2\pi, 0)$ κλπ.

Θεωρούμε επίσης την περίπτωση $c = \omega^2$. Η εξίσωση (3.47) ικανοποιείται για $\dot{\theta} = 0$, και $\theta = \pm\pi, \pm 3\pi, \dots$. Επιπλέον η εξίσωση κίνησης (3.46) δίνει $\ddot{\theta} = 0$ για αυτές τις τιμές του θ , συνεπώς έχουμε λύσεις τις σταθερές συναρτήσεις $\theta(t) = \pm\pi, \pm 3\pi, \dots$. Τα αντίστοιχα σημεία ισορροπίας στο διάγραμμα φάσεων είναι $(\theta, \dot{\theta}) = (\pm\pi, 0)$ κλπ.

Τα σημεία ισορροπίας του χώρου φάσεων αντιστοιχούν σε θέσεις για τις οποίες το εκκρεμές παραμένει ακίνητο, εφόσον η αρχική του ταχύτητα είναι $\dot{\theta} = 0$.

Σαγματικά σημεία

Στην περίπτωση κατά την οποία η σταθερά c πάρει τιμή $c \approx \omega^2$ βρισκόμαστε κοντά σε ένα από τα σημεία ισορροπίας $(\pm\pi, 0)$. Ας επιλέξουμε την περίπτωση $\theta \approx \pi$, οπότε μπορούμε να γράψουμε την

προσέγγιση

$$\cos \theta \approx \cos \pi - (\cos \theta)'_{\theta=\pi}(\theta - \pi) + (\cos \theta)''_{\theta=\pi}(\theta - \pi)^2/2 = -1 + (\theta - \pi)^2/2.$$

Εισάγωντας την προσέγγιση στην (3.48) παίρνουμε

$$\frac{1}{2}\dot{\theta}^2 - \omega^2 \left(-1 + \frac{(\theta - \pi)^2}{2} \right) = c \Rightarrow \dot{\theta}^2 - \omega^2 (\theta - \pi)^2 = c', \quad (3.49)$$

όπου c' είναι μία νέα σταθερά. Ας ορίσουμε νέα μεταβλητή για την απόκλιση της γωνίας από τη θέση ισορροπίας $\theta_1 := \theta - \pi$. Τότε για καμπύλες κοντά στο σημείο $(\pi, 0)$ έχουμε την εξίσωση

$$\dot{\theta}_1^2 - \omega^2 \theta_1^2 = c'$$

η οποία περιγράφει μία οικογένεια υπερβολών στο διάγραμμα φάσεων. Οι ασύμπτωτες των υπερβολών αυτών τέμνονται στο σημείο ισορροπίας $(\theta, \dot{\theta}) = (\pi, 0)$. Παρόμοιο αποτέλεσμα έχουμε και για το σημείο $(\theta, \dot{\theta}) = (-\pi, 0)$. Τα σημεία $(\pm\pi, 0)$ τα οποία περιβάλλονται από τις υπερβολές είναι σαγματικά σημεία ισορροπίας και θα μελετηθούν αναλυτικότερα στη συνέχεια.

Περιοδική κίνηση

Στην περίπτωση κατά την οποία η σταθερά c πάρει τιμή $c \approx -\omega^2$ με $c > -\omega^2$, μπορούμε να γράψουμε $\cos \theta \approx 1 - \theta^2/2$ ώστε η (3.48) γράφεται

$$\frac{1}{2}\dot{\theta}^2 - \omega^2 \left(1 - \frac{\theta^2}{2} \right) = c \Rightarrow \dot{\theta}^2 + \omega^2 \theta^2 = c', \quad (3.50)$$

όπου c' είναι μία νέα σταθερά. Η τελευταία εξίσωση δίνει μία οικογένεια ελλείψεων στο διάγραμμα φάσεων, οι οποίες περιβάλλουν το σημείο ισορροπίας $(\theta, \dot{\theta}) = (0, 0)$. Για κάθε $c' > 0$ έχουμε μία έλλειψη, ενώ για $c' = 0$ βρίσκουμε το ίδιο το σημείο ισορροπίας. Μπορούμε να επαναλάβουμε τον παραπάνω υπολογισμό για κάθε ένα από τα σημεία $(\theta, \dot{\theta}) = (\pm 2\pi, 0), (\pm 4\pi, 0)$ κλπ, με παρόμοια αποτελέσματα. Αυτά τα σημεία ισορροπίας είναι κέντρα.

Περιστροφική κίνηση

Ας δούμε τώρα την περίπτωση $c > \omega^2$, οπότε η Εξ. (3.48) δίνει $\dot{\theta}^2 > 0$. Αυτό σημαίνει $\dot{\theta} \neq 0$ και άρα το θ είναι μία μονότονη συνάρτηση του χρόνου. Για $\dot{\theta} > 0$ παίρνουμε μη-κλειστές καμπύλες με φορά από αρνητικά θ προς θετικά, ενώ για $\dot{\theta} < 0$ παίρνουμε αντίστοιχες καμπύλες με αντίθετη φορά. Οι καμπύλες αυτές αντιστοιχούν σε συνεχή περιστροφική κίνηση του εκκρεμούς.

3.2.2 Εξισώσεις δευτέρας τάξης ως σύστημα εξισώσεων πρώτης τάξης

Γενικεύουμε την περίπτωση του προηγούμενου παραδείγματος και υποθέτουμε την εξίσωση δευτέρας τάξης (Jordan & Smith, 1987)

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}) \quad (3.51)$$

η οποία περιγράφει, π.χ., την κίνηση ενός μηχανικού συστήματος. Η κατάσταση του συστήματος καθορίζεται από τις τιμές των x, \dot{x} . Για να λύσουμε την εξίσωση (το πρόβλημα αρχικών τιμών) χρειαζόμαστε τις τιμές των μεταβλητών σε κάποια χρονική στιγμή $[x(t_0), \dot{x}(t_0)]$. Αυτό δίνει την αφορμή να γράψουμε την παραπάνω εξίσωση σε μία νέα μορφή όπου τα x και \dot{x} θα εμφανίζονται σαν ανεξάρτητες μεταβλητές. Δίνουμε ένα νέο όνομα στο \dot{x} :

$$\dot{x} = y \quad (3.52)$$

και η αρχική εξίσωση γράφεται

$$\dot{y} = f(x, y). \quad (3.53)$$

Οι δύο τελευταίες αποτελούν ένα σύστημα δύο εξισώσεων πρώτης τάξης το οποίο είναι ισοδύναμο με την αρχική εξίσωση δεύτερης τάξης.

Το διάγραμμα φάσεων του συστήματος των εξισώσεων βρίσκεται στο επίπεδο (x, y) . Οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων ικανοποιούν την εξίσωση

$$\frac{dy}{dx} = \frac{f(x, y)}{g(x, y)} \quad (3.54)$$

όπως προκύπτει και από την Εξ. (3.9). Η εξίσωση αυτή μπορεί κατ' αρχήν να δώσει λύσεις $y = y(x)$ οι οποίες ορίζουν τις καμπύλες του διαγράμματος φάσεων στο επίπεδο (x, y) .

Παράδειγμα 3.10. Μελετήστε και σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων για την εξίσωση $\ddot{x} + a \sin x = 0$.

Επίλυση. Αυτή είναι η εξίσωση για το απλό εκκρεμές. Γράφουμε

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = -a \sin x.$$

Τα σημεία ισορροπίας βρίσκονται αν θέσουμε $\dot{x} = 0$, $\dot{y} = 0$ και λύσουμε το αλγεβρικό σύστημα που προκύπτει:

$$y = 0 \quad -a \sin x = 0.$$

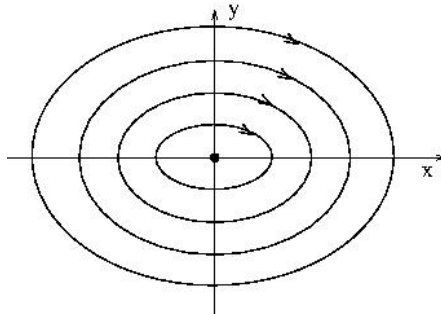
Οι λύσεις είναι $y = 0$, $x = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \dots$. Παρατηρήστε ότι όλα τα σημεία ισορροπίας βρίσκονται επάνω στον άξονα x .

Οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων δίνονται από την

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{a \sin x}{y} \Rightarrow \int y dy = -a \int \sin x dx \Rightarrow \frac{1}{2} y^2 - a \cos x = C.$$

Για κάθε τιμή της παραμέτρου C παίρνουμε μία καμπύλη στο διάγραμμα φάσεων (Σχήμα 3.4).

□



Σχήμα 3.5: Διάγραμμα φάσεων για ένα κέντρο στην αρχή των αξόνων.

Παράδειγμα 3.11. Μελετήστε και σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων για την εξίσωση $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$.

Επίλυση. Αυτή είναι η εξίσωση για τον αρμονικό ταλαντωτή. Γράφουμε

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = -\omega^2 x.$$

Το σύστημα έχει ένα σημείο ισορροπίας το οποίο βρίσκεται αν θέσουμε $\dot{x} = 0$, $\dot{y} = 0 \Rightarrow (x, y) = (0, 0)$. Οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων δίνονται από την

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\omega^2 x}{y} \Rightarrow \int y dy + \int \omega^2 x dx = 0 \Rightarrow y^2 + \omega^2 x^2 = C.$$

Για κάθε τιμή της παραμέτρου C παίρνουμε μία καμπύλη, η οποία είναι έλλειψη. Οι ελλείψεις περιβάλλουν το σημείο ισορροπίας $(0,0)$ (Σχήμα 3.5).

□

Παράδειγμα 3.12. Μελετήστε το διάγραμμα φάσεων για την εξίσωση $\ddot{x} - \omega^2 x = 0$.

Επίλυση. Γράφουμε

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = \omega^2 x.$$

Το σύστημα έχει ένα σημείο ισορροπίας το οποίο βρίσκεται αν θέσουμε $\dot{x} = 0, \dot{y} = 0 \Rightarrow (x, y) = (0, 0)$. Οι καμπύλες του διαγράμματος φάσεων δίνονται από την

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\omega^2 x}{y} \Rightarrow \int y dy - \int \omega^2 x dx = 0 \Rightarrow y^2 - \omega^2 x^2 = C.$$

Για κάθε τιμή της παραμέτρου $C \neq 0$ παίρνουμε μία καμπύλη, η οποία είναι υπερβολή, στο διάγραμμα φάσεων. Για $C = 0$ παίρνουμε ευθείες ($y = \pm \omega x$) που παριστάνουν φασικές καμπύλες οι οποίες τέμνονται στο σημείο ισορροπίας $(0, 0)$.

□

3.3 Μη γραμμικά συστήματα

Έστω το μη γραμμικό σύστημα n εξισώσεων

$$\dot{x} = f(x), \quad (3.55)$$

όπου x είναι το διάνυσμα των n μεταβλητών και f είναι διάνυσμα n συναρτήσεων. Για παράδειγμα, για ένα σύστημα δύο εξισώσεων έχουμε τη μορφή

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2) \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2). \end{aligned}$$

Θεωρούμε ένα σημείο ισορροπίας του συστήματος x_0 και τον ιακωβιανό πίνακα υπολογισμένο στο σημείο ισορροπίας (υποθέτουμε σύστημα δύο εξισώσεων)

$$Df(x_0) = \begin{bmatrix} df_1/dx_1 & df_1/dx_2 \\ df_2/dx_1 & df_2/dx_2 \end{bmatrix}_{x_0}.$$

Θα δούμε ότι το γραμμικό σύστημα

$$\dot{\xi} = Df(x_0)\xi, \quad \xi := x - x_0 \quad (3.56)$$

διατηρεί (στη γενική περίπτωση), κοντά στο σημείο ισορροπίας x_0 τη μορφή του διαγράμματος φάσεων του μη γραμμικού συστήματος (Hirsh et al., 2004; Jordan & Smith, 1987; Perko, 2001; Strogatz, 2000).

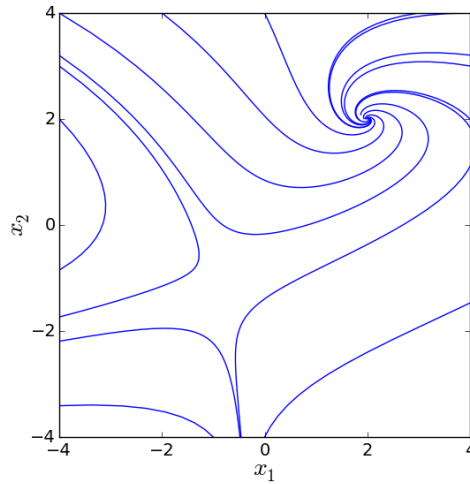
Θεώρημα. (Το θεώρημα ευσταθούς πολλαπλότητας) Έστω E ένα ανοιχτό υποσύνολο του \mathbb{R}^n που περιέχει την αρχή των αξόνων, επίσης $f \in C^1(E)$, όπου $\dot{x} = f(x)$. Υποθέτουμε ότι $f(0) = 0$ και ότι $Df(0)$ έχει k ιδιοτιμές με αρνητικό πραγματικό μέρος και $n - k$ ιδιοτιμές με θετικό πραγματικό μέρος. Τότε υπάρχει μία διαφορίσιμη πολλαπλότητα S διαστάσεως k η οποία είναι εφαπτόμενη στον ευσταθή υπόχωρο E^s του γραμμικοποιημένου συστήματος (3.56) στο σημείο 0 τέτοια ώστε για κάθε αρχική συνθήκη $x_0 \in S$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0.$$

Επίσης, υπάρχει μία πολλαπλότητα U διαστάσεως $n - k$ εφαπτόμενη στον ασταθή υπόχωρο E^u του γραμμικοποιημένου συστήματος στο σημείο 0 τέτοια ώστε για κάθε αρχική συνθήκη $x_0 \in U$

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} x(t) = 0.$$

Οι πολλαπλότητες S και U είναι αναλλοίωτες στις εξισώσεις κίνησης.



Σχήμα 3.6: Διάγραμμα φάσεων για το μη γραμμικό πρόβλημα του παραδείγματος. Έχουμε μία ευσταθή εστία και ένα σαγματικό σημείο.

Με βάση το παραπάνω θεώρημα μπορούμε να διατυπώσουμε την πρόταση ότι, αν ένα σημείο ισορροπίας έχει όλες τις ιδιοτιμές με μη-μηδενικό πραγματικό μέρος (οπότε λέγεται *υπερβολικό σημείο ισορροπίας*), τότε η συμπεριφορά του μη γραμμικού συστήματος στην περιοχή του σημείου ισορροπίας είναι τοπολογικά ισοδύναμη με τη συμπεριφορά του γραμμικοποιημένου συστήματος.

Παράδειγμα 3.13. Βρείτε τα σημεία ισορροπίας και σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων του μη γραμμικού συστήματος

$$\dot{x}_1 = x_1(1 - x_2) + 2, \quad \dot{x}_2 = x_1 - x_2.$$

Επίλυση. Θέτουμε $f_1 = x_1(1 - x_2) + 2$, $f_2 = x_1 - x_2$. Τα σημεία ισορροπίας βρίσκονται ως

$$f_2 = 0 \Rightarrow x_1 - x_2 = 0 \Rightarrow x_1 = x_2$$

$$f_1 = 0 \Rightarrow x_1(1 - x_2) + 2 = 0 \Rightarrow x_1^2 - x_1 - 2 = 0 \Rightarrow x_1 = -1, 2.$$

Άρα έχουμε τα σημεία $(-1, -1)$ και $(2, 2)$.

Ο πίνακας του γραμμικοποιημένου συστήματος είναι

$$\begin{bmatrix} df_1/dx_1 & df_1/dx_2 \\ df_2/dx_1 & df_2/dx_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - x_2 & -x_1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Για το σημείο $(-1, -1)$ ορίζουμε $\xi_1 = x_1 + 1$, $\xi_2 = x_2 + 1$ και έχουμε το γραμμικοποιημένο σύστημα

$$\begin{bmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \dot{\xi}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του είναι $\lambda_{1,2} = (1 \pm \sqrt{13})/2$, άρα το σημείο είναι σαγματικό. Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι $(1, (\sqrt{13}-3)/2)$ και ορίζουν αντίστοιχα τον ασταθή και ευσταθή υπόχωρο του γραμμικοποιημένου συστήματος.

Για το σημείο $(2, 2)$ ορίζουμε $\xi_1 = x_1 - 2$, $\xi_2 = x_2 - 2$ και έχουμε το γραμμικοποιημένο σύστημα

$$\begin{bmatrix} \dot{\xi}_1 \\ \dot{\xi}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του είναι $\lambda_{1,2} = -1 \pm i\sqrt{2}$, άρα το σημείο ισορροπίας είναι μία ευσταθής εστία. Η φορά περιστροφής των σπειρών μπορεί να βρεθεί ως εξής. Στις γραμμικοποιημένες εξισώσεις θεωρούμε, π.χ., $\xi_2 = 0$, $\xi_1 > 0$ (δηλ., είμαστε στον θετικό άξονα ξ_1) και βρίσκουμε $\dot{\xi}_1 < 0$, $\dot{\xi}_2 > 0$, άρα η κίνηση επάνω στη σπείρα είναι αντίθετη της φοράς των δεικτών του ρολογίου.

□

3.4 Μελέτη

3.4.1 Ασκήσεις

Άσκηση 3.1. *Τυχαίο γραμμικό σύστημα*

Θεωρήστε το γραμμικό σύστημα

$$\dot{x}_1 = ax_1 + bx_2, \quad \dot{x}_2 = cx_1 + dx_2.$$

Κληρώστε 4 ακέραιους αριθμούς από το -10 έως το 10 και θεωρήστε ότι οι αριθμοί που κληρώθηκαν δίνουν τις τιμές των a, b, c, d . Βρείτε το είδος και την ευστάθεια του σημείου ισορροπίας για το γραμμικό σύστημα που κληρώσατε. Σχεδιάστε, με μολύβι, με όσο καλύτερη ακρίβεια μπορείτε το διάγραμμα φάσεων (δείξτε με σαφήνεια τον ασταθή και ευσταθή υπόχωρο).

Άσκηση 3.2. *Διαγωνοποίηση πίνακα γραμμικού συστήματος - σάγμα*

Για τα γραμμικά συστήματα του παραδείγματος 3.5 σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων στις μεταβλητές (x_1, x_2) και επίσης στις (y_1, y_2) .

Άσκηση 3.3. *Πίνακας συστήματος για κίνηση φορτίου σε μαγνητικό πεδίο*

Το σύστημα Εξ. (4.6) στο Κεφ. 4 δίνει την ταχύτητα φορτίου σε μαγνητικό πεδίο. Βρείτε τη γενική λύση μελετώντας τον πίνακα του συστήματος. Κάνετε το ίδιο για το σύστημα Εξ. (4.47) όπου περιλαμβάνεται και τριβή.

Άσκηση 3.4. *Γραμμικό σύστημα*

Μελετήστε το ακόλουθο γραμμικό σύστημα

$$\dot{x}_1 = x_1 + x_2, \quad \dot{x}_2 = -x_1 + 3x_2.$$

Βρείτε τους αναλλοίωτους υποχώρους. Σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων.

Άσκηση 3.5. *Μη-γραμμικό σύστημα με τετραγωνικό όρο*

Βρείτε τα σημεία ισορροπίας και σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων του μη γραμμικού συστήματος

$$\dot{x}_1 = x_1x_2 - 4, \quad \dot{x}_2 = x_1 - x_2.$$

3.4.2 Εργασίες

Εργασία 3.1. *Γραμμικό σύστημα*

Για το ακόλουθο γραμμικό σύστημα

$$\dot{x} = -x - 3y, \quad \dot{y} = 2y,$$

(α) Βρείτε τα σημεία ισορροπίας, (β) βρείτε τους αναλλοίωτους υποχώρους και (γ) σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων λύνοντας αριθμητικά το σύστημα.

Βιβλιογραφία: (Hirsh et al., 2004).

Εργασία 3.2. Αναρμονικός ταλαντωτής

Οι παρακάτω εξίσωση περιγράφει έναν αναρμονικό ταλαντωτή:

$$\ddot{x} = -x + \epsilon x^3, \quad \epsilon > 0.$$

(α) Βρείτε τα σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ευστάθειά τους. (β) Γύρω από ένα από τα ασταθή σημεία ισορροπίας σχεδιάστε τον ευσταθή και ασταθή υπόχωρο του γραμμικού συστήματος. (γ) Σχεδιάστε το διάγραμμα φάσεων. (δ) Περιγράψτε (και ποσοτικά) τη σχέση του συστήματος με τον αρμονικό ταλαντωτή και με το απλό εκκρεμές.

[Υπόδειξη: Κάνετε όλα τα σχέδια με υπολογιστή. Χρησιμοποιήστε μία τιμή για το ϵ της επιλογής σας.]

Βιβλιογραφία: (Jordan & Smith, 1987).

3.4.3 Αλγόριθμοι / Κώδικες

```
% - - - - -
% MATLAB code
% - - - - -

% - - - - -
% solution of a linear system of two equations
% plot the phase portrait
% - - - - -

% define the set of time instances for plotting data points
times = 0:0.1:5;

hold on

% use a set of initial conditions
for x0=-3:3
    [time, xy] = ode45('node_func',times,[x0 3]);
    plot(xy(:,1),xy(:,2),'-b')
end

for x0=-4:3
    [time, xy] = ode45('node_func',times,[x0 -3]);
    plot(xy(:,1),xy(:,2),'-b')
end

% format the graph
xmin = -3; xmax = 3;
ymin = -3; ymax = 3;
axis([xmin xmax ymin ymax]);
axis equal;
box on;
xlabel('x','FontSize',18);
ylabel('y','FontSize',18);
set(gca,'XTick',xmin:1:xmax,'FontSize',18);
set(gca,'YTick',ymin:1:ymax,'FontSize',18);

hold off
```

```

% print the graph
%print('-depsc','dynsys')

% function for a linear system of equations
function rhs = node_func( t, xx )

x1 = xx(1);
x2 = xx(2);

xdot = x1-2*x2;
ydot = 3*x1-4*x2;

rhs = [xdot; ydot];

end

# - - - - -
# python code
# - - - - -
"""
find solution for a dynamical system (2x2)
and render phase portrait
Plot lines in real-time: ask for initial condition and plot - repeatedly
"""

from scipy.integrate import odeint
from numpy import array,linspace
import matplotlib.pyplot as plt          # for plotting commands

# system of two ODEs
def deriv(y,t): # return derivatives of the array y
    return array([ 2*y[0]*(1.0-y[1]), y[0]-y[1] ])

# Main program

# prepare graph
plt.figure(figsize=(6,6))
plt.xlabel(r'$x$',fontsize=20,labelpad=0)
plt.ylabel(r'$y$',fontsize=20,labelpad=0)
xmin = -4.0; xmax = 4.0
ymin = -4.0; ymax = 4.0
dx = 2.0; dy = 2.0
plt.xticks(plt.arange(xmin,xmax+dx,dx),fontsize=14)
plt.yticks(plt.arange(ymin,ymax+dy,dy),fontsize=14)

```

```

plt.axis([xmin,xmax,ymin,ymax])
plt.ion()
plt.show()

while True:

# input initial condition
    init = input('Give initial condition x,y (0,0 to end): ')
    if init[0] == 0.0 and init[1] == 0.0: break
    yinit = array(init)          # initial values
    #time_interval = input('Give time interval t0,t1 (same to end): ')
    #if time_interval[0] == time_interval[1]: break
    time_interval = (0.0,5.0)
    ntime = 100      # number of points on time interval
    time = linspace(time_interval[0],time_interval[1],ntime)

# integrate ODEs
    y = odeint(deriv,yinit,time)
    print "Final point: ", y[ntime-1,0],"",y[ntime-1,1]

# discard points outside plotting interval
    yp1 = []
    yp2 = []
    for iline in range(ntime):
        if abs(y[iline,0]) > 1.e4 or abs(y[iline,1]) > 1.e4:
            break
        else:
            yp1.append(y[iline,0])
            yp2.append(y[iline,1])

# plot line
    plt.plot(yp1,yp2,'-b')
    plt.pause(0.01)

#savefig('plot1.png', dpi=96)

```

Βιβλιογραφία

- Hale, J. K. (1994). *Dynamics and bifurcations*. Springer.
- Hirsh, M. W., Smale, S., & Devaney, R. L. (2004). *Differential equations, dynamical systems & an introduction to chaos*. Elsevier Academic Press.
- Jordan, D. W., & Smith, P. (1987). *Nonlinear ordinary differential equations*. Oxford: Oxford University Press.
- Perko, L. (2001). *Differential equations and dynamical systems* (Third ed.). New York: Springer.
- Strogatz, S. (2000). *Nonlinear dynamics and chaos*. Westview Press.
- Αλικάκος, Ν. Δ., & Καλογερόπουλος, Γ. Η. (2003). *Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις*. Αθήνα: Σύγχρονη Εποχή.

Κεφάλαιο 4

Δυναμική Φορτίων - Δυναμική Δινών

Σύνοψη

Μελετάμε την κίνηση φορτίων υπό την επίδραση ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου. Βρίσκουμε λύσεις για την περίπτωση που τα φορτισμένα σώματα κινούνται σε επίπεδο κάθετο σε ομογενές μαγνητικό πεδίο. Οι τροχιές των σωμάτων είναι ιδιαίτερα διαφορετικές από τις τροχιές σωμάτων που συνήθως μελετώνται στην κλασική μηχανική. Μας δίνεται η ευκαιρία να κάνουμε μελέτη των λύσεων (τροχιών κίνησης) μέσω των διατηρήσιμων ποσοτήτων των εξισώσεων κίνησης.

Ένα πρόβλημα παρόμοιο στη μαθηματική του περιγραφή με το παραπάνω είναι αυτό της κίνησης αλληλεπιδρυσών δινών. Έχουμε συνήθεις δίνες σε ρευστά, όμως δίνες εμφανίζονται και σε πολλά άλλα συστήματα, ιδιαίτερα αυτά που μελετάει η Φυσική συμπυκνωμένης ύλης, π.χ., υπερρευστά, μαγνητικά υλικά κλπ. Όταν οι δίνες θεωρηθούν σημειακές οι εξισώσεις κίνησής τους είναι σε μεγάλο βαθμό ανάλογες με τις εξισώσεις κίνησης φορτίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο. Δίνουμε τους νόμους διατήρησης και μελετάμε τις εξισώσεις κίνησης για δύο ή περισσότερες αλληλεπιδρώσες δίνες. Οι εξισώσεις κίνησης έχουν ιδιαίτερα κομψή μορφή στη χαμιλτονιανή τους μορφή, στα πλαίσια της οποίας γίνεται πιο κατανοητή η παράδοξη δυναμική των δινών.

Προαπαιτούμενη γνώση

- Διαφορικές εξισώσεις 1ης και 2ας τάξεως. Λύσεις γραμμικών διαφορικών εξισώσεων.
- Έννοιες της μηχανικής: ταχύτητα, επιτάχυνση, τροχιά σώματιου, ενέργεια, εξίσωση του Νεύτωνα.
- Εξισώσεις Lagrange και Hamilton (μόνο για τις προχωρημένες παραγράφους).

4.1 Δυναμική φορτίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο

4.1.1 Φορτίο σε ηλεκτρικό πεδίο

Θεωρούμε ένα ηλεκτρικό πεδίο το οποίο είναι ένα διανυσματικό πεδίο $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r})$. Η ηλεκτρική δύναμη που ασκείται σε ένα φορτισμένο σωματίο με φορτίο q δίνεται με τη βοήθεια του ηλεκτρικού πεδίου και είναι $\mathbf{F}_E = q\mathbf{E}$ (Griffiths, 1996). Αν το φορτισμένο σωματίο έχει μάζα m τότε η εξίσωση του Νεύτωνα έχει τη μορφή

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{E}. \quad (4.1)$$

Παρατήρηση 4.1. Είναι φανερό ότι η συνιστώσα της ταχύτητας προς την κατεύθυνση του πεδίου θα αυξάνεται, δηλαδή, το φορτίο (εάν είναι θετικό, $q > 0$) θα έχει την τάση να κινηθεί προς την κατεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E} .

Οι εξισώσεις Maxwell του ηλεκτρομαγνητισμού μάς λένε ότι για το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} ισχύει $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ (αυτό πάντως ισχύει μόνο στην περίπτωση που τα μαγνητικά πεδία του περιβάλλοντος είναι ανεξάρτητα του χρόνου). Αυτό έχει ως συνέπεια ότι μπορούμε να ορίσουμε μία βαθμωτή συνάρτηση δυναμικού $\Phi = \Phi(\mathbf{r})$ τέτοια ώστε η κλίση του δυναμικού να δίνει το ηλεκτρικό πεδίο: $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$. Θα περιοριστούμε σε κίνηση στο επίπεδο xy , ώστε το δυναμικό είναι συνάρτηση $\Phi = \Phi(x, y)$. Οι εξισώσεις κίνησης (4.1) έχουν τη μορφή

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -q \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ m\ddot{y} &= -q \frac{\partial \Phi}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Το δυναμικό είναι χρήσιμο και στον ορισμό της ενέργειας του συστήματος η οποία είναι

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + q\Phi(x, y). \quad (4.3)$$

Μπορούμε να δείξουμε ότι αυτή διατηρείται στον χρόνο. Υπολογίζουμε τη χρονική παράγωγό της, λαμβάνοντας υπόψιν ότι η θέση του σωματίου (x, y) εξαρτάται από τον χρόνο. Για παράδειγμα, η ολική χρονική παράγωγος του δυναμικού είναι

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \frac{dy}{dt}.$$

Η ολική παράγωγος της ενέργειας είναι

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = m\dot{x}\ddot{x} + m\dot{y}\ddot{y} + q \frac{\partial \Phi}{\partial x} \dot{x} + q \frac{\partial \Phi}{\partial y} \dot{y} = \dot{x} \left(m\ddot{x} + q \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \dot{y} \left(m\ddot{y} + q \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) = 0.$$

Το αποτέλεσμα στην τελευταία ισότητα προκύπτει με χρήση των εξισώσεων κίνησης (4.2). Εφόσον η χρονική παράγωγος της ενέργειας είναι μηδέν για κάθε δυνατή κίνηση του φορτίου προκύπτει ότι η \mathcal{E} είναι μία σταθερή συνάρτηση.

4.1.2 Φορτίο σε μαγνητικό πεδίο

Θα υποθέσουμε τώρα ότι το φορτισμένο σωματίο μάζας m με ηλεκτρικό φορτίο q κινείται μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} . Η δύναμη που του ασκείται εξαρτάται, όχι μόνο από το μαγνητικό πεδίο, αλλά και από την ταχύτητά του \mathbf{v} και δίνεται από την (Griffiths, 1996; Goldstein, Poole Jr, & Safko, 2001)

$$\mathbf{F}_B = q \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (4.4)$$

Θα θεωρήσουμε στα παρακάτω την περίπτωση ενός σταθερού ομογενούς μαγνητικού πεδίου $\mathbf{B} = B\hat{z}$, όπου B είναι σταθερά. Χωρίς βλάβη της γενικότητας θέσαμε τον άξονα z στην κατεύθυνση του σταθερού μαγνητικού πεδίου. Θα περιοριστούμε επίσης στην περίπτωση που το φορτίο κινείται σε έναν *διδιάστατο χώρο*, δηλαδή στο επίπεδο xy το οποίο είναι κάθετο στο \mathbf{B} . Σύμφωνα με το νόμο του Νεύτωνα οι εξισώσεις κίνησης είναι

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q \mathbf{v} \times \mathbf{B} \Rightarrow \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{qB}{m} \mathbf{v} \times \hat{z}. \quad (4.5)$$

Οι εξισώσεις για τις συνιστώσες της ταχύτητας $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$ γράφονται σε απλούστερη μορφή ως

$$\begin{aligned} \dot{v}_x &= \omega_c v_y \\ \dot{v}_y &= -\omega_c v_x, \end{aligned} \quad (4.6)$$

όπου έχουμε ορίσει την ποσότητα

$$\omega_c = \frac{qB}{m} \quad (4.7)$$

η οποία λέγεται *συχνότητα κυκλότρον*.

Παρατήρηση 4.2. Μπορούμε να δείξουμε ότι το μέτρο της ταχύτητας δεν αλλάζει κατά την κίνηση φορτίου σε σταθερό μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} .

Υπολογίζουμε την παράγωγο του τετραγώνου του μέτρου της ταχύτητας $|\mathbf{v}|^2 = v^2$:

$$\frac{dv^2}{dt} = 2\mathbf{v} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} = 2\mathbf{v} \cdot (q\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = 0.$$

Στον υπολογισμό χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (4.5) για την παράγωγο της ταχύτητας και ακολούθως μία βασική ιδιότητα του τριπλού γινομένου. Το αποτέλεσμα δείχνει ότι το μέτρο της ταχύτητας $|\mathbf{v}|$ είναι σταθερό για κάθε κίνηση φορτίου που υπακούει τις εξισώσεις κίνησης.

Η μορφή των εξισώσεων (4.6) γίνεται σαφής αν γράψουμε τις δύο συνιστώσες της ταχύτητας ως μία μιγαδική μεταβλητή

$$\tilde{v} = v_x + i v_y, \quad (4.8)$$

για την οποία, χρησιμοποιώντας τις Εξ. (4.6), βρίσκουμε την εξίσωση κίνησης

$$\dot{\tilde{v}} + i\omega_c \tilde{v} = 0. \quad (4.9)$$

Πρόκειται για μία γραμμική εξίσωση 1ης τάξης και η λύση της είναι

$$\tilde{v}(t) = v_0 e^{-i(\omega_c t + \delta)} \Rightarrow \begin{cases} v_x(t) &= v_0 \cos(\omega_c t + \delta) \\ v_y(t) &= -v_0 \sin(\omega_c t + \delta) \end{cases} \quad (4.10)$$

όπου οι v_0, δ είναι πραγματικές σταθερές. Βλέπουμε ότι η ταχύτητα \mathbf{v} μεταβάλλεται περιοδικά και η v_0 δίνει το σταθερό μέτρο της. Η φάση δ καθορίζει την κατεύθυνση της αρχικής ταχύτητας. Για παράδειγμα, όταν $\delta = 0$ η αρχική ταχύτητα είναι $\mathbf{v}(t=0) = (v_0, 0)$.

Οι συντεταγμένες θέσης βρίσκονται ολοκληρώνοντας τις Εξ. (4.10) και δίνονται από τις

$$x(t) = x_0 + R \sin(\omega_c t + \delta), \quad y(t) = y_0 + R \cos(\omega_c t + \delta), \quad R = \frac{v_0}{\omega_c}, \quad (4.11)$$

όπου x_0, y_0 είναι δύο νέες σταθερές από την ολοκλήρωση. Η κίνηση είναι κυκλική γύρω από τη θέση (x_0, y_0) , την οποία μπορούμε για απλότητα να θέσουμε στην αρχή των αξόνων $(0, 0)$. Η συχνότητα περιστροφής είναι ω_c και αυτή είναι ανεξάρτητη του μέτρου της ταχύτητας v_0 .

Παρατήρηση 4.3. Η γωνιακή ταχύτητα (ή γωνιακή συχνότητα) ω_c της κυκλικής κίνησης εξαρτάται μόνο από το μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} και είναι ανεξάρτητη της ακτίνας κίνησης R .

Παράδειγμα 4.1. Ένα σωματίο κινείται ευθύγραμμα με ταχύτητα v_0 και κάποια στιγμή εφαρμόζεται ομογενές σταθερό μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} κάθετο στο διάνυσμα της ταχύτητάς του. Θα μελετήσουμε την κίνηση που θα κάνει το σωματίο.

Επίλυση. Θα θεωρήσουμε (χωρίς βλάβη της γενικότητας) ότι η αρχική ταχύτητα του σωματίου είναι $\mathbf{v}_0 = v_0 \hat{x}$ και ότι το μαγνητικό πεδίο είναι $\mathbf{B} = B \hat{z}$. Το σωματίο θα εισέλθει σε κυκλική τροχιά σύμφωνα με τις Εξ. (4.11). Η γωνιακή ταχύτητα περιστροφής θα είναι $\omega_c = qB/m$. Αν θέσουμε αρχική συνθήκη $(v_x(t=0), v_y(t=0)) = (v_0, 0)$ στις (4.10) παίρνουμε $\delta = 0$, ώστε η ταχύτητα του σωματίου είναι

$$v_x(t) = v_0 \cos(\omega_c t), \quad v_y(t) = -v_0 \sin(\omega_c t).$$

Η τροχιά του δίνεται από

$$x(t) = x_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \sin(\omega_c t), \quad y(t) = y_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \cos(\omega_c t).$$

Η ακτίνα $R = v_0/\omega_c$ της κυκλικής τροχιάς εξαρτάται από την αρχική ταχύτητα. Δηλαδή, σωματίο με μικρή αρχική ταχύτητα κάνει κυκλική τροχιά με μικρή ακτίνα ενώ σωματίο με μεγάλη αρχική ταχύτητα κάνει κυκλική τροχιά με μεγάλη ακτίνα.

□

Ερώτηση κατανόησης 4.1. Πώς εξαρτάται η ακτίνα της τροχιάς του φορτίου στο προηγούμενο παράδειγμα από την ένταση του μαγνητικού πεδίου B . Σε ποιά περίπτωση το σωματίο θα εισέλθει σε κυκλική τροχιά με μικρή ακτίνα και σε ποιά περίπτωση θα εισέλθει σε κυκλική τροχιά με μεγάλη ακτίνα;

Παρατήρηση 4.4. Η ακτίνα της κυκλικής κίνησης R είναι ανάλογη της ταχύτητας του σωματίου v_0 και αντιστρόφως ανάλογη του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου B .

Σύντομο πρόβλημα 4.1. Γράψτε την εξίσωση για τη συνιστώσα της ταχύτητας v_z από τις Εξ. (4.5) και περιγράψτε την κίνηση στη διεύθυνση z . Σε ποιά περίπτωση η κίνηση περιορίζεται στο επίπεδο xy όπως μελετήθηκε σε αυτή την παράγραφο;

4.1.3 Φορτίο σε μαγνητικό πεδίο: Νόμοι διατήρησης

Οι δύο εξισώσεις της κίνησης (4.6) γράφονται, για τη θέση (x, y) , στη μορφή

$$\frac{\ddot{x}}{\omega_c} - \dot{y} = 0, \quad \frac{\ddot{y}}{\omega_c} + \dot{x} = 0. \quad (4.12)$$

Αυτές μπορούν να γραφούν ως αναλλοίωτες χρονικές παράγωγοι

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{x}}{\omega_c} - y \right) = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{y}}{\omega_c} + x \right) = 0, \quad (4.13)$$

άρα, οι ποσότητες στις παρενθέσεις είναι διατηρήσιμες ποσότητες της κίνησης. Θα ορίσουμε τις διατηρήσιμες ποσότητες στη μορφή

$$R_x := x + \frac{\dot{y}}{\omega_c}, \quad R_y := y - \frac{\dot{x}}{\omega_c} \quad (4.14)$$

έτσι ώστε να σχετίζονται με τις συντεταγμένες της φυσικής θέσης του φορτίου. Αυτές οι ποσότητες είναι χρήσιμες για την περιγραφή της κίνησης και το διάνυσμα (R_x, R_y) λέγεται *οδηγός της κίνησης* (guiding center).

Παράδειγμα 4.2. Για την τροχιά (4.11) ο οδηγός της κίνησης μπορεί να υπολογιστεί με χρήση των Εξ. (4.10) για την ταχύτητα και (4.11) για τη θέση και είναι

$$\begin{aligned} R_x &= \left[x_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \sin(\omega_c t + \delta) \right] - \frac{v_0}{\omega_c} \sin(\omega_c t + \delta) = x_0, \\ R_y &= \left[y_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \cos(\omega_c t + \delta) \right] - \frac{v_0}{\omega_c} \cos(\omega_c t + \delta) = y_0. \end{aligned}$$

Άρα ο οδηγός κίνησης (R_x, R_y) συμπίπτει με το κέντρο της κυκλικής τροχιάς. \square

Τέλος, σημειώνουμε ότι το σύστημα έχει ενέργεια την

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) \quad (4.15)$$

η οποία περιέχει μόνο τον κινητικό όρο, ενώ η ύπαρξη μαγνητικού πεδίου δεν προσθέτει επιπλέον όρο σε αυτήν. Η ενέργεια διατηρείται στην κίνηση, όπως αποδεικνύεται αν πάρουμε τη χρονική της παράγωγο:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = m\dot{x}\ddot{x} + m\dot{y}\ddot{y} = \dot{x}(qB\dot{y}) + \dot{y}(-qB\dot{x}) = 0.$$

Στον υπολογισμό έχουμε χρησιμοποιήσει τις εξισώσεις κίνησης (4.12). Η αποσαφήνιση ότι η (4.15) δίνει πραγματικά την ενέργεια του συστήματος θα δωθεί μέσω του Λαγκρανζιανού και Χαμιλτονιανού φορμαλισμού σε επόμενη παράγραφο.

Παρατήρηση 4.5. Μπορούμε να εκμεταλλευτούμε το ασυνήθιστο γεγονός ότι οι Εξ. (4.12) έχουν τρεις τουλάχιστον διατηρήσιμες ποσότητες και να δώσουμε λύση σε προβλήματα χωρίς να χρειαστεί να ολοκληρώσουμε και πάλι τις εξισώσεις κίνησης.

Παράδειγμα 4.3. Ας υποθέσουμε ότι ένα σωματίο βρίσκεται αρχικά (για χρόνο $t = 0$) στο σημείο $x_0 := x(t = 0)$, $y_0 := y(t = 0)$ και έχει αρχική ταχύτητα $\dot{x}_0 := \dot{x}(t = 0) = 0$, $\dot{y}_0 := \dot{y}(t = 0) = 0$. Βρείτε την τροχιά του.

Επίλυση. Θα λύσουμε το πρόβλημα χρησιμοποιώντας μόνο τις διατηρήσιμες ποσότητες. Υπολογίζουμε τις τιμές τους για χρόνο $t = 0$:

$$\mathcal{E} = 0, \quad R_x = x_0, \quad R_y = y_0.$$

Επειδή η ενέργεια \mathcal{E} διατηρείται στον χρόνο έχουμε ότι για κάθε t

$$\mathcal{E} = 0 \Rightarrow \dot{x}^2 + \dot{y}^2 = 0 \Rightarrow \dot{x} = 0, \dot{y} = 0.$$

Επίσης, οι συνιστώσες του οδηγού κίνησης (4.14) έχουν την απλούστερη έκφραση $R_x = x$, $R_y = y$. Εφόσον αυτές διατηρούνται, οι συνιστώσες της θέσης (x, y) παραμένουν σταθερές, άρα η λύση είναι $x(t) = x_0$, $y(t) = y_0$ για κάθε t . \square

Παράδειγμα 4.4. Ας υποθέσουμε ότι ένα σωματίο βρίσκεται αρχικά στο σημείο $x_0 := x(t = 0) = 1$, $y_0 := y(t = 0) = 0$ και έχει αρχική ταχύτητα $\dot{x}_0 := \dot{x}(t = 0) = 0$, $\dot{y}_0 := \dot{y}(t = 0) = \omega_c$. Βρείτε την τροχιά του.

Επίλυση. Υπολογίζουμε τις τιμές των διατηρήσιμων ποσοτήτων για χρόνο $t = 0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{1}{2} m (\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2) = \frac{1}{2} m \omega_c^2 \\ R_x &= x_0 + \frac{\dot{y}_0}{\omega_c} = 2, \quad R_y = y_0 - \frac{\dot{x}_0}{\omega_c} = 0. \end{aligned}$$

Από τη διατήρηση του οδηγού της κίνησης προκύπτει

$$x + \frac{\dot{y}}{\omega_c} = 2 \Rightarrow \dot{y} = \omega_c(2 - x), \quad y - \frac{\dot{x}}{\omega_c} = 0 \Rightarrow \dot{x} = \omega_c y.$$

Από τη διατήρηση της ενέργειας \mathcal{E} και με χρήση των σχέσεων που μόλις βρήκαμε έχουμε

$$\dot{x}^2 + \dot{y}^2 = \omega_c^2 \Rightarrow (x - 2)^2 + y^2 = 1.$$

Άρα το σωματίο κάνει κυκλική κίνηση μοναδιαίας ακτίνας και με κέντρο τον οδηγό της κίνησης $(R_x, R_y) = (2, 0)$. Αυτό το παράδειγμα παρέχει μία αιτιολογία για το όνομα “οδηγός της κίνησης” το οποίο δόθηκε στο διάνυσμα (R_x, R_y) .

□

4.1.4 Φορτίο σε ομογενές ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο

Θεωρούμε ένα σωματίο μάζας m φορτισμένο με ηλεκτρικό φορτίο q το οποίο βρίσκεται υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου $\mathbf{B} = B\hat{z}$ και ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E} . Θα περιοριστούμε στην περίπτωση που το \mathbf{E} είναι κάθετο στο \mathbf{B} , δηλαδή, είναι της μορφής $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$.

Οι εξισώσεις κίνησης του σωματίου είναι (Landau & Lifshitz, 1985)

$$\begin{aligned} m \frac{dv_x}{dt} &= qB v_y + qE_x & \Rightarrow & \frac{dv_x}{dt} = \omega_c v_y + \omega_c \frac{E_x}{B} \\ m \frac{dv_y}{dt} &= -qB v_x + qE_y & \Rightarrow & \frac{dv_y}{dt} = -\omega_c v_x + \omega_c \frac{E_y}{B}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Θα μελετήσουμε την περίπτωση ομογενούς ηλεκτρικού πεδίου και θα επιλέξουμε $\mathbf{E} = E\hat{x}$, όπου το E είναι σταθερά στον χώρο και τον χρόνο. Οι εξισώσεις κίνησης γράφονται ως

$$\begin{aligned} \frac{dv_x}{dt} &= \omega_c v_y + \omega_c \frac{E}{B} \\ \frac{dv_y}{dt} &= -\omega_c v_x. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Χρησιμοποιούμε και πάλι μιγαδική μεταβλητή για την ταχύτητα $\tilde{v} = v_x + iv_y$, για την οποία η εξίσωση κίνησης είναι

$$\frac{d\tilde{v}}{dt} + i\omega_c \tilde{v} = \omega_c \frac{E}{B}. \quad (4.18)$$

Λύση είναι η

$$\tilde{v}(t) = v_x + iv_y = v_0 e^{-i(\omega_c t + \delta)} - i \frac{E}{B}, \quad (4.19)$$

όπου v_0, δ είναι πραγματικές σταθερές. Αν επιλέξουμε την τιμή $\delta = -\pi/2$ (πράγμα που αντιστοιχεί σε επιλογή της αρχής του χρόνου t), έχουμε

$$v_x(t) = v_0 \sin \omega_c t, \quad v_y(t) = v_0 \cos \omega_c t - \frac{E}{B}. \quad (4.20)$$

Προσέξτε ότι η ταχύτητα στον χρόνο $t = 0$ είναι $\mathbf{v}(t = 0) = (v_0 - E/B)\hat{y}$ (ώστε δεν έχει μέτρο ίσο με v_0). Μπορούμε, ως ειδική περίπτωση, να επιλέξουμε $v_0 = E/B$ οπότε θα έχουμε αρχική ταχύτητα $\mathbf{v}(t = 0) = 0$.

Είναι δυνατόν να δώσουμε μία πλήρη λύση του προβλήματος υπολογίζοντας τη θέση του σωματίου. Ολοκληρώνουμε τις Εξ. (4.20) και βρίσκουμε τη θέση του φορτίου

$$x(t) = x_0 + R(1 - \cos \omega_c t), \quad y(t) = y_0 + R \sin \omega_c t - \frac{E}{\omega_c} t, \quad R = \frac{v_0}{\omega_c}. \quad (4.21)$$

Οι εξισώσεις αυτές, οι οποίες δίνουν την τροχιά του φορτίου, ορίζουν το *τροχοειδές*. Στην περίπτωση που επιλέξουμε αρχική ταχύτητα μηδέν, δηλαδή, $v_0 = E/B$, παίρνουμε την *κυκλοειδή* κίνηση

$$x(t) = x_0 + R(1 - \cos \omega_c t), \quad y(t) = y_0 + R(\sin \omega_c t - \omega_c t). \quad (4.22)$$

Η κίνηση στην κατεύθυνση x είναι περιοδική με κέντρο το $x = x_0 + R$ και μέγιστη απομάκρυνση R . Στην κατεύθυνση y έχουμε έναν όρο γραμμικό στον χρόνο t και σαν συνέπεια μία μονότονη αύξηση του $y(t)$.

Ο οδηγός της κίνησης βρίσκεται αφού αντικαταστήσουμε τις (4.21), (4.20) στον ορισμό (4.14):

$$R_x = x_0 + \frac{1}{\omega_c} \left(v_0 - \frac{E}{B} \right), \quad R_y = y_0 - \frac{E}{B} t. \quad (4.23)$$

Άρα το σημείο (R_x, R_y) κινείται ευθύγραμμο και με σταθερή ταχύτητα προς την αρνητική κατεύθυνση y . Στην ειδική περίπτωση $v_0 = E/B$ η αρχική θέση είναι $(R_x, R_y) = (x_0, y_0)$. Αν επιλέξουμε την αρχή των αξόνων ώστε $x_0 = 0 = y_0$ τότε το σημείο (R_x, R_y) θα κινείται επάνω στον άξονα y .

Σύντομο πρόβλημα 4.2. Ξεκινώντας από την Εξ. (4.17) ορίστε νέα αδιάστατη μεταβλητή για τον χρόνο και επαναλάβετε την λύση της εξίσωσης που δίνεται παραπάνω.

Στη συνέχεια θα δώσουμε μία συντομότερη μελέτη του προβλήματος η οποία βασίζεται στις διατηρήσιμες ποσότητες τις οποίες βρήκαμε απουσία ηλεκτρικού πεδίου, δηλαδή, στον οδηγό κίνησης (R_x, R_y) . Οι εξισώσεις για τη θέση του φορτίου είναι

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \omega_c \dot{y} + \omega_c \frac{E}{B} \\ \ddot{y} &= -\omega_c \dot{x} \end{aligned} \quad (4.24)$$

και μπορούν να γραφούν ως

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{x}}{\omega_c} - y \right) &= \frac{E}{B} \Rightarrow \frac{dR_y}{dt} = -\frac{E}{B} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{y}}{\omega_c} + x \right) &= 0 \Rightarrow \frac{dR_x}{dt} = 0, \end{aligned}$$

όπου εισαγάγαμε τον ορισμό (4.14) για τη θέση (R_x, R_y) του οδηγού κίνησης. Οι λύσεις αυτών των εξισώσεων βρίσκονται εύκολα και είναι

$$R_x = R_x^{(0)}, \quad R_y = -\frac{E}{B} t + R_y^{(0)},$$

όπου $R_x^{(0)}, R_y^{(0)}$ είναι σταθερές που καθορίζονται από τις αρχικές συνθήκες και δίνουν τον οδηγό της κίνησης στον χρόνο $t = 0$. Αυτές οι εξισώσεις συμπίπτουν με τις (4.23) με κατάλληλη επιλογή των σταθερών.

Σημειώστε ότι ενώ το R_x είναι διατηρήσιμη ποσότητα (όπως και στην περίπτωση όπου είχαμε μόνο μαγνητικό πεδίο), το R_y δεν είναι πλέον διατηρήσιμη ποσότητα. Βλέπουμε ότι ο οδηγός της κίνησης κάνει ευθύγραμμη και ομαλή κίνηση προς την κατεύθυνση y . Η θέση του οδηγού κίνησης δεν συμπίπτει με τη θέση του σωματίου. Όμως, είναι εύλογο να υποθέσει κανείς ότι η θέση του σωματίου είναι κοντά στον οδηγό της κίνησης. Αυτή η εικόνα είναι σωστή ειδικά όταν το μαγνητικό πεδίο B είναι μεγάλο. Συμπερασματικά, η λύση που βρήκαμε υποδεικνύει ότι η κίνηση του σωματίου είναι περιορισμένη προς την κατεύθυνση x (αφού το R_x είναι σταθερό στον χρόνο), ενώ το σωματίο κινείται προς την κατεύθυνση y .

Σύμφωνα με όσα είμαστε συνηθισμένοι να σκεφτόμαστε, με βάση τους νόμους του Νεύτωνα, η επιτάχυνση είναι κατά την κατεύθυνση της δύναμης και άρα και η κίνηση θα περιμέναμε να ήταν προς την ίδια κατεύθυνση. Στο πρόβλημα όμως αυτού του κεφαλαίου το μαγνητικό πεδίο φαίνεται να έχει τελείως ανατρέψει αυτή τη λογική.

Παρατήρηση 4.6. Ένα φορτίο κινείται (κατά μέσο όρο) κάθετα στη διεύθυνση της ηλεκτρικής δύναμης $F_E = qE\hat{x}$, όταν είναι παρόν το μαγνητικό πεδίο $B\hat{z}$. Η κίνηση αυτή είναι παράδοξη σε σύγκριση με τα συνήθη προβλήματα κλασικής νευτώνειας δυναμικής.

Μπορούμε να εισαγάγουμε το ηλεκτρικό δυναμικό $\Phi(x, y)$ για να περιγράψουμε το ηλεκτρικό πεδίο E . Για την περίπτωση του σταθερού πεδίου $E = (E, 0, 0)$ το δυναμικό είναι

$$\Phi(x) = Ex \quad (4.25)$$

και μπορούμε άμεσα να επιβεβαιώσουμε ότι $E = -\nabla\Phi$. Η ενέργεια του σωματίου προκύπτει όταν στην έκφραση (4.15) προστεθεί η ενέργεια του δυναμικού του ηλεκτρικού πεδίου (4.25):

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + q\Phi(x, y) \Rightarrow \\ \mathcal{E} &= \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - qEx. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Αυτή η ενέργεια συμπίπτει με την ενέργεια (4.3) για φορτίο το οποίο βρίσκεται σε ηλεκτρικό πεδίο μόνο.

4.1.5 Λαγκρανζιανή περιγραφή

Δεδομένου ότι το σύστημα του φορτίου σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο διατηρεί την ενέργεια, θα ήταν προτιμότερο να το περιγράψουμε με τον λαγκρανζιανό φορμαλισμό. Για να γράψουμε τη Λαγκρανζιανή χρειαζόμαστε το δυναμικό $\Phi(x, y)$ του φορτίου το οποίο οφείλεται στο ηλεκτρικό πεδίο. Για το μαγνητικό πεδίο δεν έχουμε συνάρτηση δυναμικής ενέργειας, όμως θα πρέπει να εισαχθεί ένας όρος στη Λαγκρανζιανή έτσι ώστε το πεδίο B να παράγεται στις εξισώσεις κίνησης.

Η Λαγκρανζιανή για το πρόβλημά μας μπορεί να γραφεί ως (Goldstein et al., 2001)

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - q(\Phi - \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}) \quad (4.27)$$

όπου επιλέξαμε διανυσματικό συμβολισμό με $\mathbf{r} = x\hat{x} + y\hat{y}$. Το $\mathbf{A} = (A_x, A_y)$ είναι διανυσματική συνάρτηση των συντεταγμένων (x, y) , λέγεται διανυσματικό δυναμικό και θα το επιλέξουμε αργότερα.

Παράδειγμα 4.5. Για την περίπτωση ηλεκτρικού πεδίου $E = E\hat{x}$ και μαγνητικού πεδίου $B = B\hat{z}$ η Λαγκρανζιανή είναι

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + qBx\dot{y} - q\Phi. \quad (4.28)$$

Από αυτή μπορούμε να εξαγάγουμε τις εξισώσεις κίνησης

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial x} \Rightarrow m\ddot{x} = qB\dot{y} - q\partial_x\Phi \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \right) &= \frac{\partial L}{\partial y} \Rightarrow m\ddot{y} = -qB\dot{x} - q\partial_y\Phi \end{aligned}$$

οι οποίες πραγματικά συμπίπτουν με τις Εξ. (4.16). □

Ας δούμε τις εξισώσεις τις οποίες δίνει η Λαγκρανζιανή (4.27). Από τον όρο που περιέχει το διανυσματικό πεδίο \mathbf{A} θα προκύψει στις εξισώσεις Lagrange η ολική χρονική παράγωγος $d\mathbf{A}/dt$. Αυτή δίνεται με τον κανόνα της αλυσιδωτής παραγωγίσης, για παράδειγμα, έχουμε

$$\frac{dA_x}{dt} = \dot{x} \partial_x A_x + \dot{y} \partial_y A_x,$$

όπου υποθέτουμε ότι το \mathbf{A} δεν εξαρτάται εκπεφρασμένα από τον χρόνο, δηλαδή, $\partial \mathbf{A} / \partial t = 0$ (μία όμοια σχέση προκύπτει για την dA_y/dt). Για την πρώτη εξίσωση Lagrange έχουμε

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m\dot{x} + qA_x) = q\dot{\mathbf{r}} \cdot \partial_x \mathbf{A} - q \partial_x \Phi \Rightarrow m\ddot{x} + q \frac{dA_x}{dt} = q(\dot{x} \partial_x A_x + \dot{y} \partial_x A_y) - q \partial_x \Phi.$$

Τελικά παίρνουμε

$$m\ddot{x} = q\dot{y} (\partial_x A_y - \partial_y A_x) - q \partial_x \Phi. \quad (4.29)$$

Βλέπουμε ότι αν επιλέξουμε \mathbf{A} τέτοιο ώστε

$$\partial_x A_y - \partial_y A_x = B \quad (4.30)$$

τότε πραγματικά η Λαγκρανζιανή παράγει τις Εξ. (4.24). Φθάνουμε ακριβώς στο ίδιο συμπέρασμα αν εξάγουμε και την εξίσωση για τη συντεταγμένη y , η οποία είναι

$$m\ddot{y} = -q\dot{x} (\partial_x A_y - \partial_y A_x) - q \partial_y \Phi.$$

Για την περίπτωση του φορτίου στο παράδειγμα 4.5 η Λαγκρανζιανή (4.28) λαμβάνεται με την επιλογή $\mathbf{A} = B(0, x, 0)$. Για αυτό το \mathbf{A} πραγματικά ικανοποιείται η (4.30) και δίνει ένα σταθερό B . Μία διαφορετική επιλογή για το διανυσματικό πεδίο είναι η $\mathbf{A} = B(-y, 0, 0)$, για την οποία επίσης ικανοποιείται η Εξ. (4.30). Έχουμε λοιπόν μία διαφορετική αλλά ισοδύναμη μορφή για τη Λαγκρανζιανή η οποία είναι η

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - q(\Phi + y\dot{x}).$$

Μία τρίτη, πιο συμμετρική μορφή, προκύπτει από την επιλογή $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$, η οποία επίσης ικανοποιεί την Εξ. (4.30). Η συμμετρική στις συντεταγμένες x, y Λαγκρανζιανή που προκύπτει είναι

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{qB}{2} (x\dot{y} - y\dot{x}) - q\Phi. \quad (4.31)$$

4.1.6 Χαμιλτονιανή περιγραφή

Οι συζυγείς κανονικές ορμές για τη θέση (x, y) του φορτίου θα πρέπει να υπολογιστούν από τον γενικό τύπο (Goldstein et al., 2001)

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} - \frac{qB}{2} y, \quad p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + \frac{qB}{2} x, \quad (4.32)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη συμμετρική μορφή της Λαγκρανζιανής (4.31). Άρα, η συνήθης ορμή, την οποία θα ονομάσουμε $\boldsymbol{\pi} = (m\dot{x}, m\dot{y})$, διαφέρει από την κανονική ορμή $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ στην Εξ. (4.32). Αυτό περιπλέκει αρκετά την περιγραφή του συστήματος, ταυτοχρόνως όμως το κάνει ιδιαίτερα ενδιαφέρον.

Η Χαμιλτονιανή που προκύπτει από τη Λαγκρανζιανή (4.31) είναι η

$$H = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y - L = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + q\Phi. \quad (4.33)$$

Οι Εξ. (4.32) δίνουν τις ταχύτητες

$$\dot{x} = \frac{1}{m} \left(p_x + \frac{qB}{2} y \right), \quad \dot{y} = \frac{1}{m} \left(p_y - \frac{qB}{2} x \right) \quad (4.34)$$

Αντικαθιστούμε τις ταχύτητες στην Χαμιλτονιανή ώστε αυτή γράφεται ως συνάρτηση των θέσεων και κανονικών ορμών, στη μορφή $H = H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, ως

$$H = \frac{1}{2m} \left[\left(p_x + \frac{qB}{2} y \right)^2 + \left(p_y - \frac{qB}{2} x \right)^2 \right] + q\Phi. \quad (4.35)$$

Οι εξισώσεις Hamilton για τις συντεταγμένες συμπίπτουν με τις (4.34):

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{m} \left(p_x + \frac{qB}{2} y \right), \quad \dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{1}{m} \left(p_y - \frac{qB}{2} x \right). \quad (4.36)$$

Οι εξισώσεις Hamilton για τις ορμές προκύπτουν από τους γενικούς τύπους του χαμιλτονιανού φορμαλισμού ως εξής:

$$\begin{aligned} \dot{p}_x &= -\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{qB}{2m} \left(p_y - \frac{qB}{2} x \right) - q \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ \dot{p}_y &= -\frac{\partial H}{\partial y} = -\frac{qB}{2m} \left(p_x + \frac{qB}{2} y \right) - q \frac{\partial \Phi}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Σύντομο πρόβλημα 4.3. Επιβεβαιώστε, κάνοντας τους σχετικούς υπολογισμούς, ότι οι εξισώσεις Hamilton (4.37) συμπίπτουν με τις εξισώσεις κίνησης του φορτίου (4.24).

Παράδειγμα 4.6. Γράψτε τις εξισώσεις (4.37) ως εξισώσεις κίνησης του οδηγού της κίνησης (R_x, R_y) .

Επίλυση. Παρατηρούμε ότι

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{qB}{2} \frac{\partial H}{\partial p_y} + q \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad \frac{\partial H}{\partial y} = \frac{qB}{2} \frac{\partial H}{\partial p_x} + q \frac{\partial \Phi}{\partial y}.$$

Ωστε οι εξισώσεις Hamilton δίνουν

$$\begin{aligned} -\dot{p}_x &= -\frac{qB}{2} \dot{y} + q \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{qB}{2} y - p_x \right) = q \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ -\dot{p}_y &= \frac{qB}{2} \dot{x} + q \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{qB}{2} x + p_y \right) = -q \frac{\partial \Phi}{\partial y}. \end{aligned}$$

Οι ποσότητες στην ολική παράγωγο σχετίζονται με τις συντεταγμένες του οδηγού της κίνησης: $\frac{qB}{2} x + p_y = m\omega_c R_x$, $\frac{qB}{2} y - p_x = m\omega_c R_y$. Ωστε παίρνουμε για τον οδηγό της κίνησης

$$\frac{dR_x}{dt} = \frac{1}{B} \frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad \frac{dR_y}{dt} = -\frac{1}{B} \frac{\partial \Phi}{\partial y}.$$

□

4.1.7 Κίνηση ζεύγους φορτίων σε μαγνητικό πεδίο

Γιά να περιγράψουμε περισσότερα από ένα φορτισμένα σωμάτια τα οποία βρίσκονται σε μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = B\hat{z}$ θα πρέπει να γενικεύσουμε τη Λαγκρανζιανή (4.31). Θεωρούμε N σωμάτια με ίδια μάζα m , φορτία q_i και διανύσματα θέσης (x_i, y_i) . Γράφουμε τη Λαγκρανζιανή η οποία είναι το άθροισμα όρων όπως η Λαγκρανζιανή (4.31) για το κάθε φορτίο:

$$L = \frac{1}{2} m \sum_i (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) + \frac{B}{2} \sum_i q_i (x_i \dot{y}_i - y_i \dot{x}_i) - V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (4.38)$$

όπου ο δείκτης i παίρνει τις τιμές $i = 1, \dots, N$. Έχουμε επίσης θεωρήσει έναν επιπλέον όρο ο οποίος περιγράφει αλληλεπίδραση μεταξύ των φορτίων. Αυτός είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ το οποίο θεωρούμε ότι εξαρτάται μόνο από τις αποστάσεις μεταξύ ζευγών σωματίων

$$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}. \quad (4.39)$$

Η δυναμική ενέργεια V θα περιέχει ένα άθροισμα όρων, έναν για κάθε ζεύγος αλληλεπιδρώντων φορτίων.

Ας περιοριστούμε στην περίπτωση ενός ζεύγους φορτίων. Η Λαγκρανζιανή είναι

$$L = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^2 (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) + \frac{B}{2} \sum_{i=1}^2 q_i (x_i \dot{y}_i - y_i \dot{x}_i) - V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (4.40)$$

Έχουμε τις τέσσερις εξισώσεις Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} \right) &= \frac{\partial L}{\partial x_1} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m \dot{x}_1 - q_1 B y_1) = -\frac{\partial V}{\partial x_1} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} \right) &= \frac{\partial L}{\partial x_2} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m \dot{x}_2 - q_2 B y_2) = -\frac{\partial V}{\partial x_2} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_1} \right) &= \frac{\partial L}{\partial y_1} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m \dot{y}_1 + q_1 B x_1) = -\frac{\partial V}{\partial y_1} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_2} \right) &= \frac{\partial L}{\partial y_2} \Rightarrow \frac{d}{dt} (m \dot{y}_2 + q_2 B x_2) = -\frac{\partial V}{\partial y_2}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Για τη δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης έχουμε $V = V(\ell)$ όπου

$$\ell = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}.$$

Ισχύει

$$\frac{\partial V}{\partial x_1} = V'(\ell) \frac{\partial \ell}{\partial x_1} = V'(\ell) \frac{x_1 - x_2}{\ell}, \quad \frac{\partial V}{\partial x_2} = V'(\ell) \frac{\partial \ell}{\partial x_2} = V'(\ell) \frac{x_2 - x_1}{\ell},$$

άρα έχουμε $\partial V / \partial x_1 = -\partial V / \partial x_2$ και επίσης ισχύει $\partial V / \partial y_1 = -\partial V / \partial y_2$. Αν προσθέσουμε τις δύο τελευταίες εξισώσεις (4.41) και τις δύο πρώτες βρίσκουμε τις εξής δύο σχέσεις

$$\frac{d}{dt} \left(x_1 + x_2 + \frac{\dot{y}_1}{\omega_1} + \frac{\dot{y}_2}{\omega_2} \right) = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(y_1 + y_2 - \frac{\dot{x}_1}{\omega_1} - \frac{\dot{x}_2}{\omega_2} \right) = 0, \quad \omega_i := \frac{q_i B}{m}. \quad (4.42)$$

Ορίζουμε τον οδηγό της κίνησης (R_x, R_y) για ένα ζεύγος φορτίων ως

$$R_x := \frac{1}{2} (x_1 + x_2) + \frac{\dot{y}_1}{2\omega_1} + \frac{\dot{y}_2}{2\omega_2}, \quad R_y := \frac{1}{2} (y_1 + y_2) - \frac{\dot{x}_1}{2\omega_1} - \frac{\dot{x}_2}{2\omega_2} \quad (4.43)$$

και οι Εξ. (4.42) αποδεικνύουν ότι αυτές οι δύο ποσότητες είναι διατηρήσιμες. Το σημείο (R_x, R_y) δίνει ένα μέτρο της μέσης θέσης του ζεύγους φορτίων το οποίο έχει την ιδιότητα ότι παραμένει σταθερό στο χρόνο απουσία εξωτερικών δυνάμεων.

Παρατήρηση 4.7. Ένα ζεύγος σωμάτων με φορτία q_1, q_2 το οποίο βρίσκεται μέσα σε ομογενές μαγνητικό πεδίο κινούνται έτσι ώστε το σημείο που ορίζει ο οδηγός της κίνησής τους (4.43) να παραμένει σταθερό.

Η ενέργεια συστήματος φορτίων είναι το άθροισμα των κινητικών ενεργειών των φορτίων με την προσθήκη της ενέργειας αλληλεπίδρασης V :

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m \sum_i (\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2) + V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (4.44)$$

και είναι φυσικά μία διατηρήσιμη ποσότητα.

Σύντομο πρόβλημα 4.4. Δείξτε ότι η ενέργεια (4.44) για την περίπτωση δύο φορτίων διατηρείται από τις εξισώσεις κίνησης (4.41).

Παράδειγμα 4.7. Ας δούμε την ειδική περίπτωση όπου οι μάζες των φορτίων είναι μηδενικές, $m = 0$. Θεωρούμε μία δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης της μορφής

$$V(\ell) = -q_1 q_2 \ln(\ell). \quad (4.45)$$

Θα βρούμε τις εξισώσεις κίνησης.

Επίλυση. Η δυναμική ενέργεια (4.45) περιγράφει μία απωστική αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο φορτίων. Αυτό συμβαίνει διότι είναι φθίνουσα συνάρτηση της απόστασης μεταξύ τους, άρα η δύναμη θα τείνει να απομακρύνει τα φορτία το ένα από το άλλο (θυμηθείτε ότι η δύναμη ορίζεται σαπό τον νόμο του Νεύτωνα ως η παράγωγος της δυναμικής ενέργειας με ένα αρνητικό πρόσημο).

Θα γράψουμε τις εξισώσεις κίνησης για αυτήν την περίπτωση:

$$\frac{\partial V}{\partial x_1} = -q_1 q_2 \frac{x_1 - x_2}{\ell^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_2}, \quad \frac{\partial V}{\partial y_1} = -q_1 q_2 \frac{y_1 - y_2}{\ell^2} = -\frac{\partial V}{\partial y_2}.$$

Οι Εξ. (4.41) γίνονται

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \frac{q_2}{B} \frac{y_1 - y_2}{\ell^2}, & \dot{x}_2 &= -\frac{q_1}{B} \frac{y_1 - y_2}{\ell^2}, \\ \dot{y}_1 &= -\frac{q_2}{B} \frac{x_1 - x_2}{\ell^2}, & \dot{y}_2 &= \frac{q_1}{B} \frac{x_1 - x_2}{\ell^2}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Θα δούμε σε επόμενη παράγραφο ότι αυτές οι εξισώσεις κίνησης έχουν την ίδια μορφή με τις εξισώσεις κίνησης δύο αλληλεπιδρουσών δινών.

□

4.1.8 Δύναμη τριβής στην κίνηση φορτίου

Ένα φυσικό σύστημα υπόκειται συνήθως σε αλληλεπιδράσεις οι οποίες τείνουν να μειώσουν την ενέργειά του. Αυτήν τη διαδικασία την περιγράφουμε πολλές φορές με την εισαγωγή φαινομενολογικών δυνάμεων τις οποίες ονομάζουμε *δυνάμεις τριβής*.

Παράδειγμα 4.8. Οι εξίσωση κίνησης σωματίου μάζας m το οποίο κάνει αρμονική ταλάντωση υπό την επίδραση δύναμης ελατηρίου ανάλογης της απομάκρυνσής του από θέση ισορροπίας $F = -kx$ σε μία διάσταση είναι $m\ddot{x} + kx = 0$. Αν το σωματίο υπόκειται σε δύναμη τριβής, αυτή παρατηρείται συνήθως ότι είναι ανάλογη της ταχύτητάς του. Η εξίσωση κίνησής του τότε είναι

$$m\ddot{x} + \alpha\dot{x} + kx = 0,$$

όπου α είναι θετική σταθερά. Η κίνηση που περιγράφει αυτή η εξίσωση είναι ταλάντωση της οποίας το πλάτος μειώνεται με τον χρόνο. □

Για να μελετήσουμε την επίδραση δυνάμεων τριβής στην κίνηση φορτίου μέσα σε μαγνητικό πεδίο πρέπει να προσθέσουμε έναν κατάλληλο όρο στις Εξ. (4.24). Αυτός μπορεί να έχει τη μορφή $-\alpha\dot{x}$ στο δεξιό μέλος της πρώτης εξίσωσης και $-\alpha\dot{y}$ για τη δεύτερη εξίσωση, όπου α είναι μία θετική σταθερά που ονομάζεται σταθερά τριβής. Γράφουμε τις νέες εξισώσεις ως εξής (Papanicolaou & Tomaras, 1991)

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= qB\dot{y} + qE - \alpha\dot{x} \\ m\ddot{y} &= -qB\dot{x} - \alpha\dot{y}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Οι δυνάμεις τριβής θα πρέπει (εκ του ορισμού τους) να μειώνουν την ενέργεια ενός κινούμενου σωματίου. Θα δείξουμε ότι η ενέργεια (4.26) του συστήματος μειώνεται με τον χρόνο όταν ισχύουν οι Εξ. (4.47). Παίρνουμε τη χρονική παράγωγο της ενέργειας

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = m\dot{x}\ddot{x} + m\dot{y}\ddot{y} - qE\dot{x}.$$

Χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις κίνησης

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \dot{x}(qB\dot{y} + qE - \alpha\dot{x}) + \dot{y}(-qB\dot{x} - \alpha\dot{y}) - qE\dot{x} = -\alpha(\dot{x}^2 + \dot{y}^2),$$

ώστε βρίσκουμε ότι $\mathcal{E}/dt < 0$ όταν κινείται το σωματίο (όταν $\dot{x}^2 + \dot{y}^2 \neq 0 \Leftrightarrow \dot{x} = 0 = \dot{y}$).

Παρατήρηση 4.8. Η ενέργεια ενός κινούμενου φορτισμένου σωματίου σε μαγνητικό πεδίο στο οποίο αρκούνται δυνάμεις τριβής, όπως στις Εξ. (4.47), θα μειώνεται συνεχώς ώσπου να ακινητοποιηθεί το φορτισμένο σωματίο.

Μπορούμε να γράψουμε τις Εξ. (4.47) στην εξής μορφή:

$$\dot{R}_x = -\frac{\alpha}{qB}\dot{y}, \quad \dot{R}_y = -\frac{E}{B} + \frac{\alpha}{qB}\dot{x}. \quad (4.48)$$

Αυτό το σύστημα εξισώσεων θα μπορούσε να λυθεί, όμως εδώ θα περιορισθούμε στη συμπεριφορά του συστήματος για μεγάλους χρόνους. Στην τελική κατάσταση (δηλαδή, για $t \rightarrow \infty$) θα υποθέσουμε ότι έχουμε $\ddot{x} = 0$, $\ddot{y} = 0$ και άρα έχουμε για τα \dot{x} , \dot{y} τις εξής αλγεβρικές εξισώσεις

$$\dot{y} - \frac{\alpha}{qB}\dot{x} = -\frac{E}{B}, \quad \dot{x} + \frac{\alpha}{qB}\dot{y} = 0.$$

Αυτές λύνονται με απλό τρόπο και παίρνουμε

$$\dot{x} = \frac{\alpha(qE)}{(qB)^2 + \alpha^2}, \quad \dot{y} = -\frac{(qE)(qB)}{(qB)^2 + \alpha^2}. \quad (4.49)$$

Αυτές οι εξισώσεις δίνουν την ταχύτητα του σωματίου όταν αυτή είναι σταθερή, όπως υποθέσαμε ότι συμβαίνει για μεγάλους χρόνους.

Για λόγους ομοιομορφίας με τα αποτελέσματα των προηγούμενων παραγράφων θα μελετήσουμε τον οδηγό της κίνησης (R_x, R_y) . Αντικαθιστούμε το αποτέλεσμα για τα \dot{x} , \dot{y} στις εξισώσεις κίνησης για να βρούμε τελικά

$$\dot{R}_x = \frac{\alpha(qE)}{(qB)^2 + \alpha^2}, \quad \dot{R}_y = -\frac{(qE)(qB)}{(qB)^2 + \alpha^2}. \quad (4.50)$$

Αυτές οι εκφράσεις συμπίπτουν με τις αντίστοιχες παραπάνω για τα \dot{x} , \dot{y} .

Αν θεωρήσουμε τώρα ως ταχύτητα του σωματίου το διάνυσμα $\mathbf{V} = (\dot{R}_x, \dot{R}_y)$ παρατηρούμε ότι το σωματίο κινείται υπό γωνία δ ως προς τον άξονα x , όπου

$$\tan \delta = \frac{\dot{R}_y}{\dot{R}_x} = -\frac{qB}{\alpha}. \quad (4.51)$$

Για την περίπτωση που η σταθερά τριβής είναι πολύ μικρή (θεωρούμε $\alpha \rightarrow 0$) βρίσκουμε $\delta = \pi/2$, δηλαδή κίνηση κατά τον άξονα y όπως είδαμε και σε προηγούμενη παράγραφο, στην αρχική μελέτη για κίνηση του φορτίου χωρίς τριβή. Όταν όμως έχουμε τριβή ($\alpha \neq 0$) τότε το σωματίο κινείται υπό γωνία $0 < \delta < \pi/2$.

4.2 Δυναμική δινών σε ρευστά και στη συμπυκνωμένη ύλη

4.2.1 Δίνες σε ρευστά και στη συμπυκνωμένη ύλη

Συνήθεις δίνες σε ρευστά

Οι δίνες είναι φυσικές οντότητες οι οποίες εμφανίζονται και παίζουν σημαντικό ρόλο σε πάρα πολλά φυσικά συστήματα. Οι πιο γνωστές δίνες είναι αυτές που εμφανίζονται στα ρευστά. Στη μηχανική ρευστών είναι γνωστό ότι οι δίνες (fluid vortices) παίζουν κεντρικό ρόλο στην περιγραφή και κατανόηση τόσο την κίνησης των ρευστών όσο και πιο περίπλοκων φαινομένων όπως η τυρβώδης ροή. Στην ατμόσφαιρα είναι γνωστοί οι στρόβιλοι οι οποίοι εμφανίζονται σε μικρές αλλά και σε εξαιρετικά μεγάλες διαστάσεις (Saffman, 1992).

Η περιγραφή της κίνησης των ρευστών και άρα και της δυναμικής των δινών βασίζεται στις εξισώσεις της μηχανικής ρευστών οι οποίες είναι μη-γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις. Απλοποίηση της περιγραφής δινών προκύπτει στην περίπτωση που θεωρήσουμε ότι κάθε δίνη είναι μακριά από κάθε άλλη και άρα μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η σημαντική κεντρική περιοχή της δίνης είναι μικρού μεγέθους σε σύγκριση με την απόσταση μεταξύ τους. Τότε μπορούμε να περιγράψουμε προσεγγιστικά τη θέση κάθε δίνης με ένα σημείο. Λέμε τότε ότι έχουμε την προσέγγιση *σημειακών δινών*.

Στην περιγραφή δινών πολύ χρήσιμη είναι μία ποσότητα η οποία λέγεται *στροβιλότητα* (vorticity, γ) και της οποίας το ολοκλήρωμα στην επιφάνεια του ρευστού

$$\Gamma = \int \gamma dx dy$$

δίνει την ισχύ της δίνης. Επιπλέον, μπορεί να δειχθεί ότι για μία δίνη οι ποσότητες

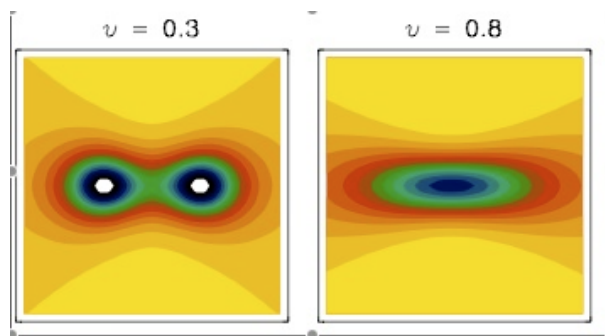
$$I_x = \int x \gamma dx dy, \quad I_y = \int y \gamma dx dy \quad (4.52)$$

είναι διατηρήσιμες. Αυτές οι ποσότητες μπορούν να θεωρηθούν ως ένας ορισμός της θέσης μίας δίνης (μετά από κατάλληλη κανονικοποίηση). Στην περίπτωση που θεωρούμε τη δίνη σημειακή μπορούμε εύκολα να δούμε ότι τα παραπάνω ολοκληρώματα δίνουν τη θέση της σημειακής δίνης πολλαπλασιασμένη με την ισχύ της.

Δίνες σε υπερρευστά

Ορισμένα ρευστά επιδεικνύουν ασυνήθιστες ιδιότητες όταν βρίσκονται σε ιδιαίτερα χαμηλές θερμοκρασίες. Η πιο εντυπωσιακή ίσως ιδιότητα τους είναι ότι ρέουν χωρίς η κίνησή τους να επιβραδύνεται από φαινόμενα τριβής. Υγρά που παρουσιάζουν αυτή την ιδιότητα ονομάζονται *υπερρευστά*. Τα σημαντικότερα υπερρευστά είναι το στοιχείο Ήλιο σε θερμοκρασίες $T < 2.7$ Kelvin το οποίο βρίσκεται τότε σε υγρή κατάσταση. Επίσης, υπερρευστά είναι οι ατμοί αλκαλικών μετάλλων (Li, Na, K, Rb, Cs) οι οποίοι παγιδεύονται με μαγνητικά πεδία και ψύχονται σε θερμοκρασίες $T \sim 10 - 100$ nanoKelvin με οπτικά (LASER) και άλλα μέσα.

Μία επιπλέον ιδιότητα των υπερρευστών είναι ότι οι δίνες που δημιουργούνται σε αυτά έχουν ισχύ η οποία είναι ακέραιο πολλαπλάσιο μιας βασικής ποσότητας ισχύος. Τέτοιες δίνες ονομάζονται κβαντισμένες (quantized vortices). Η ιδιότητα αυτή των δινών σχετίζεται πάντως με την ιδιότητα της ροής χωρίς τριβή. Τα υπερρευστά και οι δίνες τους μελετώνται με τη βοήθεια των νόμων της κβαντικής φυσικής. Σε ορισμένες περιπτώσεις το υπερρευστό καθώς και οι δίνες τους μπορούν να περιγραφούν από ένα μιγαδικό πεδίο $\Psi(x, y)$ το οποίο ονομάζεται *κυματοσυνάρτηση* του υπερρευστού. Η κυματοσυνάρτηση υπακούει μη-γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις. Οι εξισώσεις όμως αυτές διαφέρουν πολύ από εκείνες για τα συνήθη ρευστά στα οποία αναφερθήκαμε παραπάνω.



Σχήμα 4.1: Αριθμητική προσομοίωση ζευγών δινών σε υπερρευστό (ο χρωματικός κώδικας αποδίδει την πυκνότητα του υπερρευστού).

Ένα σημαντικό σημείο είναι ότι η στροβιλότητα στα υπερρευστά συνδέεται με τοπολογικά χαρακτηριστικά του πεδίου που περιγράφει το υπερρευστό, δηλαδή της κυματοσυνάρτησής του. Η ολική ισχύς $\Gamma = \int \gamma dx dy$ παίρνει διάκριτες τιμές και έχει την ερμηνεία ενός τοπολογικού αριθμού. Διατηρήσιμες ποσότητες ανάλογες των (4.52) υπάρχουν και σε αυτή την περίπτωση.

Κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις μπορούμε να κάνουμε την προσέγγιση των σημειακών δινών και στο παρόν σύστημα. Έτσι μπορούμε να απλοποιήσουμε σημαντικά τη μελέτη της δυναμικής τους.

Μαγνητικές δίνες

Παρά το ότι συνδέουμε συνήθως τις δίνες με τα ρευστά, η αλήθεια είναι ότι οι δίνες, ως μαθηματικές δομές διανυσματικών πεδίων, εμφανίζονται σε πολλά διαφορετικά συστήματα. Ένα παράδειγμα είναι τα μαγνητικά υλικά στα οποία έχουμε τις λεγόμενες *μαγνητικές δίνες*.

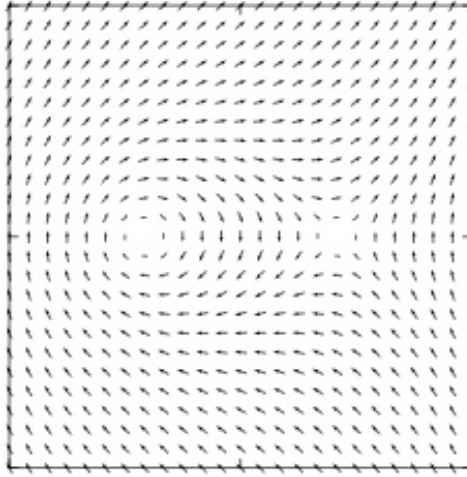
Τα μαγνητικά συστήματα τα οποία έχουν ιδιαίτερο εργαστηριακό ενδιαφέρον είναι υπέρλεπτα υμένια (φιλμ) από σιδηρομαγνητικά υλικά. Η μικροσκοπική δομή σε ένα μαγνητικό υλικό περιγράφεται από ένα διανυσματικό πεδίο $\mathbf{m}(x, y)$ το οποίο παριστάνει τη μαγνήτιση του υλικού σε κάθε σημείο (x, y) του υμενίου. Ένα ενδιαφέρον ερώτημα είναι τι δομές σχηματίζει η μαγνήτιση στο υλικό και ποιά είναι η εξέλιξή τους στον χρόνο. Για παράδειγμα, αυτό το ερώτημα αποκτά ιδιαίτερο ενδιαφέρον όσον αφορά στον μαγνητικό δίσκο ενός υπολογιστή όπου η πληροφορία αποθηκεύεται σε κάποιες ειδικές δομές της μαγνήτισης, ενώ για τα γραφτεί ή να σβηστεί μία πληροφορία θα πρέπει οι δομές αυτές να μεταβληθούν με ελεγχόμενο τρόπο.

Μία αριθμητική προσομοίωση μαγνητικών δομών οι οποίες χαρακτηρίζονται ως *μαγνητικές δίνες* παρουσιάζονται στο σχήμα 4.2. Βλέπουμε ότι στην περίπτωση των μαγνητικών δινών δεν υπάρχει ροή πραγματικού ρευστού. Συμβαίνει όμως να μπορούμε να ορίσουμε μία ποσότητα q η οποία έχει ομοιότητες με τη στροβιλότητα (γ) στα ρευστά. Η q δίνει μεταβολές της μαγνήτισης \mathbf{m} στον χώρο (χωρικές παραγώγους της \mathbf{m}) και σχετίζεται άμεσα με κάποια τοπολογικά χαρακτηριστικά της μαγνήτισης. Η ισχύς της δίνης $Q = \int q dx dy$ είναι ένας ακέραιος αριθμός, όπως συμβαίνει και με την ισχύ των δινών σε υπερρευστά.

Από τη θεωρία προκύπτουν διατηρήσιμες ποσότητες της μορφής

$$I_x = \int x q dx dy, \quad I_y = \int y q dx dy \quad (4.53)$$

οι οποίες είναι απολύτως ανάλογες με τις (4.52). Μπορεί ναδειχθεί ότι, στην περίπτωση που θεωρήσουμε ότι οι μαγνητικές δίνες είναι σημειακές, η δυναμική τους συμπεριφορά μοντελοποιείται από εξισώσεις ανάλογες με αυτές των δινών σε ρευστά.



Σχήμα 4.2: Αριθμητική προσομοίωση ζεύγους μαγνητικών δινών. Τα βελάκια αποδίδουν τον προσανατολισμό των μαγνητικών ροπών των ατόμων, δηλαδή ενός διανυσματικού πεδίου \mathbf{m} .

4.2.2 Δυναμική σημειακών δινών

Οι εξισώσεις κίνησης για αλληλεπιδρώσες δίνες, στην προσέγγιση που αυτές θεωρηθούν σημειακές, δόθηκαν από τον Helmholtz (Helmholtz, 1858). Στο μοντέλο που εισήγαγε ο Helmholtz θεωρεί ότι η στροβιλότητα περιορίζεται μέσα σε ορισμένες περιοχές που έχουν σχήμα ευθύγραμμων κυλίνδρων με ελάχιστη διάμετρο, οι οποίες λέγονται vortex filaments (νήματα δινών). Κάθε μία από αυτές τις δίνες χαρακτηρίζεται από την ισχύ της γ και σχετίζεται με την *κυκλοφορία* του ρευστού γύρω από το κέντρο της δίνης. Θα περιοριστούμε σε ροές σε δύο διαστάσεις, δηλαδή, θα θεωρήσουμε ότι η συμπεριφορά της δίνης (του vortex filament) μέσα στο υγρό ακολουθεί τη συμπεριφορά της δίνης την οποία παρατηρούμε στην επιφάνεια του υγρού. Σε αυτή την προσέγγιση λέμε ότι έχουμε *σημειακές δίνες*.

Κάθε σημειακή δίνη περιγράφεται πλήρως από τη θέση της στο επίπεδο (x, y) , ώστε ο στόχος της μελέτης είναι η κίνηση της θέσης τους στο επίπεδο. Ξεκινάμε θεωρώντας δύο δίνες οι οποίες βρίσκονται σε κοντινή απόσταση μεταξύ τους, ώστε αλληλεπιδρούν μέσω της κίνησης του ρευστού ανάμεσά τους. Οι εξισώσεις κίνησης για δύο αλληλεπιδρώσες δίνες στο επίπεδο δίνονται από τις (Kirchhoff, 1876; Aref, Rott, & Thomann, 1992)

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -\gamma_2 \frac{y_1 - y_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}, & \dot{x}_2 &= -\gamma_1 \frac{y_2 - y_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}, \\ \dot{y}_1 &= \gamma_2 \frac{x_1 - x_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}, & \dot{y}_2 &= \gamma_1 \frac{x_2 - x_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}, \end{aligned} \quad (4.54)$$

όπου $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1)$, $\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2)$ είναι οι θέσεις των δύο δινών στο επίπεδο, γ_1, γ_2 είναι οι ισχύες τους και

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| := \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (4.55)$$

είναι η απόσταση μεταξύ των δινών.

Θα γράψουμε την παρακάτω συνάρτηση η οποία έχει ειδική σημασία σε αυτό το σύστημα:

$$\mathcal{E}(\ell) = -\gamma_1 \gamma_2 \ln |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|. \quad (4.56)$$

Η \mathcal{E} εξαρτάται από τη σχετική θέση μεταξύ των δινών και έχει την ιδιότητα ότι διατηρείται κατά την κίνηση:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x_1} \dot{x}_1 + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x_2} \dot{x}_2 + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial y_1} \dot{y}_1 + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial y_2} \dot{y}_2 = 0. \quad (4.57)$$

Λέμε ότι η \mathcal{E} δίνει το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ ενός ζεύγους δινών και μάλιστα αποτελεί την ενέργεια του συστήματος. Θα μπορούσε κανείς να πει ότι το σύστημα αυτό έχει μόνο δυναμική ενέργεια (η ενέργειά του δεν έχει κινητικό όρο) και αυτή προέρχεται από αλληλεπιδράσεις μεταξύ δινών.

Μία απομονωμένη δίνη

Ας περιοριστούμε στην περιγραφή μίας απομονωμένης δίνης. Τις εξισώσεις κίνησης μπορούμε να τις εξαγάγουμε από τις (4.54) θέτοντας $\gamma_2 = 0$ και ακολούθως (για την απλοποίηση του συμβολισμού) $x = x_1$, $y = y_1$. Οι εξισώσεις κίνησης για τις μεταβλητές x, y είναι

$$\dot{x} = 0, \quad \dot{y} = 0. \quad (4.58)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις έχουν τη μορφή ιδιαίτερα απλών νόμων διατήρησης. Οι λύσεις τους είναι $x = \text{σταθ.}$, $y = \text{σταθ.}$ και οδηγούν στο συμπέρασμα ότι μία απομονωμένη δίνη (δηλαδή μία δίνη που δεν δέχεται δυνάμεις) είναι πάντα στάσιμη σε ένα ρευστό.

Οι απλοί αυτοί νόμοι διατήρησης βρίσκονται σε αντιστοιχία με τους νόμους διατήρησης για τα I_x, I_y στις Εξ. (4.52) για τους οποίους μιλήσαμε στη γενική εισαγωγή για τις δίνες. Αυτή είναι μία πρώτη ένδειξη ότι το μοντέλο που χρησιμοποιούμε αποδίδει βασικές δυναμικές ιδιότητες των δινών.

Σύντομο πρόβλημα 4.5. (Μη-στατικότητα ζεύγους δινών) Δείξτε ότι για $\gamma_1 \neq 0 \neq \gamma_2$ οι Εξ. (4.54) δεν έχουν στατικές λύσεις, δηλαδή, δεν έχουν λύσεις της μορφής $(x_1, y_1) = \text{σταθ.}$, $(x_2, y_2) = \text{σταθ.}$

4.2.3 Ζεύγος αλληλεπιδρώντων δινών: Διατηρήσιμες ποσότητες

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (4.54) βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \gamma_1 \dot{x}_1 + \gamma_2 \dot{x}_2 &= 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}(\gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2) = 0 \\ \gamma_1 \dot{y}_1 + \gamma_2 \dot{y}_2 &= 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}(\gamma_1 y_1 + \gamma_2 y_2) = 0, \end{aligned}$$

δηλαδή, οι ακόλουθες είναι διατηρήσιμες ποσότητες:

$$I_x := \gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2, \quad I_y := \gamma_1 y_1 + \gamma_2 y_2. \quad (4.59)$$

Παρατηρούμε ότι αυτές οι ποσότητες είναι ανάλογες των ποσοτήτων (4.52) οι οποίες δίνουν τη θέση μίας δίνης στη μηχανική ρευστών και επίσης των (4.53) για τη θέση μίας μαγνητικής δίνης. Άρα η απλοποιημένη θεωρία μας δίνει ένα από τα βασικά αποτελέσματα της πλήρους θεωρίας (είτε στη μηχανική ρευστών είτε στη θεωρία για μαγνητικά υλικά, είτε και σε άλλες θεωρίες).

Μπορούμε να ορίσουμε τη μέση θέση $\mathbf{R} = (R_x, R_y)$ για ζεύγος δινών ως

$$R_x = \frac{\gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad R_y = \frac{\gamma_1 y_1 + \gamma_2 y_2}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (4.60)$$

Αυτές είναι οι ποσότητες I_x, I_y κανονικοποιημένες ως προς την ολική ισχύ $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2$:

$$R_x = \frac{I_x}{\Gamma}, \quad R_y = \frac{I_y}{\Gamma}.$$

Ο ορισμός του είναι ανάλογος του ορισμού κέντρου μάζας για ένα σύστημα υλικών σωμάτων. Το διάνυσμα \mathbf{R} μπορεί να ονομαστεί *οδηγός της κίνησης* (guiding center) σε αναλογία με τις αντίστοιχες ποσότητες στην περίπτωση κίνησης φορτίων σε μαγνητικό πεδίο.

Παρατήρηση 4.9. Ο οδηγός της κίνησης για ζεύγος δινών στην Εξ. (4.60) είναι διατηρήσιμο μέγεθος. Βλέπουμε λοιπόν ότι ένα ζεύγος δινών κινείται έτσι ώστε η μέση θέση του συστήματος να παραμένει σταθερή.

Παρατήρηση 4.10. Ο νόμος διατήρησης του οδηγού κίνησης αποκλείει την περίπτωση δύο όμοιες δίνες ($\gamma_1 = \gamma_2$) να κινούνται σε ελεύθερη κίνηση προς την ίδια κατεύθυνση.

Ο ορισμός (4.60) του οδηγού της κίνησης είναι αποδεκτός μόνο όταν $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$. Η αστοχία του ορισμού για τον οδηγό κίνησης όταν $\gamma_1 + \gamma_2 = 0$ δείχνει ότι αυτή είναι μία ειδική περίπτωση και θα πρέπει να μετεληθεί χωριστά. Φυσικά, σε αυτήν την περίπτωση δεν ισχύουν τα συμπεράσματα που αναφέραμε στις παραπάνω παρατηρήσεις.

Για το μοντέλο που μελετάμε είναι επίσης γνωστό ότι η ποσότητα

$$M = \frac{\gamma_1}{2} (x_1^2 + y_1^2) + \frac{\gamma_2}{2} (x_2^2 + y_2^2) \quad (4.61)$$

είναι διατηρήσιμη και είναι γνωστό ότι αυτή αντιστοιχεί στη στροφορμή του συστήματος δινών. Ο νόμος διατήρησης αποδεικνύεται με άμεσο υπολογισμό

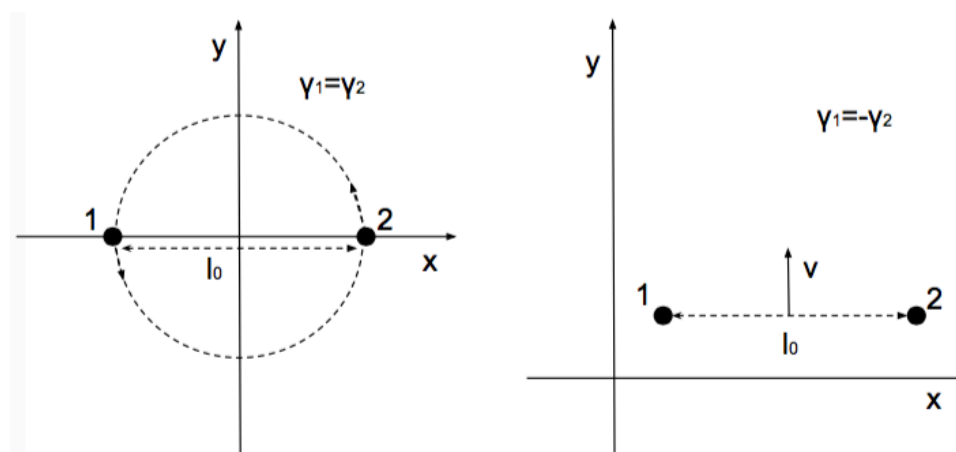
$$\frac{dM}{dt} = \gamma_1 (x_1 \dot{x}_1 + y_1 \dot{y}_1) + \gamma_2 (x_2 \dot{x}_2 + y_2 \dot{y}_2) = 0$$

όπου για τις χρονικές παραγώγους χρησιμοποιήσαμε τις Εξ. (4.54).

Στα επόμενα θα μελετήσουμε δύο ειδικές περιπτώσεις χρησιμοποιώντας τις διατηρήσιμες ποσότητες τις οποίες είδαμε σε αυτήν την παράγραφο.

Ερώτηση κατανόησης 4.2. Εάν υπάρξει εξωτερική δύναμη τότε είναι δυνατόν να μην διατηρείται ο οδηγός της κίνησης και ενδεχομένως να έχουμε συνολική μετατόπιση του συστήματος των δινών. Πώς θα μπορούσαν να γραφούν οι εξισώσεις κίνησης ώστε να περιλαμβάνουν μία εξωτερική δύναμη;

4.2.4 Ζεύγος αλληλεπιδρουσών δινών: Τροχιές



Σχήμα 4.3: (Αριστερά) Ένα ζεύγος δινών με $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$ κάνει κυκλική κίνηση (σημειώνεται με διακεκομμένη γραμμή) με γωνιακή συχνότητα $\omega = 2/l_0^2$. (Δεξιά) Ένα ζεύγος δινών με $\gamma_1 = -\gamma_2 = 1$ κινείται ευθύγραμμα με ταχύτητα $v = 1/l_0$. (l_0 είναι η απόσταση μεταξύ των δινών.)

Περίπτωση $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$

Θεωρούμε δύο δίνες οι οποίες είναι όμοιες, δηλαδή έχουν την ίδια ισχύ και για απλότητα παίρνουμε $\gamma_1 = \gamma_2 = 1$. Οι διατηρήσιμες ποσότητες όπως δίνονται στις εξισώσεις (4.56), (4.59), (4.61) είναι

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= -\frac{1}{2} \ln [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2] \\ I_x &= x_1 + x_2 \\ I_y &= y_1 + y_2 \\ M &= \frac{1}{2} (x_1^2 + y_1^2 + x_2^2 + y_2^2).\end{aligned}\tag{4.62}$$

Παρατήρηση 4.11. Μπορούμε να εκμεταλλευτούμε την ύπαρξη ενός ασυνήθιστα μεγάλου αριθμού διατηρήσιμων ποσοτήτων και να μελετήσουμε το πρόβλημα της κίνησης των δινών χωρίς να χρειαστεί να λύσουμε και πάλι τις εξισώσεις κίνησης.

Οι I_x και I_y είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους και επίσης η τιμή τους μπορεί να αλλάξει με απλή μετάθεση της αρχής του συστήματος συντεταγμένων. Εκλέγουμε λοιπόν την αρχή του συστήματος συντεταγμένων έτσι ώστε $I_x = 0$, $I_y = 0$. Ωστε ισχύουν οι

$$x_2 = -x_1, \quad y_2 = -y_1.\tag{4.63}$$

Από τη διατήρηση της ενέργειας έχουμε

$$\mathcal{E} = -\ln [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2] \Rightarrow (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 = \ell_0^2\tag{4.64}$$

Βλέπουμε ότι η απόσταση μεταξύ των δινών παραμένει σταθερή και στη σταθερή τιμή της δώσαμε το σύμβολο ℓ_0 . Με τη βοήθεια των (4.63) η απόσταση μεταξύ των δύο δινών γράφεται

$$\ell_0 = 2\sqrt{x_1^2 + y_1^2} = 2\sqrt{x_2^2 + y_2^2}.$$

Παράδειγμα 4.9. Δείξτε ότι η διατήρηση της στροφορμής M δεν δίνει επιπλέον αποτελέσματα από αυτά που ήδη πετύχαμε με τις \mathcal{E} , I_x , I_y .

Επίλυση. Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (4.63) γράφουμε τη στροφορμή ως

$$M = x_1^2 + y_1^2 = \frac{1}{4} \ell_0^2.$$

Άρα ο νόμος διατήρησης της M μας δίνει το αποτέλεσμα που ήδη γνωρίζουμε από τον νόμο διατήρησης της \mathcal{E} .

□

Συμπερασματικά, η Εξ. (4.63) δείχνει ότι οι δίνες βρίσκονται (για όλους τους χρόνους) σε αντιδιαμετρικές θέσεις ως προς ένα σημείο το οποίο έχει εκλεγεί ως αρχή των αξόνων. Η Εξ. (4.64) δείχνει ότι βρίσκονται σε σταθερή μεταξύ τους απόσταση $\ell_0/2$ σε κάθε χρονική στιγμή. Άρα οι δίνες κινούνται σε κύκλο με κέντρο την αρχή των αξόνων και διάμετρο ℓ_0 .

Για να βρούμε τη γωνιακή ταχύτητα περιστροφής θα πρέπει να ανατρέξουμε στις εξισώσεις κίνησης, αφού οι διατηρήσιμες ποσότητες δεν περιέχουν τον χρόνο. Θεωρούμε τις δύο από τις Εξ. (4.54) οι οποίες δίνουν τις χρονικές παραγώγους των μεταβλητών x_1, y_1 και χρησιμοποιούμε τις σχέσεις (4.63), (4.64) τις οποίες βρήκαμε από τους νόμους διατήρησης. Έτσι, βρίσκουμε για τη θέση (x_1, y_1) τις διαφορικές εξισώσεις:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= -\gamma_2 \frac{y_1 - y_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} \Rightarrow \dot{x}_1 = -\frac{2y_1}{\ell_0^2} \\ \dot{y}_1 &= \gamma_2 \frac{x_1 - x_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} \Rightarrow \dot{y}_1 = \frac{2x_1}{\ell_0^2}\end{aligned}\tag{4.65}$$

Παίρνοντας τη χρονική παράγωγο της πρώτης και χρησιμοποιώντας τη δεύτερη βρίσκουμε

$$\ddot{y}_1 = \frac{2}{\ell_0^2} \dot{x}_1 \Rightarrow \ddot{y}_1 + \frac{4}{\ell_0^4} y_1 = 0. \quad (4.66)$$

Μία ανάλογη εξίσωση μπορούμε να εξάγουμε και για την x_1 , καθώς επίσης και για τις x_2, y_2 . Οι εξισώσεις αυτές περιγράφουν περιοδική κίνηση με γωνιακή συχνότητα

$$\omega = \frac{2}{\ell_0^2}. \quad (4.67)$$

Παρατήρηση 4.12. Δύο δίνες με $\gamma_1 = \gamma_2$ κινούνται σε κυκλική τροχιά με γωνιακή συχνότητα αντιστρόφως ανάλογη του τετραγώνου της σταθερής μεταξύ τους αποστάσεως.

Σύντομο πρόβλημα 4.6. Ποία είναι η γωνιακή ταχύτητα περιστροφής του ζεύγους για $\gamma_1 \neq 1$;

Ερώτηση κατανόησης 4.3. Το ζεύγος δινών αυτής της παραγράφου περιστρέφεται αριστερόστροφα ή δεξιόστροφα; Για ποιο ζεύγος δινών θα ήταν δυνατόν να έχουμε περιστροφή αντίθετης φοράς;

Περίπτωση $\gamma_1 = 1, \gamma_2 = -1$

Θεωρούμε δύο δίνες οι οποίες έχουν ίση και αντίθετη ισχύ και για απλότητα παίρνουμε $\gamma_1 = -\gamma_2 = 1$. Οι διατηρήσιμες ποσότητες όπως δίνονται στις εξισώσεις (4.56), (4.59), (4.61) είναι

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \ln [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2] \\ I_x &= x_1 - x_2 \\ I_y &= y_1 - y_2 \\ M &= \frac{1}{2} [(x_1^2 + y_1^2) - (x_2^2 + y_2^2)]. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Με κατάλληλη στροφή του συστήματος συντεταγμένων μπορούμε να εκλέξουμε τον άξονα x να είναι παράλληλος στην ευθεία που περνάει από τις δύο δίνες (στην αρχική τους θέση). Επίσης, παίρνουμε τον άξονα y έτσι ώστε να διχοτομεί το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει τις δύο δίνες. Άρα, αν ℓ_0 είναι η απόσταση μεταξύ των δινών τότε αυτές βρίσκονται αρχικά στις θέσεις $(-\ell_0/2, 0), (\ell_0/2, 0)$. Έτσι έχουμε επιτύχει να ισχύει

$$y_1 = y_2 \Rightarrow I_y = 0. \quad (4.69)$$

Αφού η I_y διατηρείται, θα έχουμε ότι $y_1 = y_2$ για κάθε χρονική στιγμή. Επίσης, παρατηρούμε ότι

$$|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 = I_x^2 + I_y^2,$$

άρα η απόσταση μεταξύ των δινών είναι σταθερή και θέτουμε $(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 = \ell_0^2$. Η διατηρήσιμη ποσότητα \mathcal{E} είναι ισοδύναμη με την πρόταση που μόλις δείξαμε, ότι η απόσταση ℓ_0 παραμένει σταθερή. Άρα η διατηρήσιμη ποσότητα \mathcal{E} περιέχεται στις I_x, I_y . Ειδικότερα, αφού έχουμε εκλέξει $I_y = 0$ έχουμε

$$\ell_0^2 = I_x^2.$$

Για την τελευταία διατηρήσιμη ποσότητα, τη στροφορμή M , έχουμε

$$M = \frac{1}{2} (x_1^2 - x_2^2) = \frac{1}{2} (x_1 - x_2)(x_1 + x_2) = \frac{I_x}{2} (x_1 + x_2),$$

ώστε συμπεραίνουμε ότι το άθροισμα $x_1 + x_2$ είναι επίσης διατηρήσιμη ποσότητα. Συγκεντρώνοντας το τελευταίο αποτέλεσμα και τη διατήρηση του I_x έχουμε

$$x_1 - x_2 = \text{σταθ.}, \quad x_1 + x_2 = \text{σταθ.} \Rightarrow x_1 = \text{σταθ.}, \quad x_2 = \text{σταθ.} \quad (4.70)$$

δηλαδή, οι συντεταγμένες x_1, x_2 παραμένουν αμετάβλητες κατά τη διάρκεια της κίνησης.

Συμπερασματικά, η Εξ. (4.70) δείχνει ότι οι δίνες δεν κινούνται κατά τη διεύθυνση του άξονα x (δηλαδή, κατά τη διεύθυνση της ευθείας που τις συνδέει). Είναι δυνατόν να κινούνται μόνο κατά τη διεύθυνση y (δηλαδή, κάθετα στην ευθεία που τις συνδέει).

Για να βρούμε την ταχύτητα κίνησης του ζεύγους θα πρέπει να ανατρέξουμε στις εξισώσεις κίνησης. Παρατηρούμε ότι οι ταχύτητες των δύο δινών είναι ίσες (αφού $y_1 = y_2$ για κάθε χρονική στιγμή) και θέτουμε $v = \dot{y}_1 = \dot{y}_2$. Οπότε από τη δεύτερη Εξ. (4.54) έχουμε

$$\dot{y}_2 = \gamma_1 \frac{x_2 - x_1}{\ell^2} \Rightarrow v = -\frac{I_x}{\ell_0^2} \Rightarrow v = -\frac{1}{I_x}.$$

Στην περίπτωση που μελετάμε είναι $I_x = -\ell_0$, ώστε οι δίνες έχουν ταχύτητα

$$v = \frac{1}{\ell_0}$$

με φορά προς τον θετικό άξονα y .

Παρατήρηση 4.13. Δύο δίνες με $\gamma_1 = -\gamma_2$ κινούνται με την ίδια ταχύτητα κάθετα στο ευθύγραμμο τμήμα που τις συνδέει. Η ταχύτητά τους είναι σταθερή και αντιστρόφως ανάλογη της σταθερής απόστασης μεταξύ των δινών.

Η κατεύθυνση της ταχύτητας εξαρτάται από το πρόσημο του $I_x = x_1 - x_2$. Αν αντιστρέψουμε τις θέσεις των δινών αντιστρέφεται και η φορά της κίνησης.

Σύντομο πρόβλημα 4.7. Ποία είναι η ταχύτητα του ζεύγους για $\gamma_1 = -\gamma_2 \neq 1$;

Γενική περίπτωση $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$

Θεωρούμε δύο δίνες με ισχύες $\gamma_1, \gamma_2 > 0$ και $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$. Θα θέλαμε να βρούμε την τροχιά τους χρησιμοποιώντας μόνο τις διατηρήσιμες ποσότητες. Θεωρούμε τις I_x, I_y ως σταθερές και γράφουμε τις

$$x_2 = \frac{I_x}{\gamma_2} - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} x_1, \quad y_2 = \frac{I_y}{\gamma_2} - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} y_1. \quad (4.71)$$

Επίσης, από τη διατήρηση της ενέργειας $\mathcal{E} = -\gamma_1 \gamma_2 \ln(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$ προκύπτει ότι $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| = \ell_0$, όπου ℓ_0 είναι η σταθερή απόσταση μεταξύ των δύο δινών και μπορούμε να γράψουμε

$$\ell_0^2 = (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2. \quad (4.72)$$

Αντικαθιστούμε τις Εξ. (4.71) στην τελευταία και βρίσκουμε

$$\begin{aligned} & \left[\left(1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) x_1 - \frac{I_x}{\gamma_2} \right]^2 + \left[\left(1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) y_1 - \frac{I_y}{\gamma_2} \right]^2 = \ell_0^2 \Rightarrow \\ & [(\gamma_1 + \gamma_2)x_1 - I_x]^2 + [(\gamma_1 + \gamma_2)y_1 - I_y]^2 = \gamma_2^2 \ell_0^2 \Rightarrow \\ & \left[x_1 - \frac{I_x}{\gamma_1 + \gamma_2} \right]^2 + \left[y_1 - \frac{I_y}{\gamma_1 + \gamma_2} \right]^2 = \left(\frac{\gamma_2 \ell_0}{\gamma_1 + \gamma_2} \right)^2. \end{aligned}$$

Χρησιμοποιούμε τον ορισμό του οδηγού κίνησης (4.60), θέτουμε την ολική ισχύ του συστήματος

$$\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2$$

και έχουμε την τροχιά της δίνης γ_1 σε πιο συμπαγή μορφή:

$$(x_1 - R_x)^2 + (y_1 - R_y)^2 = \left(\frac{\gamma_2 \ell_0}{\Gamma} \right)^2. \quad (4.73)$$

Δηλαδή, έχουμε για τη δίνη γ_1 κίνηση επάνω σε κύκλο με κέντρο τον οδηγό κίνησης και ακτίνα $A_1 = \gamma_2 \ell_0 / \Gamma$. Ομοίως, για τη δίνη γ_2 βρίσκουμε

$$(x_2 - R_x)^2 + (y_2 - R_y)^2 = \left(\frac{\gamma_1 \ell_0}{\Gamma} \right)^2, \quad (4.74)$$

Παρατήρηση 4.14. Δύο δίνες για τις οποίες $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$ κάνουν κυκλική κίνηση με κέντρο τον κοινό οδηγό κίνησης (R_x, R_y) αλλά με διαφορετικές ακτίνες. Ο λόγος των ακτίνων των διαγραφόμενων κύκλων είναι $|\gamma_2/\gamma_1|$, όπου η ισχυρότερη δίνη (αυτή με το μέγιστο $|\gamma|$) διαγράφει κύκλο με μικρότερη ακτίνα.

Για να βρούμε τη συχνότητα περιστροφής χρησιμοποιούμε το αποτέλεσμα ότι $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \ell_0$ και αντικαθιστούμε τις Εξ. (4.71) στις εξισώσεις κίνησης. Βρίσκουμε ότι το σημείο (x_1, y_1) κάνει κυκλική κίνηση με κέντρο τον οδηγό κίνησης και γωνιακή συχνότητα

$$\omega = \frac{\Gamma}{\ell_0^2}. \quad (4.75)$$

Ομοίως βρίσκουμε ότι το (x_2, y_2) κινείται με την ίδια γωνιακή συχνότητα.

Ερώτηση κατανόησης 4.4. Πώς συνδέεται το γενικό αποτελέσματα για τη γωνιακή συχνότητα περιστροφής δινών (4.75) με το αντίστοιχο ειδικότερο αποτέλεσμα (4.67);

Σύντομο πρόβλημα 4.8. Σχεδιάστε τις τροχιές για δύο δίνες με $\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 2$.

4.2.5 Σύστημα N αλληλεπιδρουσών δινών

Θα θεωρήσουμε ένα σύστημα από N δίνες με ισχύες γ_i , $i = 1, \dots, N$, οι οποίες αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Η θέση κάθε δίνης είναι (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, N$, ώστε χρειαζόμαστε $2N$ μεταβλητές για την πλήρη περιγραφή του συστήματος. Θεωρούμε ότι οι δίνες αλληλεπιδρούν κατά ζεύγη με δυναμικό της μορφής (4.56). Ωστε, για το πλήρες σύστημα, θα έχουμε ενέργεια αλληλεπίδρασης η οποία είναι γενίκευση της (4.56) (Newton, 2001):

$$\mathcal{E} = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j < i}^N \gamma_i \gamma_j \ln(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (4.76)$$

όπου $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$ είναι η απόσταση μεταξύ δύο τυχόντων δινών i και j . Στο παραπάνω διπλό άθροισμα έχουμε επιλέξει να αθροίσουμε σε όλα τα $i = 1, \dots, N$, όμως αθροίζουμε μόνο στα $j < i$. Αυτό εξασφαλίζει δύο συνθήκες: κάθε ζεύγος i, j λαμβάνεται υπόψιν μία φορά στο άθροισμα και επίσης εξαιρείται ο όρος για $i = j$ (δεν υπάρχει αλληλεπίδραση κάθε δίνης με τον εαυτό της).

Οι εξισώσεις κίνησης μπορούν να γραφούν σε αναλογία με το σύστημα εξισώσεων (4.54) για ζεύγος δινών. Έχουμε το σύστημα εξισώσεων

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= - \sum_{j=1, j \neq i}^N \gamma_j \frac{y_i - y_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \\ \dot{y}_i &= \sum_{j=1, j \neq i}^N \gamma_j \frac{x_i - x_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \end{aligned} \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.77)$$

Αυτό το σύστημα εξισώσεων μας λέει ότι κάθε δίνη i αλληλεπιδρά με κάθε μία από τις άλλες δίνες κατά τον τρόπο που περιγράψαμε στην περίπτωση ζεύγους δινών και οι αλληλεπιδράσεις προστίθενται.

Μπορούμε να δείξουμε ότι γενικεύσεις των διατηρήσιμων ποσοτήτων που είδαμε για την περίπτωση δύο δινών αποτελούν διατηρήσιμες ποσότητες στο σύστημα των N δινών. Αυτές είναι η ενέργεια (4.76), επίσης οι

$$I_x = \sum_{i=1}^N \gamma_i x_i, \quad I_y = \sum_{i=1}^N \gamma_i y_i \quad (4.78)$$

και τέλος η ποσότητα (η οποία μπορεί ναδειχθεί ότι έχει την έννοια της στροφορμής)

$$M = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \gamma_i (x_i^2 + y_i^2). \quad (4.79)$$

Σύντομο πρόβλημα 4.9. Δείξτε ότι οι ποσότητες (4.78) διατηρούνται στον χρόνο από τις εξισώσεις κίνησης (4.77).

4.2.6 Σύστημα τριών δινών

Θα μελετήσουμε ένα σύστημα τριών δινών με ισχύες $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ (Gröbli, 1877; Aref et al., 1992). Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι δίνες βρίσκονται στις κορυφές τριγώνου στις θέσεις $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1)$, $\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2)$, $\mathbf{r}_3 = (x_3, y_3)$. Οι εξισώσεις κίνησης είναι οι (4.77) τις οποίες θα εφαρμόσουμε για $N = 3$, ώστε παίρνουμε το σύστημα

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -\gamma_2 \frac{y_1 - y_2}{C_3^2} + \gamma_3 \frac{y_3 - y_1}{C_2^2}, & \frac{dy_1}{dt} &= \gamma_2 \frac{x_1 - x_2}{C_3^2} - \gamma_3 \frac{x_3 - x_1}{C_2^2}, \\ \frac{dx_2}{dt} &= -\gamma_3 \frac{y_2 - y_3}{C_1^2} + \gamma_1 \frac{y_1 - y_2}{C_3^2}, & \frac{dy_2}{dt} &= \gamma_3 \frac{x_2 - x_3}{C_1^2} - \gamma_1 \frac{x_1 - x_2}{C_3^2}, \\ \frac{dx_3}{dt} &= -\gamma_1 \frac{y_3 - y_1}{C_2^2} + \gamma_2 \frac{y_2 - y_3}{C_1^2}, & \frac{dy_3}{dt} &= \gamma_1 \frac{x_3 - x_1}{C_2^2} - \gamma_2 \frac{x_2 - x_3}{C_1^2}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Έχουμε χρησιμοποιήσει τον συμβολισμό

$$C_1 = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|, \quad C_2 = |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1|, \quad C_3 = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \quad (4.81)$$

για το μήκος των πλευρών του τριγώνου.

Προκύπτει ότι το σύστημα (4.80) για τις τρεις δίνες είναι πλήρως ολοκληρώσιμο, δηλαδή, όλες οι λύσεις του μπορούν να δωθούν σε κλειστή μορφή (Gröbli, 1877; Aref, 2007). Δεν θα δώσουμε εδώ την πλήρη ολοκλήρωση του συστήματος, όμως θα αναφερθούμε σε κάποιες εξισώσεις και λύσεις οι οποίες έχουν ιδιαίτερα απλές μορφές.

Η πρώτη σημαντική απλοποίηση των έξι εξισώσεων (4.80) προκύπτει αν γράψουμε τις εξισώσεις κίνησης για τα μήκη των πλευρών του τριγώνου C_1, C_2 και C_3 . Παραγωγίζουμε λοιπόν τις ποσότητες στις Εξ. (4.81) και χρησιμοποιούμε τις πλήρεις εξισώσεις (4.80), ώστε τελικά βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(C_1^2) &= 4\gamma_1 A \left(\frac{1}{C_2^2} - \frac{1}{C_3^2} \right) \\ \frac{d}{dt}(C_2^2) &= 4\gamma_2 A \left(\frac{1}{C_3^2} - \frac{1}{C_1^2} \right) \\ \frac{d}{dt}(C_3^2) &= 4\gamma_3 A \left(\frac{1}{C_1^2} - \frac{1}{C_2^2} \right). \end{aligned} \quad (4.82)$$

Η ποσότητα A είναι η επιφάνεια του τριγώνου την οποία θεωρούμε με θετικό πρόσημο αν οι δίνες (1, 2, 3) εμφανίζονται αριστερόστροφα στο επίπεδο ενώ τη θεωρούμε με αρνητικό πρόσημο αν εμφανίζονται δεξιόστροφα. Γνωρίζουμε από την Γεωμετρία ότι το μέτρο της επιφάνειας A δίνεται ως

$$|A| = [C(C - C_1)(C - C_2)(C - C_3)]^{1/2}, \quad C := \frac{1}{2}(C_1 + C_2 + C_3), \quad (4.83)$$

δηλαδή, εκφράζεται χρησιμοποιώντας μόνο τα μήκη των πλευρών του τριγώνου. Έχουμε το σημαντικό αποτέλεσμα για τη δυναμική των τριών δινών, ότι οι εξισώσεις (4.82) είναι ένα κλειστό σύστημα ως προς C_1, C_2, C_3 δηλαδή περιέχουν μόνο αυτές τις τρεις ποσότητες (τις αποστάσεις μεταξύ των δινών).

Το αρχικό σύστημα εξισώσεων περιέχει συνολικά έξι ποσότητες και βέβαια η θέση στον χώρο του συστήματος τριών δινών δεν μπορούν να προσδιορισθούν μόνο από τη γνώση των πλευρών του τριγώνου C_1, C_2, C_3 . Θα χρειαζόμασταν επιπλέον τη θέση του τριγώνου στον χώρο και γωνίες για να προσδιορίσουμε τον προσανατολισμό του.

Όμως, οι εξισώσεις (4.82) δείχνουν ότι μπορούμε να μελετήσουμε τη χρονική εξέλιξη του τριγώνου με τρόπο ανεξάρτητο από την κίνηση ή περιστροφή του στον χώρο. Αυτό μπορεί να μας βοηθήσει ιδιαίτερα να βρούμε ειδικές λύσεις για το σύστημα. Μία τέτοια λύση είναι η

$$C_1 = C_2 = C_3 : \text{σταθερά}, \quad (4.84)$$

η οποία βέβαια δείχνει ότι τρεις δίνες η οποίες βρίσκονται αρχικά ($t = 0$) στις κορυφές ενός ισοπλεύρου τριγώνου θα συνεχίσουν να ισαπέχουν για κάθε χρόνο $t > 0$.

Περαιτέρω αποτελέσματα θα μας βοηθήσουν να βγάλουμε οι διατηρήσιμες ποσότητες τις οποίες ήδη γνωρίζουμε ότι έχει το σύστημα. Τέτοιες διατηρήσιμες ποσότητες είναι οι (4.78) οι οποίες τώρα γράφονται

$$I_x = \gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2 + \gamma_3 x_3, \quad I_y = \gamma_1 y_1 + \gamma_2 y_2 + \gamma_3 y_3. \quad (4.85)$$

Αν θεωρήσουμε μία συνολική μετατόπιση των δινών κατά διάνυσμα (c_1, c_2) , δηλαδή θεωρήσουμε ότι οι θέσεις των δινών γίνονται $(x_i, y_i) \rightarrow (x_i + c_1, y_i + c_2)$ τότε έχουμε ότι

$$I_x \rightarrow I_x + \Gamma c_1, \quad I_y \rightarrow I_y + \Gamma c_2 \quad (4.86)$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει τον συμβολισμό $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3$ για τη συνολική ισχύ του συστήματος των δινών. Στην περίπτωση $\Gamma \neq 0$ είναι σαφές ότι μία συνολική μετατόπιση του συστήματος δεν μπορεί να υπάρξει, αφού τότε θα παραβιάζονταν οι νόμοι διατήρησης (4.85). Όστε, αυτό που περιμένουμε από το τρίγωνο των δινών είναι να περιστρέφεται γύρω από μία σταθερή θέση. Στην περίπτωση όμως $\Gamma = 0$ μία μετατόπιση του συστήματος των δινών δεν αποκλείεται. Μάλιστα, αυτό πραγματικά συμβαίνει λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ τους. Η περιγραφή της δυναμικής για τις τρεις δίνες που μόλις δώσαμε βρίσκεται σε πλήρη αναλογία με την περιστροφική κίνηση δύο δινών με $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$ και τη μεταφορική κίνησή τους στην περίπτωση $\gamma_1 + \gamma_2 = 0$ που είδαμε σε προηγούμενη παράγραφο. Βέβαια, για την επιβεβαίωση των παραπάνω θα πρέπει να λύσουμε το πλήρες σύστημα των εξισώσεων (4.80) είτε αναλυτικά είτε αριθμητικά.

4.2.7 Χαμιλτονιανή περιγραφή

Αν θεωρήσουμε την ενέργεια αλληλεπίδρασης των N δινών (4.76) παρατηρούμε ότι οι εξισώσεις κίνησης (4.77) μπορούν να γραφούν στη μορφή

$$\gamma_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial y_i}, \quad \gamma_i \frac{dy_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x_i}; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N. \quad (4.87)$$

Αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως η χαμιλτονιανή μορφή των εξισώσεων κίνησης αν θεωρήσουμε ως ζεύγη κανονικών μεταβλητών τα $(x_i, \gamma_i y_i)$.

Μπορούμε να δούμε ότι, σε συμφωνία με τον χαμιλτονιανό φορμαλισμό, το σύστημα έχει ως διατηρήσιμες ποσότητες την ολική γραμμική ορμή

$$P_x = -\sum_i \gamma_i x_i, \quad P_y = \sum_i \gamma_i y_i \quad (4.88)$$

και την ολική στροφορμή (4.79).

4.2.8 Λαγκρανζιανή περιγραφή

Η Λαγκρανζιανή για ένα σύστημα N δινών μπορεί να γραφεί ως εξής

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{\gamma_i}{2} (y_i \dot{x}_i - x_i \dot{y}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j < i}^N \gamma_i \gamma_j \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|. \quad (4.89)$$

Μπορούμε να επιβεβαιώσουμε ότι αυτή η Λαγκρανζιανή περιγράφει το σύστημα δινών αφού μπορούμε να εξαγάγουμε τις εξισώσεις κίνησης ως τις εξισώσεις Euler-Lagrange για την παραπάνω Λαγκρανζιανή:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) &= \frac{\partial L}{\partial x_i} \Rightarrow \dot{y}_i = - \sum_{j=1, j \neq i}^N \gamma_j \frac{x_i - x_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_i} \right) &= \frac{\partial L}{\partial y_i} \Rightarrow \dot{x}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \gamma_j \frac{y_i - y_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2}. \end{aligned} \quad (4.90)$$

Επίσης μπορούμε να εξαγάγουμε από τον γενικό τύπο της λαγκρανζιανής μηχανικής την ενέργεια, η οποία προκύπτει να είναι η Χαμιλτονιανή (4.76) του συστήματος.

Η Λαγκρανζιανή για την περιγραφή δινών (4.89) έχει σημαντικές ομοιότητες με τη Λαγκρανζιανή για την περιγραφή κίνησης φορτίων σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο στην Εξ. (4.31). Ο κινητικός όρος της Εξ. (4.31) όμως λείπει στην Εξ. (4.31). Θα μπορούσε λοιπόν κανείς να πάρει τη Λαγκρανζιανή για τις δίνες από αυτή για τα φορτία θέτοντας τη μάζα m να είναι μηδέν. Στη Λαγκρανζιανή (4.89) έχουμε περιλάβει έναν όρο που περιγράφει αλληλεπίδραση μεταξύ των δινών. Ένα εξωτερικό δυναμικό το οποίο θα επιδρούσε στις δίνες θα μπορούσε να προστεθεί στη Λαγκρανζιανή με τρόπο ανάλογο του δυναμικού αλληλεπίδρασης.

Παρατήρηση 4.15. Η ισχύς της δίνης Γ έχει τώρα τον ρόλο που είχε το γινόμενο qB (φορτίο επί μαγνητικό πεδίο) στην περίπτωση των φορτίων.

4.3 Μελέτη

4.3.1 Ασκήσεις

Άσκηση 4.1. Τροχιά φορτίου σε ομογενές μαγνητικό πεδίο

Ας υποθέσουμε ότι ένα φορτισμένο σωματίο μάζας m και φορτίου q βρίσκεται σε ομογενές σταθερό μαγνητικό πεδίο B . Έχει αρχική ταχύτητα $\dot{x}_0 := \dot{x}(t=0)$, $\dot{y}_0 := \dot{y}(t=0)$ και βρίσκεται στο σημείο $x_0 := x(t=0)$, $y_0 := y(t=0)$. Βρείτε την τροχιά του. [Υπόδειξη: Υπολογίστε την ποσότητα $(x - R_x)^2 + (y - R_y)^2$.]

Άσκηση 4.2. Ευθύγραμμη τροχιά φορτίου σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο

Έστω ένα φορτισμένο σωματίο το οποίο βρίσκεται μέσα σε κάθετα μεταξύ τους ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο τα οποία είναι σταθερά και ομογενή. Βρείτε μια ειδική λύση (για κατάλληλες αρχικές συνθήκες) η οποία περιγράφει ευθύγραμμη και ομαλή κίνηση του σωματίου.

Άσκηση 4.3. Χαμιλτονιανή φορτίου σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο

Ένα σωματίο μάζας m με φορτίο q βρίσκεται σε μαγνητικό πεδίο B το οποίο παράγεται από διανυσματικό δυναμικό A ως $B = \nabla \times A$ και σε ηλεκτρικό πεδίο το οποίο παράγεται από βαθμωτό δυναμικό Φ ως $E = -\nabla\Phi$. Βρείτε ότι η Χαμιλτονιανή του δίνεται ως

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi.$$

Άσκηση 4.4. Εξισώσεις Euler-Lagrange για ζεύγος αλληλεπιδρώντων φορτίων

Γράψτε το σύστημα των εξισώσεων (4.41) για ζεύγος φορτίων σε σταθερό μαγνητικό πεδίο θεωρώντας δυναμικό αλληλεπίδρασης

$$V = -q_1 q_2 \ln |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|.$$

(α) Ορίστε νέες παραμέτρους ώστε να γράψετε το σύστημα σε πιο απλή μορφή. (β) Γράψτε ένα ισοδύναμο σύστημα εξισώσεων 1ης τάξεως.

Άσκηση 4.5. Σύστημα N αλληλεπιδρώντων φορτίων

Γενικεύστε τις εξισώσεις (4.41) για να περιγράψετε ένα σύστημα N αλληλεπιδρώντων φορτίων σε μαγνητικό πεδίο. Βρείτε διατηρήσιμες ποσότητες για αυτό το σύστημα (ενέργεια, οδηγός της κίνησης). [Υπόδειξη: Το δυναμικό μπορεί να δίνεται από ένα άθροισμα από όρους της μορφής $V(\ell_{ij})$ όπου (i, j) είναι όλα τα δυνατά ζευγάρια φορτίων και ℓ_{ij} η απόστάσεις μεταξύ τους. Ακολουθώντας αρκεί να χρησιμοποιήσετε αθροίσματα στα δεξιά μέλη των εξισώσεων, για κάθε αλληλεπιδρόν ζεύγος φορτίων.]

Άσκηση 4.6. Κίνηση φορτίου με τριβή

Θεωρήστε την περίπτωση ενός φορτίου το οποίο βρίσκεται σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο και υπόκειται σε τριβή. Βρείτε αριθμητικά και σχεδιάστε την τροχιά του σωματίου για κάποιες συγκεκριμένες αρχικές συνθήκες της επιλογής σας και για μία σταθερά τριβής $\alpha > 0$. [Υπόδειξη: θεωρήστε σταθερά και ομογενή πεδία κάθετα μεταξύ τους.]

Άσκηση 4.7. Τροχιά ζεύγους δινών

(α) Θεωρήστε δύο δίνες με ισχύες γ_1, γ_2 και $\gamma_1 + \gamma_2 \neq 0$. Βρείτε αναλυτικά την τροχιά τους χρησιμοποιώντας τις διατηρήσιμες ποσότητες.

(β) Έστω δίνες με $\gamma_1 = \gamma_2 = 1/2$ οι οποίες βρίσκονται αρχικά στις θέσεις $(x_1, y_1) = (1, 0)$ και $(x_2, y_2) = (-1, 0)$. Βρείτε την τροχιά τους.

(γ) Έστω δίνες με $\gamma_1 = 2\gamma_2 = 2$ οι οποίες βρίσκονται αρχικά στις θέσεις $(x_1, y_1) = (1, 0)$ και $(x_2, y_2) = (-1, 0)$. Βρείτε την τροχιά τους.

Άσκηση 4.8. Τροχιά ζεύγους δινών Kelvin

(α) Θεωρήστε δύο δίνες με ισχύες γ_1, γ_2 και $\gamma_1 + \gamma_2 = 0$. Βρείτε αναλυτικά την τροχιά τους χρησιμοποιώντας τις διατηρήσιμες ποσότητες.

(β) Έστω δίνες με $\gamma_1 = -\gamma_2 = 1$ οι οποίες βρίσκονται αρχικά στις θέσεις $(x_1, y_1) = (1, 0)$ και $(x_2, y_2) = (-1, 0)$. Λύστε τις εξισώσεις κίνησης και έτσι βρείτε την τροχιά τους.

Άσκηση 4.9. Εξισώσεις κίνησης ζεύγους δινών στο μιγαδικό επίπεδο

Γράψτε τις Εξ. (4.54) χρησιμοποιώντας τις μιγαδικές μεταβλητές $z_k = x_k + iy_k$, $k = 1, 2$.

Άσκηση 4.10. Εξισώσεις κίνησης ζεύγους δινών πολικές συντεταγμένες

Γράψτε τις Εξ. (4.54) σε πολικές συντεταγμένες για $\gamma_1 = \gamma_2$. Βρείτε τη γωνιακή συχνότητα περιστροφής του ζεύγους.

Άσκηση 4.11. Δίνη σε εξωτερικό πεδίο

(α) Γράψτε τη (γενική) Λαγκρανζιανή για μία δίνη σε εξωτερικό πεδίο το οποίο δίνεται από δυναμικό. (β) Θεωρήστε παραβολικό δυναμικό το οποίο να παγιδεύει τη δίνη και γράψτε την (ειδικότερη) Λαγκρανζιανή. (γ) Γράψτε και λύστε τις εξισώσεις κίνησης. (δ) Γράψτε κώδικα ο οποίος να λύνει τις εξισώσεις κίνησης για ένα γενικό δυναμικό. Σχεδιάστε λύσεις για ένα δυναμικό της επιλογής σας. [Υπόδειξη: Προσθέστε έναν νέο κατάλληλο όρο δυναμικού στην ενέργεια είτε στη Λαγκρανζιανή και εξαγάγεται τις νέες εξισώσεις κίνησης.]

Άσκηση 4.12. Δύναμη τριβής για δίνες

(α) Γράψτε την (γενική) Λαγκρανζιανή για μία δίνη σε εξωτερικό δυναμικό. (β) Θεωρήστε δυναμικό το οποίο να δίνει μία σταθερή δύναμη και γράψτε την (ειδικότερη) Λαγκρανζιανή. Βρείτε την τροχιά της δίνης. (γ) Ακολουθώντας, θεωρήστε δύναμη τριβής ανάλογη της ταχύτητας και γράψτε τις εξισώσεις κίνησης. (δ) Δώστε λύσεις των εξισώσεων κίνησης και βρείτε την τροχιά της δίνης (δηλαδή, $y = y(x)$).

Άσκηση 4.13. Εξισώσεις κίνησης για τρεις δίνες

Εξάγετε τις εξισώσεις κίνησης (4.80) για τρεις αλληλεπιδρούσες δίνες.

Άσκηση 4.14. Τρεις δίνες: Δυναμική πλευρών τριγώνου

Εξάγετε τις δυναμικές εξισώσεις (4.82) για τις αποστάσεις μεταξύ τριών αλληλεπιδρουσών δινών (δηλαδή, για τις πλευρές του τριγώνου που σχηματίζουν οι τρεις δίνες).

4.3.2 Εργασίες

Εργασία 4.1. Κίνηση φορτίου σε ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο

Κατασκευάστε αριθμητικό κώδικα στον οποίο θα δίνονται οι αρχικές συνθήκες και θα παράγεται η τροχιά ενός σωματίου με φορτίο q και μάζα m το οποίο βρίσκεται σε σταθερά και ομογενή ηλεκτρικό $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ και μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Σχεδιάστε (α) την τροχιά του φορτίου και (β) την τροχιά του οδηγού κίνησης. (γ) Εξετάστε ειδικές περιπτώσεις. [Υπόδειξη: Θεωρήστε ότι τα πεδία είναι κάθετα μεταξύ τους και δείτε τις Εξ. (4.16). Θεωρήστε την περίπτωση στην οποία το σωματίο παραμένει στο επίπεδο το κάθετο στο μαγνητικό πεδίο.]

Βιβλιογραφία: (Landau & Lifshitz, 1985)

Εργασία 4.2. Ζεύγος φορτίων σε μαγνητικό πεδίο

Θεωρήστε ένα σύστημα δύο φορτίων q_1, q_2 σε ομογενές μαγνητικό πεδίο και το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ τους

$$V = -q_1 q_2 \ln |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|.$$

(α) Γράψτε κώδικα ο οποίος να επιλύει το πρόβλημα αρχικών τιμών για το σύστημα των εξισώσεων. (β) Σχεδιάστε τις τροχιές του συστήματος αφού επιλέξετε ένα ζεύγος φορτίων q_1, q_2 και αρχικές συνθήκες. (γ) Σχεδιάστε τις συντεταγμένες κάθε φορτίου με τον χρόνο. (δ) Ελέγξτε ότι στον αριθμητικό σας υπολογισμό οι ποσότητες οι οποίες είναι θεωρητικά διατηρήσιμες, πραγματικά διατηρούνται.

Εργασία 4.3. Κίνηση ζεύγους δινών

Θεωρήστε ένα σύστημα δύο αλληλεπιδρουσών δινών γ_1, γ_2 με δυναμικό αλληλεπίδρασης

$$V = -\gamma_1 \gamma_2 \ln |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|.$$

(α) Γράψτε κώδικα ο οποίος να επιλύει το πρόβλημα αρχικών τιμών για το σύστημα των εξισώσεων. (β) Σχεδιάστε τις τροχιές του συστήματος για μία περίπτωση όπου $|\gamma_1| \neq |\gamma_2|$. (γ) Σχεδιάστε τις συντεταγμένες κάθε δίνης με τον χρόνο. (δ) Ελέγξτε ότι στον αριθμητικό σας υπολογισμό οι ποσότητες οι οποίες είναι θεωρητικά διατηρήσιμες, πραγματικά διατηρούνται.

Βιβλιογραφία: (Aref, 2007).

Εργασία 4.4. Εξισώσεις κίνησης μαγνητικών δινών

Στην περίπτωση μαγνητικών δινών η ισχύς γ παίρνει μόνο ακέραιες (και ορισμένες φορές ημιακέραιες) τιμές και το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ ενός ζεύγους δινών έχει τη μορφή

$$V = -\kappa_1 \kappa_2 \ln |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|.$$

όπου κ_1, κ_2 είναι ακέραιοι αριθμοί (οι οποίοι σχετίζονται με ειδικότερα χαρακτηριστικά της δομής κάθε δίνης) για τους οποίους ισχύει $\gamma_i = \pm \kappa_i$, $i = 1, 2$. Όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί είναι από φυσική άποψη πραγματοποιήσιμοι, άρα υπάρχουν τέσσερις δυνατές περιπτώσεις για δύο μαγνητικές δίνες με δεδομένα γ_1, γ_2 . (α) Γράψτε τη Λαγκρανζιανή και εξάγετε εξισώσεις κίνησης. (β) Δώστε τον ορισμό του οδηγού κίνησης. (γ) Μελετήστε την τροχιά ενός ζεύγος μαγνητικών δινών το οποίο δεν είναι δυνατόν να προγραμματισθεί για συνήθεις δίνες.

Βιβλιογραφία: (Kominas & Papanicolaou, 2010).

Εργασία 4.5. Τρεις δίνες

Θεωρήστε ένα σύστημα τριών δινών $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$. (α) Γράψτε την Λαγκρανζιανή και τις εξισώσεις κίνησης. (β) Λύστε αριθμητικά το σύστημα των εξισώσεων (4.80) για τρεις δίνες με $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3$ και επιβεβαιώστε τις εξισώσεις (4.81). (γ) Για την ειδική λύση που οι δίνες βρίσκονται στις κορυφές ισοπλεύρου τριγώνου δείτε από τις εξισώσεις ότι το σύστημα βρίσκεται σε περιστροφική κίνηση, επιβεβαιώστε αριθμητικά αυτή τη λύση και βρείτε την εξάρτηση της γωνιακής συχνότητας περιστροφής από την ολική ισχύ $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3$. (δ) Μετετήστε άλλες ειδικές περιπτώσεις. Για παράδειγμα, μελετήστε αριθμητικά τις τροχιές για την περίπτωση στην οποία δύο δίνες με $\gamma_1 = -\gamma_2$ βρίσκονται αρχικά κοντά ενώ η τρίτη δίνη $\gamma_3 = \gamma_1$ βρίσκεται σε μία απόσταση από το ζεύγος.

Βιβλιογραφία: (Aref et al., 1992).

Εργασία 4.6. Τρεις μαγνητικές δίνες

Θεωρήστε τρεις μαγνητικές δίνες όπως στην Εργασία 4.4. Μελετήστε το πρόβλημα ανάλογα με την Εργασία 4.5. Επίσης, εντοπίστε και μελετήστε μία ειδική περίπτωση η οποία δεν θα ήταν πραγματοποιήσιμη για τρεις συνήθεις δίνες.

Βιβλιογραφία: (Kominas & Papanicolaou, 2010).

Εργασία 4.7. N δίνες

Θεωρήστε ένα σύστημα N δινών γ_i , $i = 1, 2, \dots, N$. (α) Γράψτε τη Λαγκρανζιανή για ένα τυχόν δυναμικό αλληλεπίδρασης. (β) Εξάγετε τις εξισώσεις κίνησης αν οι δίνες αλληλεπιδρούν ανά ζεύγη με δυναμικό $V = -\gamma_i \gamma_j \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, όπου $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ είναι η απόσταση μεταξύ ζεύγους (i, j) . (γ) Δείξτε ότι οι

$$I_x = \sum_{i=1}^n \gamma_i x_i, \quad I_y = \sum_{i=1}^n \gamma_i y_i,$$

είναι διατηρήσιμες ποσότητες και ορίστε τον οδηγό κίνησης. (δ) Βρείτε τη διατηρήσιμη ποσότητα που δίνει την ενέργεια του συστήματος. (ε) Γράψτε κώδικα ο οποίος να δίνει τις τροχιές των δινών. Σχεδιάστε τις τροχιές για ένα ζεύγος δινών και επιβεβαιώστε αριθμητικά τη διατήρηση του οδηγού κίνησης. (στ) Δείτε ορισμένες ειδικές περιπτώσεις, π.χ., θεωρήστε ένα σύστημα δύο ζευγών δινών για τις οποίες $\gamma_1 = -\gamma_2$, $\gamma_3 = -\gamma_4$. [Υπόδειξη: Δείτε την Λαγκρανζιανή (4.89).]

Βιβλιογραφία: (Aref, 2007).

Βιβλιογραφία

- Aref, H. (2007). Point vortex dynamics: A classical mathematics playground. *J. Math. Phys.*, 48, 065401.
- Aref, H., Rott, N., & Thomann, H. (1992). Gröbli's solution of the three-vortex problem. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 24, 1. doi: 10.1146/annurev.fl.24.010192.000245
- Goldstein, H., Poole Jr, C. P., & Safko, J. L. (2001). *Classical mechanics* (3rd ed.). Pearson.
- Griffiths, D. (1996). *Εισαγωγή στην Ηλεκτροδυναμική*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Gröbli, W. (1877). *Spezielle probleme über die bewegung geradliniger paralleler wirbelfäden*. Zürich: Zürcher und Furrer.
- Helmholtz, H. (1858). über integrale der hydrodynamischen gleichungen, welche den wirbelbewegungen entsprechen. *J. Reine Angew. Math.*, 55, 33.
- Kirchhoff. (1876). *Vorlesungen über mathematische physik. mechanik*. Leipzig: Teubner.
- Komineas, S., & Papanicolaou, N. (2010). Gröbli solution for three magnetic vortices. *Journal of Mathematical Physics*, 51(4). Retrieved from <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/51/4/10.1063/1.3393506> doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3393506>
- Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (1985). *The classical theory of fields* (Fourth ed.). Pergamon Press.
- Newton, P. K. (2001). *The n-vortex problem*. Springer.
- Papanicolaou, N., & Tomaras, T. N. (1991). Dynamics of magnetic vortices. *Nucl. Phys. B*, 360, 425.
- Saffman, P. G. (1992). *Vortex dynamics*. Cambridge University Press.

Κεφάλαιο 5

Μαθηματική Βιολογία – Πληθυσμιακά Μοντέλα Ενός Είδους

Περίληψη

Στο κεφάλαιο αυτό, καθώς και στο επόμενο, θα μελετήσουμε μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν βιολογικά συστήματα. Πιο συγκεκριμένα, αρχικά δίνεται μια εισαγωγή που αναφέρεται στην «Μαθηματική Βιολογία» και κατόπιν ορίζονται τα πληθυσμιακά μοντέλα (population models), τα οποία αποτελούν ένα σύνολο υποθέσεων για την εξέλιξη του πληθυσμού κάποιου βιολογικού συστήματος, εκφρασμένες με μαθηματικές εξισώσεις. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε συνεχή μοντέλα πληθυσμών ενός είδους, δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση στο συνεχές λογιστικό μοντέλο. Κατόπιν περιγράφουμε διακριτά μοντέλα πληθυσμών ενός είδους. Σε κάθε περίπτωση εξετάζουμε διεξοδικά την ευστάθεια των μοντέλων. Επίσης παρουσιάζονται παραδείγματα από τα διαφορετικά πληθυσμιακά μοντέλα. Τέλος, στο παράρτημα υπάρχουν κώδικες σε γλώσσα MATLAB για τη μελέτη των παραδειγμάτων που παρουσιάζονται στο κεφάλαιο αυτό.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Συνήθεις και μερικές διαφορικές εξισώσεις. Λύσεις γραμμικών διαφορικών εξισώσεων.
- Διαστατική ανάλυση.
- Βασικές γνώσεις Δυναμικών Συστημάτων.

5.1 Εισαγωγή: Μαθηματική Μοντελοποίηση Βιολογικών Συστημάτων

Το κεφάλαιο αυτό ασχολείται με εφαρμογές των μαθηματικών στη βιολογία και ειδικότερα με μαθηματικά μοντέλα βιολογικών συστημάτων. Τα τελευταία αποτελούν βασικό αντικείμενο της «Μαθηματικής Βιολογίας», δηλαδή της μελέτης φαινομένων της βιολογίας με τη χρήση μαθηματικών εννοιών (Murphy, 2002). Θα πρέπει εκ των προτέρων να πούμε ότι στις μέρες μας η μαθηματική μοντελοποίηση εφαρμόζεται / αφορά σε ένα πολύ μεγάλο εύρος βιολογικών φαινομένων – προβλημάτων, η πλήρης μελέτη και παρουσίαση των οποίων είναι πέρα από τους σκοπούς του παρόντος συγγράμματος. Εδώ θα εστιάσουμε σε «βασικά» μαθηματικά μοντέλα, τα οποία αφορούν κυρίως πληθυσμούς βιολογικών ειδών καθώς και μοντέλα ασθενειών. Τα μοντέλα αυτά αποτελούν επίσης, πολύ καλά παραδείγματα για οποιοδήποτε μάθημα σχετικό με την μαθηματική μοντελοποίηση ή γενικότερα με εφαρμογές των μαθηματικών στις φυσικές επιστήμες, ή τις επιστήμες της μηχανικής («μαθηματικές επιστήμες»).

Βασικός μας λοιπόν στόχος είναι η εξοικείωση του αναγνώστη με βασικές εφαρμογές της μαθηματικής μοντελοποίησης σε σημαντικά βιολογικά προβλήματα, με μεγάλο πρακτικό ενδιαφέρον.

5.1.1 Ένα πρώτο παράδειγμα

Ας δούμε πρώτα ένα πολύ απλό παράδειγμα. Έστω ότι στόχος μας είναι η μελέτη ενός συγκεκριμένου οικοσυστήματος, π.χ. ενός είδους πουλιών το οποίο ζει σε ένα δάσος και η πρόβλεψη της *χρονικής εξέλιξης* του πληθυσμού, δηλαδή του αριθμού, των πουλιών (Brauer & Castillo-Chavez, 2012). Προφανώς ο αριθμός των πουλιών εξαρτάται από ένα μεγάλο αριθμό παραμέτρων, όπως (α) από τα υπόλοιπα είδη τα οποία ζουν στο συγκεκριμένο οικοσύστημα, (β) το μέγεθος του οικοσυστήματος, και κυρίως το πόσο «φαγητό» υπάρχει για το συγκεκριμένο είδος στο οικοσύστημα, (γ) τους δυνητικούς εχθρούς-θηρευτές που έχει το συγκεκριμένο είδος, και ασφαλώς (δ) το φυσικό ρυθμό γεννήσεων/θανάτων του είδους. Σε μια πρώτη (απλούστερη δυνατή) προσέγγιση μπορούμε να θεωρήσουμε ότι:

1. Υπάρχει «άπειρο» (πάρα πολύ για τον αριθμό των πουλιών) διαθέσιμο φαγητό, και
2. Δεν υπάρχουν φυσικοί εχθροί ή θηρευτές του συγκεκριμένου είδους.

Δηλαδή υποθέτουμε ότι η ανάπτυξη του πληθυσμού μπορεί να γίνει σε ιδανικό επίπεδο.

Έστω επίσης ότι ο πληθυσμός των πουλιών, σε χρόνο t , περιγράφεται από μια χρονικά εξαρτημένη μεταβλητή $N(t)$. Τότε, αν θεωρήσουμε ότι ο ρυθμός μεταβολής (αύξησης ή μείωσης) του πληθυσμού, δηλαδή η διαφορά φυσικών γεννήσεων και θανάτων, ανά μονάδα χρόνου Δt , είναι ο θετικός αριθμός A , ο αριθμός των πουλιών σε χρόνο $t + \Delta t$ είναι:

$$N(t + \Delta t) = N(t) + A \Delta t N(t)$$

ή αλλιώς η διαφορά του πληθυσμού σε χρόνο Δt είναι:

$$\Delta N = N(t + \Delta t) - N(t) = A \Delta t N(t) \quad (5.1)$$

Εύκολα βλέπουμε ότι αν ο χρόνος είναι συνεχής μεταβλητή, θεωρώντας δηλαδή ότι ο πληθυσμός μπορεί να περιγραφεί σε συνεχή χρονική εξέλιξη (*συνεχές μοντέλο*), ο ρυθμός μεταβολής (η παράγωγος) του πληθυσμού γίνεται:

$$\frac{dN(t)}{dt} := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta t} = AN(t). \quad (5.2)$$

Η παραπάνω συνήθης διαφορική εξίσωση, μαζί με την κατάλληλη αρχική συνθήκη, είναι ένα πρόβλημα αρχικών τιμών, ΠΑΤ (initial value problem, IVP), για την επίλυση του οποίου χρειαζόμαστε μια αρχική συνθήκη. Η αρχική συνθήκη είναι η τιμή της μεταβλητής N σε χρόνο t_0 (π.χ. ίσο με το μηδέν,

$t_0 = 0$), δηλαδή ο αριθμός των πουλιών στη χρονική στιγμή t_0 , έστω N_0 . Η λύση του παραπάνω ΠΑΤ είναι:

$$N(t) = N_0 e^{At}. \quad (5.3)$$

Βλέπουμε λοιπόν, ότι μπορούμε να προβλέψουμε τον πληθυσμό του συγκεκριμένου είδους πουλιών σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή, δηλαδή τη μεταβλητή $N(t)$, γνωρίζοντας μόνο τις σταθερές και N_0 .

Παρατήρηση 5.1. Προσέξτε ότι για να έχει βιολογική σημασία η παραπάνω εξίσωση πρέπει πάντα $N(t) \geq 0$. Επίσης παρατηρούμε ότι, κάτω από τις αρχικές υποθέσεις που έχουμε κάνει, ο πληθυσμός των πουλιών θα μεγαλώνει εκθετικά για κάθε χρονικό διάστημα, δηλαδή επ' άπειρον!

Ερώτηση κατανόησης 5.1. Νομίζετε ότι η παραπάνω συμπεριφορά είναι ρεαλιστική; Δικαιολογήστε την απάντησή σας.

Παρακάτω θα δούμε πιο λεπτομερή μοντέλα που περιγράφουν το ίδιο πρόβλημα.

5.1.2 Σπουδαιότητα Μαθηματικής Βιολογίας

Από το παραπάνω, αρκετά απλό, παράδειγμα καταλαβαίνουμε τη σπουδαιότητα της μαθηματικής μοντελοποίησης βιολογικών συστημάτων (ή της «μαθηματικής βιολογίας») η οποία μπορεί να μας δώσει άμεσες εκτιμήσεις για πραγματικά βιολογικά προβλήματα, δεδομένων κάποιων «βιολογικών υποθέσεων», δηλαδή προσεγγίσεων πραγματικών δεδομένων, χρησιμοποιώντας μαθηματικά εργαλεία (Allman, 2004).

Γενικότερα σκοπός της μαθηματικής βιολογίας είναι:

- Η μελέτη βιολογικών συστημάτων με χρήση μαθηματικών εργαλείων, και
- Η ανάπτυξη χώρο-χρονικών μαθηματικών μοντέλων για τη μελέτη βιολογικών συστημάτων.

Ορισμός. Με τον όρο *χώρο-χρονικό μαθηματικό μοντέλο* στη βιολογία εννοούμε ένα σύνολο υποθέσεων για κάποιο βιολογικό σύστημα εκφρασμένο με μαθηματικές εξισώσεις, το οποίο εμπεριέχει (εξαρτάται από) τον χώρο και τον χρόνο. Με άλλα λόγια το μαθηματικό-βιολογικό μοντέλο μπορεί να είναι ένα σύστημα εξισώσεων, ένας αλγόριθμος, ένα σύνολο αριθμών ή μια στοχαστική διαδικασία, κλπ. □

Βασικό κίνητρο για την ανάπτυξη της μαθηματικής μοντελοποίησης βιολογικών συστημάτων αποτελεί ο όλο και περισσότερο σημαντικός ρόλος της βιολογίας στις μέρες μας. Ειδικά στον 21ο αιώνα οι μεγαλύτερες τεχνολογικές ανακαλύψεις αναμένεται να βασίζονται στη βιολογία. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αφορούν τους τομείς της βιοτεχνολογίας, βιο-νανοτεχνολογίας, μοριακής ιατρικής – βιολογίας, κλπ.

Η ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων στη βιολογία γίνεται έχοντας ως βασικούς στόχους:

- Την κατανόηση βιολογικών φαινομένων με τη χρήση μαθηματικών, και
- Την *πρόβλεψη / προσομοίωση* (prediction/simulation) συμπεριφορών και ιδιοτήτων πολύπλοκων βιολογικών συστημάτων.

Είναι πολύ σημαντικό να επισημάνουμε εκ των προτέρων ότι ακριβώς λόγω της μεγάλης πολυπλοκότητας των πραγματικών βιολογικών συστημάτων δεν υπάρχει το «τέλειο» μαθηματικό μοντέλο, δηλαδή

1. Πρώτον, κάθε μοντέλο εμπεριέχει κάποιες υποθέσεις καθώς και κάποιο σφάλμα στις προβλέψεις του, και θα πρέπει πάντα να ελέγχεται με βάση τα πραγματικά αποτελέσματα, και
2. Δεύτερον, ακόμη και αν το μοντέλο παράγει αποτελέσματα σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα δε σημαίνει απαραίτητα ότι οι υποθέσεις/παραδοχές του είναι σωστές!

Επίσης, κανένα μοντέλο δεν μπορεί να συμπεριλάβει όλες τις παραμέτρους που επηρεάζουν πολύπλοκα βιολογικά συστήματα. Συνηθισμένα βιολογικά συστήματα (π.χ. πληθυσμός σε ένα οικοσύστημα, ιδιότητες βιομορίων σε ατομικό/μοριακό επίπεδο κ.α.) αποτελούνται από ένα πολύ μεγάλο αριθμό ειδών και επηρεάζονται από πολλές διαφορετικές παραμέτρους που έχουν σχέση με το περιβάλλον. Αυτό όμως δεν είναι κατ' ανάγκη πρόβλημα καθώς βασικός στόχος μας δεν είναι η περιγραφή ενός βιολογικού συστήματος με όλες τις δυνατές παραμέτρους αλλά η περιγραφή των πιο σημαντικών φυσικών παραμέτρων που περιγράφουν το συγκεκριμένο σύστημα, για το δεδομένο πρόβλημα. Προσέξτε ότι τα παραπάνω στην πραγματικότητα ισχύουν, όπως έχουμε δει στα προηγούμενα κεφάλαια, για οποιοδήποτε μοντέλο ενός πραγματικού πολύπλοκου φαινομένου – συστήματος.

Παρατήρηση 5.2. Σε πιο Μαθηματική γλώσσα θα λέγαμε ότι τα βιολογικά συστήματα αποτελούν τυπικά προβλήματα μεγάλου αριθμού μεταβλητών, ή μεγάλης διάστασης (*high dimensionality problems*). Βασικός στόχος είναι η περιγραφή τέτοιων συστημάτων με ένα μικρό αριθμό κατάλληλων μεταβλητών, ή ελάττωση της διάστασης (*dimensionality reduction*).

Η διαδικασία ανάπτυξης ενός βιολογικού μαθηματικού μοντέλου είναι επίσης παρόμοια με αυτή που είδαμε στη γενική περιγραφή μαθηματικών μοντέλων, και η οποία αποτελείται, εν συντομία, από τα παρακάτω στάδια:

1. Επιλογή ενός βιολογικού συστήματος, συλλογή και οργάνωση βιολογικών δεδομένων από πειραματικές μετρήσεις.
2. Δημιουργία του μαθηματικού μοντέλου (π.χ. πρόβλημα εκφρασμένο μέσω ενός συστήματος εξισώσεων) για τη περιγραφή του συγκεκριμένου συστήματος.
3. Επίλυση του μαθηματικού προβλήματος με τη χρήση, ή τη δημιουργία νέων, μαθηματικών εργαλείων.
4. Έλεγχος των προβλέψεων του μοντέλου με πειραματικές παρατηρήσεις.

Τέλος θα πρέπει να τονίσουμε ότι η ανάπτυξη της Μαθηματικής Βιολογίας τις τελευταίες δεκαετίες και περισσότερο τα τελευταία χρόνια είναι τόσο μεγάλη ώστε πλέον υπάρχουν αρκετά εξειδικευμένα συγγράμματα, ενώ αποτελεί ξεχωριστό μάθημα στο προπτυχιακό ή/και μεταπτυχιακό πρόγραμμα τμημάτων Μαθηματικών / Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Βιολογίας, αλλά και επιστημών της Μηχανικής. Στόχος αυτού και του επόμενου κεφαλαίου είναι η παρουσίαση των πιο βασικών μοντέλων μαθηματικής βιολογίας, τα οποία, εκτός των άλλων, αποτελούν επίσης εξαιρετικά παραδείγματα μαθηματικής μοντελοποίησης πολύπλοκων ρεαλιστικών συστημάτων. Ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης μπορεί να βρει περισσότερες πληροφορίες για μαθηματικά μοντέλα βιολογικών συστημάτων σε κλασικά συγγράμματα όπως αυτά που αναφέρονται στη βιβλιογραφία (Shonkwiler, 2002; Allman, 2004; Murray, 2002; Stewart, 1999).

5.1.3 Ιστορικά Στοιχεία

Το πρώτο (;) μαθηματικό βιολογικό μοντέλο αναπτύχθηκε από τον Fibonacci τον 13ο αιώνα (1202) (Chandra & Weisstein, 2015) (Ιστοσελίδα, Fibonacci Sequence, n.d.). Είναι ένα μοντέλο ανάπτυξης πληθυσμού λαγών. Ο Fibonacci (Leonardo of Pisa) θεώρησε το παρακάτω πρόβλημα. Έστω ένα ζευγάρι λαγών, το οποίο βρίσκεται απομονωμένο – προστατευμένο σε περιβάλλον με άφθονη τροφή. Πόσα ζευγάρια λαγών θα προκύψουν από το αρχικό ζευγάρι μέσα σε κάποιο συγκεκριμένο χρονικό διάστημα;

Οι βασικές υποθέσεις του μοντέλου είναι οι παρακάτω:

- Θεωρούμε ότι αρχικά υπάρχει ένα ζευγάρι νεογέννητων λαγών (ένα θηλυκό και ένα αρσενικό) οι οποίοι μετά από μια αναπαραγωγική περίοδο (μία χρονική περίοδο) παράγουν άλλο ένα ζευγάρι νεογέννητων αρσενικών – θηλυκών λαγών.
- Δεν λαμβάνουμε υπόψη τον θάνατο των λαγών.

- Τα νεογέννητα χρειάζονται 1 χρονική περίοδο για να φτάσουν σε ηλικία αναπαραγωγής.
- Κάθε θηλυκό γεννάει ακριβώς 1 ζευγάρι αρσενικών – θηλυκών λαγών.

Σύντομο πρόβλημα 5.1. Πόσα ζευγάρια λαγών υπάρχουν ύστερα από n χρονικές περιόδους; Σας θυμίζει κάτι αυτός ο αριθμός;

5.1.4 Μαθηματικά Μοντέλα στη Βιολογία

Τα μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται στη βιολογία μπορούν να καταταχθούν στις ακόλουθες κατηγορίες, ανάλογα με το μαθηματικό τους περιεχόμενο (Edelstein-Keshet, 1988; Murray, 2002):

- *Διακριτά / Συνεχή μοντέλα* ανάλογα με το αν η βιολογική μεταβλητή (π.χ. πληθυσμός ενός είδους) είναι συνεχής ή διακριτή. Τα διακριτά μοντέλα συνήθως καταλήγουν σε διακριτές εξισώσεις διαφορών ενώ τα συνεχή σε συνεχείς, ή μερικές, διαφορικές εξισώσεις.
- *Ντετερμινιστικά / Στοχαστικά μοντέλα*: Ανάλογα με το αν οι μαθηματικές σχέσεις είναι ντετερμινιστικές (δεν εμπεριέχουν τυχαιότητα) ή στοχαστικές (εμπεριέχουν τυχαιότητα).
- *Γραμμικά / Μη γραμμικά μοντέλα*, ανάλογα με το είδος των εξισώσεων που προκύπτουν.
- *Χρόνο-εξαρτώμενα / Χρόνο-ανεξάρτητα μοντέλα*, ανάλογα με το αν οι μεταβλητές των μοντέλων εξαρτώνται ή όχι από το χρόνο.
- *Μηχανιστικά / Περιγραφικά μοντέλα*, ανάλογα με το αν έχουν προκύψει από βασικούς νόμους, ή από μια περισσότερο ποιοτική περιγραφή του βιολογικού συστήματος.
- κλπ.

Επίσης, τα μαθηματικά μοντέλα στη βιολογία διακρίνονται, ανάλογα με το βιολογικό σύστημα-πρόβλημα το οποίο μελετάνε, σε:

- *Πληθυσμιακά μοντέλα*: Μοντέλα δηλαδή τα οποία περιγράφουν την εξέλιξη του αριθμού (πληθυσμών) βιολογικών ειδών (ζώων, φυτών κλπ.).
- *Μοντέλα Ασθενειών*, τα οποία περιγράφουν τη χρονική ή χώρο-χρονική εξέλιξη ασθενειών.
- *Μοντέλα Διάχυσης*, τα οποία περιγράφουν τη δυναμική εξέλιξη των μεταβλητών σε συγκεκριμένα χωρία, συνήθως μέσω μερικών διαφορικών εξισώσεων.
- κλπ.

Ειδικότερα τα πληθυσμιακά μοντέλα χωρίζονται σε:

- Μοντέλα ενός πληθυσμού.
- Μοντέλα αλληλεπιδρώντων πληθυσμών.

Παρακάτω θα εξετάσουμε αναλυτικά τις παραπάνω δύο κατηγορίες πληθυσμιακών μοντέλων. Σε κάθε περίπτωση θα παρουσιάσουμε τόσο συνεχή όσο και διακριτά μοντέλα.

Η μελέτη όλων των παραπάνω διαφορετικών μοντέλων είναι πέρα από τους στόχους του παρόντος συγγράμματος. Εδώ θα μελετήσουμε τα πιο σημαντικά από τα παραπάνω μοντέλα με ιδιαίτερο μαθηματικό αλλά και κυρίως με μεγάλο βιολογικό ενδιαφέρον. Πιο συγκεκριμένα, στο παρόν κεφάλαιο θα εξετάσουμε τα πληθυσμιακά μοντέλα ενός είδους, ενώ στο επόμενο κεφάλαιο (Κεφάλαιο 6) θα μελετήσουμε μοντέλα αλληλεπιδρώντων ειδών, καθώς και μοντέλα ασθενειών.

5.2 Συνεχή Πληθυσμιακά Μοντέλα Ενός Είδους

Όπως αναφέραμε και παραπάνω ένα βιολογικό πρόβλημα, με ιδιαίτερο πρακτικό ενδιαφέρον, αφορά τη χρονική εξέλιξη του πληθυσμού ενός ή περισσότερων βιολογικών ειδών, π.χ. πουλιών, ψαριών κλπ,

σε κάποιο δεδομένο, ελεγχόμενο ή μη, περιβάλλον. Τα πληθυσμιακά μοντέλα μελετούν ακριβώς τέτοιου τύπου προβλήματα. Ειδικότερα τα πληθυσμιακά μοντέλα ενός είδους περιγράφουν την χρονική εξέλιξη του συγκεκριμένου είδους, χωρίς να θεωρούν ότι υπάρχει κάποιο άλλο είδος στο συγκεκριμένο οικοσύστημα το οποίο να επηρεάζει τον πληθυσμό του είδους που μας ενδιαφέρει.

Ερώτηση κατανόησης 5.2. Δώστε παραδείγματα βιολογικών συστημάτων τα οποία περιγράφονται με μοντέλα πληθυσμού ενός είδους; Δικαιολογήστε την απάντησή σας.

Τα μοντέλα πληθυσμών ενός είδους σχετίζονται, δηλαδή μπορούν να περιγράψουν με σχετικά καλή ακρίβεια, με περιβάλλοντα (βιολογικές συνθήκες) τα οποία είτε είναι αρκετά ελεγχόμενα (π.χ. στο εργαστήριο ή σε μονάδες καλλιέργειας), είτε είναι απομονωμένα (π.χ. νησιά) στα οποία δεν υπάρχουν φυσικοί εχθροί για το υπό μελέτη είδος. Επιπλέον όμως τα μοντέλα πληθυσμών ενός είδους μπορούν να δώσουν μια πρώτη προσέγγιση πραγματικών πολύπλοκων οικοσυστημάτων.

Όπως είδαμε και παραπάνω τα μοντέλα πληθυσμών ενός είδους, αλλά και γενικότερα τα μαθηματικά μοντέλα στη βιολογία μπορούν να χωριστούν σε συνεχή και διακριτά ανάλογα με το είδος των μαθηματικών αναπαραστάσεων που χρησιμοποιούν. Θα πρέπει εδώ να σημειώσουμε:

1. Στη μελέτη των συνεχών μοντέλων (συνήθεις διαφορικές εξισώσεις) έχουμε το πλεονέκτημα της χρήσης αναλυτικών εργαλείων (βλέπε τη γενικότερη συζήτηση που αφορά τα Δυναμικά Συστήματα, Κεφάλαιο 3).
2. Με βάση τις πραγματικές συνθήκες θα περιμέναμε τα διακριτά μοντέλα να είναι πιο κοντά στη πραγματικότητα, καθώς: (α) ο πληθυσμός ενός είδους είναι διακριτή (ακέραια) μεταβλητή, και (β) η αναπαραγωγή των ειδών γίνεται σε διακριτές χρονικές περιόδους (π.χ. διάρκεια εγκυμοσύνης θηλυκών ενός είδους). Αν όμως θεωρήσουμε: (α) μεγάλους αριθμούς ατόμων του είδους και (β) ότι η χρονική περίοδος την οποία μελετάμε είναι αρκετά μεγαλύτερη από την αντίστοιχη περίοδο αναπαραγωγής μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η συνεχής περιγραφή είναι μια καλή προσέγγιση. Σε αυτή την περίπτωση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε βασικά εργαλεία συνεχών συναρτήσεων και διαφορικών εξισώσεων. Αντίθετα η επίλυση των διακριτών μοντέλων γίνεται συνήθως με αριθμητικούς τρόπους.

Λόγω της παραπάνω «ευκολίας» των συνεχών μοντέλων, περιγράφουμε πρώτα αυτά, ενώ κατόπιν βλέπουμε τα αντίστοιχα διακριτά μοντέλα.

5.2.1 Μαλθουσιανό – Εκθετικό Μοντέλο

Στην αρχή αυτού του κεφαλαίου είδαμε ήδη, ως ένα πρώτο παράδειγμα, το απλούστερο δυνατό συνεχές μαθηματικό μοντέλο πληθυσμού ενός είδους, το οποίο ονομάζεται εκθετικό ή Μαλθουσιανό, καθώς όπως είδαμε καταλήγει σε εκθετική εξέλιξη του πληθυσμού. Το μοντέλο αυτό αναπτύχθηκε από τον Malthus το 1798, ο οποίος μελετούσε την αύξηση του ανθρώπινου πληθυσμού, είναι δηλαδή το πρώτο δημογραφικό μοντέλο. Η γενική του μορφή είναι η παρακάτω.

Θεωρούμε ένα συγκεκριμένο οικοσύστημα (π.χ. λίμνη, δάσος, νησί, χώρα κλπ.). Έστω $N(t)$ ο πληθυσμός ενός είδους (π.χ. ψάρι, πουλί, ζώο, άνθρωπος, κλπ.) σε χρόνο t . Θεωρώντας ότι δεν υπάρχουν φυσικοί εχθροί για το είδος και υπάρχει «άπειρο» διαθέσιμο φαγητό ο ρυθμός μεταβολής του πληθυσμού εξαρτάται από το ρυθμό γεννήσεων και θανάτων, δηλαδή γίνεται:

$$\frac{dN(t)}{dt} = \text{Γεννήσεις} - \text{Θάνατοι} \pm \text{Μετανάστευση} \quad (5.4)$$

Ο τελευταίος όρος περιγράφει τις αλλαγές (αύξηση ή μείωση) του πληθυσμού λόγω μετακίνησης κάποιων ατόμων του πληθυσμού σε άλλα μέρη. Κάνουμε τις παρακάτω υποθέσεις:

είδους. Επίσης παρατηρούμε την ιδιαίτερα ισχυρή επίδραση της σταθεράς r : μικρή αύξηση του ρυθμού r οδηγεί σε μεγάλη αύξηση του πληθυσμού (Wikipedia, 2015). (Ιστοσελίδα, Μοντέλο Malthus, n.d.).

Ερώτηση κατανόησης 5.3. Είναι το παραπάνω μοντέλο ρεαλιστικό;

Εξίσωση του Gompertz

Μία επέκταση του εκθετικού μοντέλου επιχειρήθηκε από τον Benjamin Gompertz το 1825 για να περιγράψει το ρυθμό μεταβολής του πληθυσμού των ανθρώπων πιο ρεαλιστικά από το Μαλθουσιανό μοντέλο, λαμβάνοντας υπόψη τη θνησιμότητα (B. Gompertz, "On the Nature of the Function Expressive of the Law of Human Mortality, and on a New Mode of Determining the Value of Life Contingencies." Phil. Trans. Roy. Soc. London 123, 513-585, 1825). (Δημογραφικά μοντέλα, 2015). (Ιστοσελίδα, Δημογραφικά μοντέλα, n.d.)

Ο Gompertz προσπάθησε να βελτιώσει το δημογραφικό μοντέλο του Μάλθους χρησιμοποιώντας δεδομένα (χρονοσειρές) θνησιμότητας. Το αρχικό του μοντέλο βασίζεται στην υπόθεση ότι η «αντίσταση» στη θνησιμότητα ενός ατόμου μειώνεται όσο αυξάνεται η ηλικία του. Η εξίσωση (ή το μοντέλο) του Gompertz έχει την παρακάτω μορφή:

$$N(t) = N(0) \exp(-c(e^{at} - 1)) \quad (5.7)$$

όπου $N(0)$ είναι ο πληθυσμός (αριθμός των ατόμων) σε χρόνο 0, ενώ c, a είναι σταθερές. Το παραπάνω μοντέλο χρησιμοποιήθηκε εκτενώς από τις ασφαλιστικές εταιρείες για τον υπολογισμό του κόστους ασφάλισης ενός ατόμου συναρτήσει της ηλικίας του.

5.2.2 Λογιστικό Μοντέλο

Εύκολα καταλαβαίνουμε ότι το εκθετικό μοντέλο που παρουσιάστηκε παραπάνω, ακόμη και αν είναι ακριβές για κάποια χρονική περίοδο, δεν μπορεί να ισχύει για πολύ μεγάλα χρονικά διαστήματα. Περιμένουμε λοιπόν για το υπό μελέτη σύστημα να υπάρχει κάποια τροποποίηση της εκθετικής συμπεριφοράς και σε μεγάλους χρόνους ο πληθυσμός του είδους να σταθεροποιείται, δηλαδή ο ρυθμός μεταβολής του πληθυσμού να τείνει στο μηδέν.

Μία εξίσωση που έχει την παραπάνω ιδιότητα προτάθηκε από τον Pierre Verhulst το 1838 και ονομάζεται *λογιστική ανάπτυξη* (logistic growth), ή αλλιώς *η εξίσωση του Verhulst* [Verhulst, Pierre-François (1838). "Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement". *Correspondance mathématique et physique* 10: 113–121]. Ο Verhulst μελετούσε την εξέλιξη του πληθυσμού των ανθρώπων και στην προσπάθειά του να βελτιώσει το Μαλθουσιανό μοντέλο πρότεινε την παρακάτω εξίσωση:

$$\frac{dN}{dt} = rN \left(1 - \frac{N}{K}\right) \quad (5.8)$$

όπου K είναι μια θετική σταθερά η οποία ονομάζεται χωρητικότητα του περιβάλλοντος και r είναι μια σταθερά, η οποία περιγράφει, όπως και παραπάνω, το ρυθμό αύξησης του πληθυσμού. Η δε παράμετρος $1/r$ μπορεί να κατανοηθεί ως ο χαρακτηριστικός χρόνος απόκρισης του συστήματος σε μεταβολές του πληθυσμού.

Ο κατά κεφαλή ρυθμός μεταβολής, $G(N)$ ορίζεται ως:

$$G(N) := \frac{1}{N} \frac{dN}{dt} = r \left(1 - \frac{N}{K}\right) \quad (5.9)$$

Ερώτηση κατανόησης 5.4. Ποια είναι η φυσική σημασία του κατά κεφαλή ρυθμού μεταβολής; Ποιο είναι το πρόσημό του αν: (α) $N > K$ και (β) $N < K$;

Η χωρητικότητα μας δίνει το μέγιστο αποδεκτό σταθερό (χρόνο-ανεξάρτητο) πληθυσμό για ένα είδος και εξαρτάται από τις συνθήκες του περιβάλλοντος. Ας μελετήσουμε την παραπάνω εξίσωση, εξετάζοντας πρώτα τα σημεία ισορροπίας (Σ.Ι.) της και την ευστάθειά τους (δες επίσης Κεφάλαιο 3). Για να το επιτύχουμε ορίζουμε τη συνάρτηση $F(N)$:

$$F(N) := \frac{dN}{dt} = rN \left(1 - \frac{N}{K}\right). \quad (5.10)$$

Προσέξτε ότι η μελέτη ευστάθειας των Σ.Ι., πέρα από το μαθηματικό ενδιαφέρον, είναι ιδιαίτερα σημαντική και από βιολογικής απόψεως καθώς μας δίνει πληροφορίες για τη συμπεριφορά της μεταβλητής (εδώ πληθυσμού) γύρω από συγκεκριμένες τιμές. Ασταθές Σ.Ι. σημαίνει ότι ξεκινώντας από πληθυσμό με αυτές τις τιμές, μια μικρή αλλαγή (διαταραχή) του πληθυσμού θα τον οδηγήσει σε μεγάλους χρόνους μακριά από την αρχική του τιμή. Αντίθετα ευσταθές Σ.Ι. σημαίνει ότι ο πληθυσμός, αν βρεθεί σε αυτή την τιμή, θα τείνει να παραμείνει εκεί για όλους τους χρόνους.

Τα σημεία ισορροπίας, όπως έχουμε δει, ορίζονται ως οι τιμές της μεταβλητής (του πληθυσμού) N^* για τις οποίες η συνάρτηση $F(N)$, δηλαδή η παράγωγος dN/dt , είναι μηδέν. Στη λογιστική εξίσωση αυτά τα σημεία είναι τα:

- (α) $N^* = 0$ και
- (β) $N^* = K$.

Η μελέτη ευστάθειας των παραπάνω Σ.Ι. γίνεται, όπως είδαμε και σε προηγούμενο κεφάλαιο, θεωρώντας μια μικρή αλλαγή (διαταραχή) του πληθυσμού ϵ γύρω από ένα σημείο N^* , με αντίστοιχη γραμμικοποίηση (ανάπτυγμα Taylor και κράτημα όρων μέχρι πρώτης τάξης), η οποία θα μας δώσει:

$$\frac{d(N^* + \epsilon)}{dt} = F(N^*) + \epsilon \left. \frac{dF(N)}{dN} \right|_{N=N^*} + O(\epsilon^2) \simeq F(N^*) + \epsilon \left. \frac{dF(N)}{dN} \right|_{N=N^*}$$

Για το λογιστικό μοντέλο: $dF(N)/dt = r(1 - 2N/K)$.

Η παραπάνω εξίσωση για τα δύο σημεία ισορροπίας (Σ.Ι.) δίνει:

- $N^* = 0$. Σε αυτή την περίπτωση ο ρυθμός μεταβολής της διαταραχής μέσω της παραπάνω σχέσης γίνεται:

$$\frac{d\epsilon}{dt} = r\epsilon.$$

Η λύση της παραπάνω εξίσωσης, για μια δεδομένη αρχική τιμή της διαταραχής, ϵ_0 , είναι:

$$\epsilon = \epsilon_0 e^{rt}.$$

Βλέπουμε ότι, για θετικό r , η διαταραχή αυξάνεται εκθετικά, οπότε το Σ.Ι. είναι ασταθές. Συνεπώς αν ο αρχικός πληθυσμός δεν είναι ακριβώς μηδέν θα αρχίσει να αυξάνεται με το χρόνο. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό καθώς επιτρέπει την αύξηση του πληθυσμού, όπως και θα περιμέναμε από την εμπειρία μας σε πραγματικά βιολογικά συστήματα.

- $N^* = K$. Σε αυτή την περίπτωση ο ρυθμός μεταβολής της διαταραχής γίνεται:

$$\frac{d\epsilon}{dt} = (r - 2r)\epsilon = -r\epsilon.$$

Η λύση τώρα της εξίσωσης είναι:

$$\epsilon = \epsilon_0 e^{-rt}.$$

Εφόσον ο ρυθμός αύξησης είναι > 0 , η διαταραχή μειώνεται εκθετικά, οπότε το Σ.Ι. είναι ευσταθές. Συνεπώς αν ο αρχικός πληθυσμός φτάσει κάποια στιγμή στην τιμή K , θα παραμείνει εκεί και θα είναι ανεξάρτητος του χρόνου!

Συμπερασματικά, βλέπουμε λοιπόν ότι πρακτικά περιμένουμε ο πληθυσμός σε μεγάλους χρόνους να τείνει προς το δεύτερο (ευσταθές) σημείο ισορροπίας, $N^* = K$.

Στο επόμενο στάδιο εξετάζουμε αν η αρχική διαφορική εξίσωση έχει αναλυτική λύση. Αυτό ισχύει (η εύρεσή της αφήνεται ως άσκηση στον αναγνώστη) και, για $N(0) = N_0$, είναι:

$$N(t) = \frac{N_0 K e^{rt}}{K + N_0(e^{rt} - 1)} \quad (5.11)$$

Η παραπάνω σχέση, όπως περιμένουμε, στο όριο του $t \rightarrow \infty$ δίνει $N = K$.

Σύντομο πρόβλημα 5.2. Επιβεβαιώστε ότι η παραπάνω εξίσωση είναι λύση του αρχικού Π.Α.Τ.

Η γραφική αναπαράσταση της παραπάνω εξίσωσης φαίνεται στο Σχήμα 5.2 για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων. Πιο συγκεκριμένα εξετάζουμε δύο διαφορετικές περιπτώσεις μεταβάλλοντας τις τιμές του ρυθμού αύξησης και του αρχικού πληθυσμού.

Θεωρούμε σε όλες τις περιπτώσεις ότι $K = 1.0$. Προσέξτε ότι η εκλογή της τιμής της σταθεράς χωρητικότητας $K = 1.0$ είναι μια τυπική περίπτωση που συνήθως εξετάζουμε σε κάθε μοντέλο, το οποίο εμπεριέχει χωρητικότητα. Πρακτικά σε αυτή την περίπτωση είναι σαν να εξετάζουμε τον πληθυσμό κάνοντας μια κανονικοποίηση με τη χωρητικότητα του οικοσυστήματος.

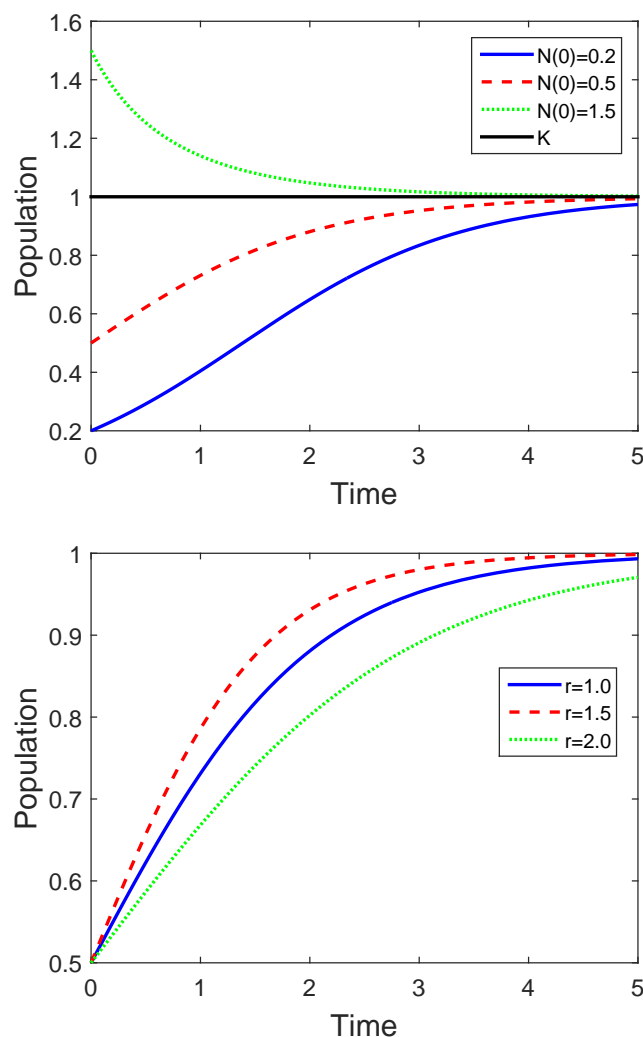
Στην πρώτη περίπτωση (Σχήμα 5.2α) θέτουμε $r = 1.0$ και εξετάζουμε τη συμπεριφορά του πληθυσμού για διαφορετικές αρχικές τιμές $N(0)$. Όπως βλέπουμε σε όλες τις περιπτώσεις ο πληθυσμός προσεγγίζει «ομαλά» την μονάδα, δηλαδή ο αριθμός ατόμων του είδους τείνει σε μεγάλους χρόνους να γίνει, και να παραμείνει, ίσος με την χωρητικότητα του περιβάλλοντος.

Στη δεύτερη περίπτωση (Σχήμα 5.2β) θέτουμε $N(0) = 0.5$ και εξετάζουμε τη συμπεριφορά του πληθυσμού για διαφορετικές τιμές του ρυθμού αύξησης r . Όπως περιμένουμε πάλι ο πληθυσμός τείνει στη χωρητικότητα του περιβάλλοντος, ο ρυθμός, όμως με τον οποίο γίνεται αυτή η προσέγγιση είναι διαφορετικός για τις διαφορετικές τιμές του r .

Το Λογιστικό μοντέλο είναι ίσως το πιο γνωστό πληθυσμιακό μοντέλο. Κύριο πλεονέκτημά του είναι η απλότητά του και βέβαια είναι πολύ πιο ρεαλιστικό από το Μαλθουσιανό μοντέλο. Ταυτόχρονα παρέχει μια πρώτη ιδέα για την ποιοτική συμπεριφορά της χρονικής εξέλιξης ενός απομονωμένου πληθυσμού ενός είδους.

Παρατήρηση 5.4. Προσέξτε ότι για την εφαρμογή του μοντέλου σε ένα πραγματικό σύστημα, όπως και για κάθε άλλο μοντέλο, χρειαζόμαστε τιμές για τις σταθερές N_0 , r και K . Οι τιμές αυτές βρίσκονται μέσα από στατιστικά δεδομένα – πειραματικές παρατηρήσεις που αφορούν ένα είδος. Κύρια πρακτική δυσκολία στην ακριβή εκτίμηση των σταθερών είναι ότι συνήθως υπάρχουν στατιστικά στοιχεία για μια συγκεκριμένη περίοδο για την οποία μπορεί μεν οι προβλέψεις του μοντέλου να είναι καλές (ακριβείς), αλλά μπορεί να μην είναι καλές για μεγαλύτερα χρονικά διαστήματα.

Ένα πρώτο παράδειγμα εφαρμογής του λογιστικού μοντέλου δόθηκε από τον Pearl [1925] ο οποίος προσπάθησε να εκτιμήσει τον πληθυσμό των Ηνωμένων Πολιτειών (USA) μέχρι το 2000. Για να το πετύχει υπολόγισε τις σταθερές του λογιστικού μοντέλου, χρησιμοποιώντας στατιστικά (δημογραφικά) δεδομένα πληθυσμού για τα έτη 1790-1930. Οι προβλέψεις του μοντέλου, ενώ ήταν σε καλή συμφωνία για το διάστημα στο οποίο υπήρχαν στατιστικά δεδομένα, υποεκτιμούσαν, όπως φάνηκε αργότερα, σε μεγάλο βαθμό τον πληθυσμό (δες επίσης <http://monkeysuncle.stanford.edu/?p=933>). Ο λόγος αυτής της «αποτυχίας» έγκειται, πολύ απλά, στο ότι στην πραγματικότητα το λογιστικό, όπως και όλα τα δημογραφικά μοντέλα, είναι ημί-εμπειρικό, και η χρήση του σε χρονικά διαστήματα για τα οποία δεν έχουμε δεδομένα είναι σε μεγάλο βαθμό προσεγγιστική.



Σχήμα 5.2: Χρονική εξέλιξη ενός πληθυσμού που ακολουθεί το Λογιστικό μοντέλο για διαφορετικές τιμές του αρχικού πληθυσμού. (α) Ο ρυθμός αύξησης είναι $r = 1.0$ και η χωρητικότητα $K = 1$. (β) Η αρχική τιμή του πληθυσμού είναι $N(0) = 0.5$ και η χωρητικότητα $K = 1$.

Γενίκευση Λογιστικού Μοντέλου – Εξίσωση von Bertalanffy

Μία γενίκευση του Λογιστικού μοντέλου προτάθηκε από τον von Bertalanffy το 1938, ο οποίος χρησιμοποίησε δεδομένα από εργασίες σε πληθυσμούς ψαριών. Πιο συγκεκριμένα η μορφή της εξίσωσης von Bertalanffy (γενίκευση της Λογιστικής Εξίσωσης) είναι:

$$\frac{dN}{dt} = r(N_{\infty} - N) \quad (5.12)$$

όπου N είναι η τιμή του πληθυσμού σε χρόνο t , N_{∞} η τιμή σε μεγάλους (άπειρο) χρόνο και r ο ρυθμός ανάπτυξης. Η παραπάνω εξίσωση είναι αυτή που χρησιμοποιείται στις μέρες μας περισσότερο από κάθε άλλη εξίσωση ανάπτυξης σε μελέτες ενός πληθυσμού, ειδικότερα σε πληθυσμούς ψαριών. Η λύση της παραπάνω εξίσωσης (αφήνεται ως άσκηση για τον αναγνώστη) είναι:

$$N(t) = N_{\infty} \left(1 - e^{-r(t-t_0)} \right). \quad (5.13)$$

Η παράμετρος t_0 χρησιμοποιείται για να προσαρμόσει την εξίσωση για το αρχικό μέγεθος του πληθυσμού και ορίζεται ως η χρονική στιγμή, για την οποία ο πληθυσμός έχει μηδενική τιμή.

Η χρήση του παραπάνω μοντέλου, όπως και κάθε άλλου βιολογικού μοντέλου, σε ένα συγκεκριμένο σύστημα απαιτεί, όπως είδαμε και παραπάνω, την εύρεση των σταθερών του μοντέλου. Συνεπώς για το συγκεκριμένο μοντέλο απαιτείται η εύρεση 3 σταθερών (r , N_∞ και t_0). Αυτό επιτυγχάνεται συνήθως με *μη-γραμμική προσαρμογή* (non-linear regression) χρησιμοποιώντας βιολογικά δεδομένα από το υπό μελέτη σύστημα.

5.2.3 Παράδειγμα: Μοντέλο με Συγκομιδή (Αλιεία)

Ένα πολύ πρακτικό βιολογικό πρόβλημα αφορά τη μελέτη ειδών τα οποία εμφανίζουν συγκομιδή. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί ο πληθυσμός ψαριών τα οποία αλιεύουμε από μια ελεγχόμενη μονάδα καλλιέργειας. Για ένα τέτοιο οικοσύστημα θα περιμέναμε οι βασικές υποθέσεις του λογιστικού μοντέλου να ισχύουν, δηλαδή

- α) Το είδος σε αυτό το ελεγχόμενο περιβάλλον δεν έχει εχθρούς,
- β) Το φαγητό βρίσκεται σε «αφθονία», και
- γ) Τα περιβάλλον (η ιχθυοκαλλιέργεια) έχει μια συγκεκριμένη χωρητικότητα πληθυσμού.

Επιπλέον όμως από τα παραπάνω θα πρέπει να ληφθεί υπόψη το ότι ο πληθυσμός μειώνεται και λόγω της *συγκομιδής ή αλιείας* (harvesting). Αν ορίσουμε ως E το ρυθμό μείωσης πληθυσμού, ανά μονάδα πληθυσμού και ανά μονάδα χρόνου, λόγω της συγκομιδής, και EN την *απόδοση της συγκομιδής* (harvesting yield) ανά μονάδα χρόνου, τότε το πρακτικό ερώτημα που θα έχει κάθε μονάδα καλλιέργειας τέτοιου είδους είναι το ποια είναι η καλύτερη (σταθερή) απόδοση συγκομιδής.

Με τον όρο της μείωσης του πληθυσμού λόγω συγκομιδής το λογιστικό μοντέλο γίνεται:

$$\frac{dN(t)}{dt} = rN(t) \left(1 - \frac{N(t)}{K}\right) - EN(t) = F(N) \quad (5.14)$$

Το παραπάνω μοντέλο έχει δύο σημεία ισορροπίας: (όλες οι ακόλουθες γραμμές φαίνεται να ξεκινούν ως νέες παράγραφοι)

- α) Το βασικό ($N^* = 0$), και
- β) Το $N^* = N_h(E) = K \left(1 - \frac{E}{r}\right)$.

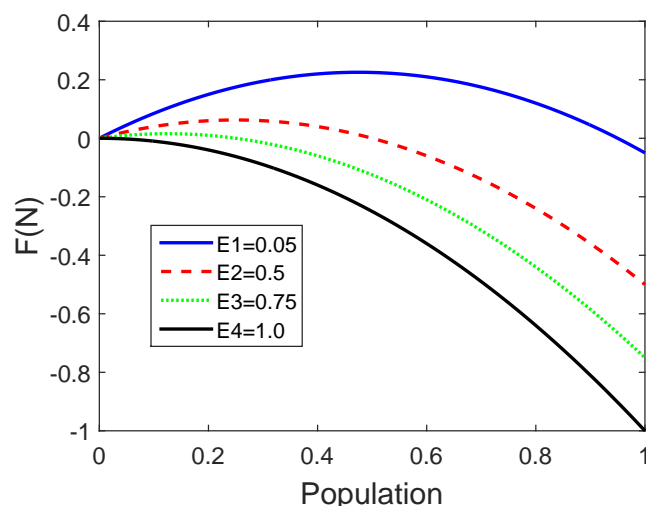
Η απόδοση της συγκομιδής ορίζεται ως: $Y(E) = N_h(E) = K \left(1 - \frac{E}{r}\right)$. Βλέπουμε ότι αν:

- $E > r$ τότε $N_h(E) < 0$, οπότε μόνη σταθερή κατάσταση είναι το $N^* = 0$, δηλαδή ο πληθυσμός πεθαίνει.
- $E < r$ τότε $N_h(E) > 0$. Αυτή είναι βασική προϋπόθεση της συγκομιδής ώστε να μην εξαφανισθεί ο πληθυσμός. Αυτό έχει τεράστια βιολογική σημασία καθώς δίνει μια βασική συνθήκη η οποία θα πρέπει να τηρείται ώστε να μην κινδυνεύσει ο πληθυσμός. Χαρακτηριστικό παράδειγμα στο οποίο δεν τηρήθηκε η συνθήκη και κινδύνεψε άμεσα ο πληθυσμός του είδους με εξαφάνιση είναι η φαλαινοθηρία κατά τη δεκαετία του 1970.

Ξαναγυρνώντας στο αρχικό ερώτημα η μέγιστη απόδοση της μονάδας βρίσκεται υπολογίζοντας το σημείο στο οποίο η παράγωγος της απόδοσης, ως προς το ρυθμός αλίευσης E μηδενίζεται. Τελικά η μέγιστη απόδοση είναι:

$$Y_{\max} = Y(E)|_{E=r/2} = \frac{rK}{4}.$$

Σύντομο πρόβλημα 5.3. Αποδείξτε την παραπάνω σχέση.



Σχήμα 5.3: Χρονική εξέλιξη του ρυθμού μεταβολής ενός πληθυσμού που ακολουθεί το Λογιστικό μοντέλο με συγκομιδή για διαφορετικές τιμές του ρυθμού αλίευσης E . Ο ρυθμός αύξησης είναι $r = 1.0$ και η χωρητικότητα $K = 1$.

Η δυναμική ανάλυση του μη βασικού Σ.Ι. μας δίνει: (όλες οι ακόλουθες γραμμές φαίνεται να ξεκινούν ως νέες παράγραφοι)

$$\frac{d(N - N_n)}{dt} = \frac{d\epsilon}{dt} \simeq F'(N_n) \epsilon$$

Όπου:

$$F'(N_n) = \left(r - 2\frac{rN}{K} - E \right) \Big|_{N=N_n} = r - \frac{2r}{K}K \left(1 - \frac{E}{r} \right) - E = E - r$$

Άρα τελικά:

$$\frac{d\epsilon}{dt} \simeq (E - r) \epsilon$$

το οποίο οδηγεί σε ευστάθεια αν $E < r$.

Η γραφική αναπαράσταση του ρυθμού μεταβολής του πληθυσμού, δηλαδή της συνάρτησης $F(N)$, για διαφορετικές τιμές του ρυθμού αλίευσης E φαίνεται στο Σχήμα 5.3. Στο γράφημα αυτό η χωρητικότητα είναι 1, δηλαδή ο πληθυσμός παρουσιάζεται ως ποσοστό της χωρητικότητας. Όπως βλέπουμε για μεγάλους ρυθμούς αλίευσης (> 1 για τις τιμές του μοντέλου που εξετάζουμε εδώ) ο ρυθμός μεταβολής του πληθυσμού είναι αρνητικός για κάθε τιμή του πληθυσμού N , πέρα από την αρχική τιμή για $N = 0$. Πρακτικά αυτό σημαίνει ότι το είδος θα εξαφανιστεί. Αντίθετα για μικρότερους ρυθμούς αλίευσης ο ρυθμός μεταβολής είναι αρχικά θετικός και κατόπιν γίνεται μηδενικός για μια τιμή του πληθυσμού. Δηλαδή υπάρχει «σταθερή» (χρονικά ανεξάρτητη) τιμή του πληθυσμού για συγκεκριμένο ρυθμό αλίευσης.

5.3 Διακριτά Πληθυσμιακά Μοντέλα Ενός Είδους

Όπως αναφέραμε στην αρχή του κεφαλαίου η θεώρηση του πληθυσμού ως συνεχή μεταβλητή ως προς το χρόνο (συνεχή μοντέλα) είναι καλή προσέγγιση για:

- (α) περιπτώσεις που οι χρονικές περίοδοι που μελετάμε είναι μεγάλες σε σχέση με την περίοδο αναπαραγωγής του είδους, ή/και
- (β) οι διαφορετικές γενεές αλληλεπικαλύπτονται (π.χ. άνθρωποι).

Όπως όμως είδαμε στην αρχή του κεφαλαίου για πολλά βιολογικά είδη οι παραπάνω υποθέσεις δεν είναι καλές (π.χ. έντομα, βακτήρια, ιοί, κλπ.). Επιπλέον, περιμένουμε η περιγραφή του πληθυσμού ως διακριτή μεταβλητή ως προς το χρόνο, να είναι καλύτερη προσέγγιση, εφόσον και στην πραγματικότητα η αναπαραγωγή γίνεται σε διακριτά διαστήματα. Στις περιπτώσεις αυτές οι πληθυσμοί μεταβάλλονται σε διακριτά βήματα και αντίστοιχα πρέπει η μελέτη τους να γίνει χρησιμοποιώντας εξισώσεις διαφορών (difference equations).

Στα διακριτά μοντέλα η τιμή μιας ποσότητας P εκφράζεται ως συνάρτηση της προηγούμενης τιμής της. Για μια χρονική μεταβλητή αυτό εκφράζεται ως: $P_{t+1} = F(P_t)$.

Ακολουθούν χαρακτηριστικά παραδείγματα διακριτών μοντέλων, ξεκινώντας από υποθέσεις παρόμοιες με αυτές των συνεχών μοντέλων που είδαμε παραπάνω. Γιατί όμως να μελετήσουμε «παρόμοια» μοντέλα; Όπως θα δούμε τα διακριτά μοντέλα μπορεί να έχουν σημαντικές ποιοτικές διαφορές σε σχέση με τα συνεχή, ακόμη και αν έχουν προκύψει από τις ίδιες αρχικές υποθέσεις!

5.3.1 Διακριτό Μαλθουσιανό Μοντέλο

Πρώτα θα εξετάσουμε το Μαλθουσιανό μοντέλο σε διακριτή μορφή.

Ερώτηση κατανόησης 5.5. Περιμένουμε διαφορετική συμπεριφορά από την εκθετική που είδαμε στη συνεχή του μορφή;

Έστω ένα είδος σε ελεγχόμενες συνθήκες εργαστηρίου, το οποίο μελετάται σε διαδοχικές διακριτές χρονικές περιόδους. Ο πληθυσμός του είδους σε χρόνο t συμβολίζεται ως P_t . Αν αντίστοιχα με το συνεχές μοντέλο περιγράψουμε τις:

- Γεννήσεις (birth) ως (bP) , όπου b είναι το ποσοστό γεννήσεων
- Θάνατοι (death) ως (dP) , όπου d είναι το ποσοστό θανάτων
- Υποθέτουμε ότι η μετανάστευση δεν συνεισφέρει στη μεταβολή του πληθυσμού.

Ερώτηση κατανόησης 5.6. Γενικά πρέπει να ισχύει $b > 0$ και $0 < d < 1$. Γιατί;

Η αλλαγή του πληθυσμού σε μία χρονική περίοδο, ή μονάδα χρόνου, είναι:

$$\Delta P = bP - dP = (b - d)P$$

και το μοντέλο γίνεται:

$$P_{t+1} = P_t + (b - d)P_t = (1 + b - d)P_t = rP_t \quad (5.13)$$

όπου r είναι ο (διακριτός) ρυθμός μεταβολής του πληθυσμού. Προσέξτε ότι για να μην υπάρχει μείωση του πληθυσμού πρέπει $r > 1$.

Έστω επίσης ότι η αρχική κατάσταση του πληθυσμού είναι $P(t = 0) = P_0$.

Ερώτηση κατανόησης 5.7. Πως συγκρίνεται αυτή η συνθήκη με την αντίστοιχη για το συνεχές εκθετικό μοντέλο; Είναι κάτι που το περιμένετε;

Προσέξτε επίσης ότι το χρονικό διάστημα (μονάδα χρόνου) μεταξύ των διαφορετικών τιμών, εξαρτάται από το είδος το οποίο μελετάμε.

Ερώτηση κατανόησης 5.8. Ποια είναι η κατάλληλη μονάδα χρόνου για τα παρακάτω συστήματα: άνθρωποι, ελέφαντες, ψάρια, βακτήρια;

Από μαθηματικής πλευράς εύκολα βλέπουμε ότι το παραπάνω πρόβλημα έχει «ακριβής» λύση: Έστω ότι η αρχική τιμή ($t = 0$) του πληθυσμού είναι P_0 . Τότε, η μεταβολή του πληθυσμού είναι:

1η χρονική περίοδος: $P_1 = rP_0$

2η χρονική περίοδος: $P_2 = rP_1 = r^2P_0$

...

n -οστη χρονική περίοδος: $P_n = r^n P_0$

δηλαδή ο πληθυσμός μπορεί να προβλεφθεί σε κάθε χρονική στιγμή, μόνο από τις σταθερές λ και P_0 .

Παράδειγμα 5.1. Έστω οργανισμός με πολύ συγκεκριμένο κύκλο ζωής (π.χ. έντομα) στον οποίο κάθε θηλυκό γεννάει 100 αυγά. Κατόπιν όλοι οι ενήλικες πεθαίνουν. Μετά από τα αυγά ένα ποσοστό (π.χ. το 10%) γίνεται ενήλικα θηλυκά, τα υπόλοιπα δεν προλαβαίνουν να ενηλικιωθούν (πεθαίνουν) ή γίνονται αρσενικά. Βρείτε τη μεταβολή του πληθυσμού.

Επίλυση. Θεωρούμε το διακριτό μοντέλο που περιγράψαμε παραπάνω. Οι παράμετροι του μοντέλου είναι:

- $d = 1$, καθώς σε μια χρονική περίοδο πεθαίνουν όλοι οι ενήλικες, και
- $b = 0.10 \times 100 = 10$, καθώς σε μια χρονική περίοδο γεννάει 100 αυγά κάθε θηλυκό, και τα θηλυκά είναι το 10% των αυγών.
- Περιγράφουμε μόνο το θηλυκό πληθυσμό.

Τελικά το μοντέλο για το συγκεκριμένο παράδειγμα είναι:

$$P_{t+1} = (1 + 10 - 1)P_t = 10P_t.$$

□

Σύντομο πρόβλημα 5.4. Ποιά πρέπει να είναι η σταθερά b ώστε ο πληθυσμός P_t να είναι σταθερός;

Ερώτηση κατανόησης 5.9. Στην ανάπτυξη του παραπάνω μοντέλου αμελήσαμε τον αρσενικό πληθυσμό. Γιατί; Μπορείτε να σκεφτείτε περιπτώσεις όπου το να αμελούμε τον αρσενικό πληθυσμό δεν είναι καλή υπόθεση;

Προσέξτε ότι το παραπάνω μοντέλο είναι γραμμικό και προβλέπει συνεχή αύξηση του πληθυσμού. Μας «θυμίζει» συνεπώς το συνεχές Μαλθουσιανό μοντέλο, καθώς παρουσιάζει παρόμοια με την εκθετική μεταβολή. Επίσης βασική υπόθεση στο μοντέλο είναι ότι τόσο οι γεννήσεις όσο και οι θάνατοι είναι ανεξάρτητοι του μεγέθους του πληθυσμού. Αυτό, όπως και στο συνεχές μοντέλο, είναι προβληματικό καθώς ο πληθυσμός δεν μπορεί να αυξάνει επ' άπειρον!

5.3.2 Διακριτό Λογιστικό Μοντέλο

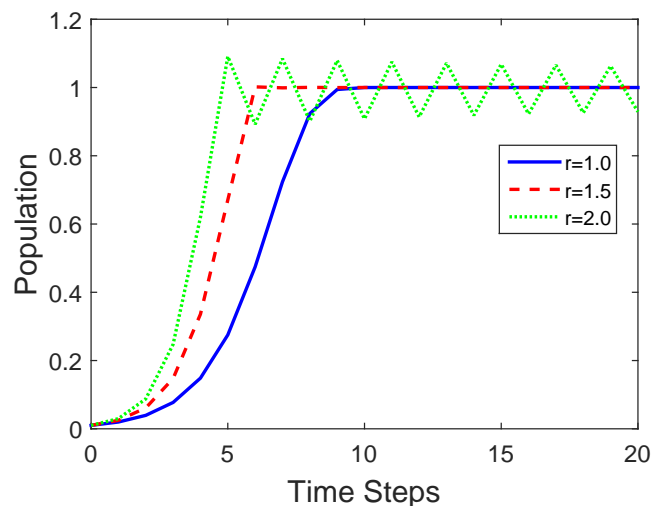
Για την «βελτίωση» του παραπάνω μοντέλου, αντίστοιχη με αυτή του συνεχούς μοντέλου, χρειαζόμαστε ένα κατά κεφαλή ρυθμό μεταβολής, ο οποίος να είναι ανάλογος του πληθυσμού, δηλαδή:

$$\frac{\Delta P}{P} = F(P),$$

όπου $F(P)$ είναι μια δεδομένη συνάρτηση. Μια πρώτη επέκταση του διακριτού γραμμικού (Μαλθουσιανού) μοντέλου είναι το διακριτό λογιστικό μοντέλο. Η μορφή του είναι:

$$\frac{\Delta P}{P} = r \left(1 - \frac{P}{K}\right) \Rightarrow P_t = P_t \left[1 + r \left(1 - \frac{P_t}{K}\right)\right] \quad (5.16)$$

όπου K και r είναι, όπως και στο συνεχές Λογιστικό μοντέλο, αντίστοιχα η χωρητικότητα του περιβάλλοντος και ο (διακριτός) ρυθμός μεταβολής του πληθυσμού. Όπως βλέπουμε από την παραπάνω



Σχήμα 5.4: Χρονική εξέλιξη ενός πληθυσμού που ακολουθεί το διακριτό Λογιστικό μοντέλο για διαφορετικούς ρυθμούς ανάπτυξης. Σε κάθε περίπτωση ο αρχικός πληθυσμός είναι και $P_0 = 0.01$ και η χωρητικότητα $K = 1$.

εξίσωση περιμένουμε σε μεγάλους χρόνους ο πληθυσμός να πλησιάζει την τιμή K καθώς το δεξί μέλος της εξίσωσης γίνεται μονάδα.

Αν και αρκετά απλό το διακριτό λογιστικό μοντέλο δεν έχει γενική λύση για το P_t συναρτήσει της αρχικής τιμής P_0 και των σταθερών r και K . Αυτό σημαίνει ότι ο μόνος τρόπος επίλυσης είναι ο επαναληπτικός υπολογισμός, δηλαδή για να βρούμε το P_{100} πρέπει να κάνουμε 100 επαναλήψεις! Για το λόγο αυτό η «επίλυση» αυτού, αλλά και των περισσότερων διακριτών μοντέλων, γίνεται με χρήση υπολογιστή. Στη περίπτωση μας η επίλυση του μοντέλου έχει γίνει με κώδικα σε γλώσσα MATLAB, ο οποίος βρίσκεται στο τέλος του κεφαλαίου.

Η γραφική παράσταση του παραπάνω μοντέλου για ένα συγκεκριμένο παράδειγμα φαίνεται στο Σχήμα 5.4. Πιο συγκεκριμένα βλέπουμε την χρονική εξέλιξη του πληθυσμού για τρεις διαφορετικούς ρυθμούς ανάπτυξης. Σε κάθε περίπτωση θεωρούμε χωρητικότητα $K = 1$ (ο πληθυσμός έχει κανονικοποιηθεί με την χωρητικότητα) και ο αρχικός πληθυσμός είναι $P_0 = 0.01$. Προσέξτε ότι αν ο αρχικός πληθυσμός είναι μηδέν δεν υπάρχει εξέλιξη του πληθυσμού, παραμένει δηλαδή πάντα μηδέν!

Επίσης βλέπουμε ότι η συμπεριφορά του μοντέλου για μεγάλους ρυθμούς ανάπτυξης σε μεγάλους χρόνους γίνεται *περιοδική*. Αυτό είναι μια «εγγενής» ιδιαιτερότητα η οποία προκύπτει λόγω της ασυνέχειας του πληθυσμού, καθώς όπως είδαμε δεν εμφανίζεται σε καμία περίπτωση στο συνεχές λογιστικό μοντέλο. Σε ακόμη μεγαλύτερους ρυθμούς ανάπτυξης η συμπεριφορά του μοντέλου γίνεται χαοτική όπως θα δούμε παρακάτω.

Ερώτηση κατανόησης 5.10. Τι συμβαίνει αν αλλάξουμε τον αρχικό πληθυσμό; Τι συμβαίνει αν αυξήσουμε παραπάνω τον ρυθμό αύξησης; Δοκιμάστε μόνοι σας.

Παρακάτω εξετάζουμε με μεγαλύτερη λεπτομέρεια την συμπεριφορά του πληθυσμού σε μεγάλους χρόνους, δηλαδή την κατάσταση ισορροπίας (αν υπάρχει) όπως περιγράφεται από το διακριτό λογιστικό μοντέλο.

Ανάλυση Μη-γραμμικών Διακριτών Μοντέλων: Χαοτική Συμπεριφορά

Έστω P^* το σημείο ισορροπίας, ή καλύτερα για διακριτή μεταβλητή η τιμή ισορροπίας, T.I., (equilibrium value), για ένα μη-γραμμικό διακριτό μοντέλο, της μορφής: $P_{t+1} = F(P_t)$. Η ανάλυση ευστάθειας γί-

νεται όπως και στα συνεχή μοντέλα (δες παραπάνω και Κεφάλαιο 3).

Αρχικά θα δώσουμε μια γενική περιγραφή σε αναλογία με την περίπτωση των συνεχών μοντέλων. Η Τ.Ι. ορίζεται ως η τιμή του πληθυσμού P^* για την οποία: $P^* = F(P^*)$. Έστω μια διαταραχή ϵ γύρω από την Τ.Ι., τότε θεωρώντας γραμμική μεταβολή (γραμμικοποίηση) για την τιμή του πληθυσμού, αυτή σε γίνεται

$$P_t = P^* + \epsilon_t$$

στο βήμα t , και

$$P_{t+1} = P^* + \epsilon_{t+1}$$

στο βήμα $t + 1$. Από τις δύο παραπάνω σχέσεις, εύκολα βλέπουμε ότι

$$\frac{\epsilon_{t+1}}{\epsilon_t} = \frac{P_{t+1} - P^*}{P_t - P^*} = \frac{F(P_t) - F(P^*)}{P_t - P^*}$$

από τον ορισμό της Τ.Ι. Στο όριο που το $P_t \rightarrow P^*$ μπορούμε να ορίσουμε μια προσεγγιστική «παράγωγος» τη μορφής:

$$F'(P^*) := \lim_{P_t \rightarrow P^*} \frac{F(P_t) - F(P^*)}{P_t - P^*}$$

Για την μελέτη ευστάθειας, και με βάση τους παραπάνω ορισμούς, χρησιμοποιούμε το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα. Αν ένα διακριτό μοντέλο της μορφής $P_{t+1} = F(P_t)$ έχει Τ.Ι. P^* τότε

- Αν $|F'(P^*)| < 1$: το σημείο είναι ευσταθές.
- Αν $|F'(P^*)| > 1$: το σημείο είναι ασταθές.
- Αν $|F'(P^*)| = 1$: δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε την ευστάθεια.

Επιστρέφοντας στο διακριτό λογιστικό μοντέλο που είδαμε παραπάνω, οι τιμές ισορροπίας του μοντέλου είναι: $P^* = 0$ ή $P^* = K$.

Κατόπιν, γραμμικοποίηση του μοντέλου αυτού θα μας δώσει:

$$F'(P) = \left(1 + r - \frac{2rP_t}{K}\right). \quad (5.17)$$

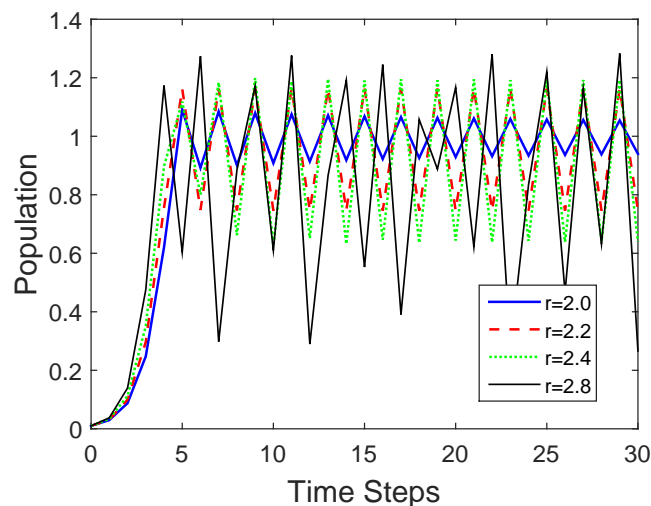
Συνεπώς έχουμε:

- $P^* = 0$. Το σημείο είναι πάντα ασταθές (εφόσον $r > 0$).
- $P^* = K$. Αν $|1 - r| < 1$: το σημείο είναι ευσταθές. Αν $|1 - r| > 1$: το σημείο είναι ασταθές.

Βλέπουμε ότι το σημείο $P^* = K$ έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, καθώς

- Αν $0 < 1 - r < 1$: το σημείο είναι ευσταθές.
- Αν $1 < r < 2$: το σημείο είναι ευσταθές αλλά το πρόσημο της διαταραχής εναλλάσσεται όσο ο χρόνος αυξάνει. Δηλαδή ο πληθυσμός φτάνει στην Τ.Ι. με ταλάντωση.
- Αν $r > 2$: Ο πληθυσμός δεν έχει Τ.Ι. Το σημείο είναι ασταθές.
- Αν το r είναι αρκετά μεγάλο ο πληθυσμός δεν φτάνει σε ισορροπία, και ταυτόχρονα δεν μεταβάλλεται μονότονα. Εμφανίζει δηλαδή μη προβλέψιμη (χαοτική) συμπεριφορά.

Ερώτηση κατανόησης 5.11. Πως συγκρίνεται η παραπάνω συμπεριφορά με το συνεχές λογιστικό μοντέλο;



Σχήμα 5.5: Χρονική εξέλιξη ενός πληθυσμού που ακολουθεί το διακριτό Λογιστικό μοντέλο για σχετικά μεγάλους ρυθμούς ανάπτυξης. Σε κάθε περίπτωση ο αρχικός πληθυσμός είναι και $P_0 = 0.01$ και η χωρητικότητα $K = 1$.

Η γραφική παράσταση της χαοτικής συμπεριφοράς φαίνεται στα Σχήματα 5.5 και 5.6. Αρχικά στο Σχήμα 5.5 εμφανίζεται η συμπεριφορά του μοντέλου για ρυθμούς ανάπτυξης μεγαλύτερους από αυτούς που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Η συμπεριφορά στους μεγάλους χρόνους είναι περιοδική, ωστόσο όσο μεγαλώνει ο ρυθμός αύξησης r γίνεται μη προβλέψιμος. Αυτή είναι μια τυπική συμπεριφορά χαοτικού δυναμικού συστήματος (ντετερμινιστικό χάος, deterministic chaos) όπως είδαμε και στα Δυναμικά συστήματα (Κεφάλαιο 3).

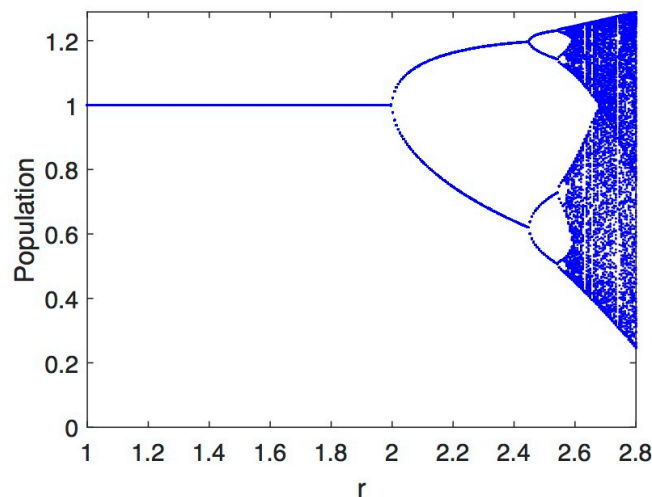
Κατόπιν στο Σχήμα 5.6 εμφανίζεται το διάγραμμα διακλάδωσης (bifurcation diagram) για έναν πληθυσμό που περιγράφεται με το διακριτό λογιστικό μοντέλο. Το διάγραμμα διακλάδωσης είναι μια γραφική παράσταση με όλες τις τιμές ισορροπίας P_t για δεδομένο r . Πρακτικά προκύπτει κρατώντας όλες τις τιμές του πληθυσμού P_t για μεγάλους χρόνους t , εξαιρώντας δηλαδή τις αρχικές τιμές. Συνήθως το δείχνουμε ως πυκνότητα πληθυσμού (population density), P_t/K vs. r . Όπως βλέπουμε για μικρούς ρυθμούς αύξησης r υπάρχει μόνο μια σταθερή τιμή του πληθυσμού. Για μεγαλύτερες τιμές του r αρχίζουν να εμφανίζονται δυο σταθερές τιμές (κύκλος δύο τιμών). Για ακόμη μεγαλύτερες τιμές του ρυθμού r οι τιμές γίνονται 4 (κύκλος τεσσάρων τιμών) κ.ο.κ. Σε κάθε περίπτωση ο κύκλος $2n + 1$ είναι μικρότερος σε εύρος των r από τον $2n$. Για μια δεδομένη τιμή του r ($r \approx 2.692 \dots$) όλοι οι πιθανοί κύκλοι έχουν ενεργοποιηθεί και η τιμή του P_t (ή P_t/K) γίνεται τυχαία – χαοτική («ντετερμινιστικό χάος»).

Η παραπάνω συμπεριφορά έχει, πέρα από το μαθηματικό και τεράστιο βιολογικό ενδιαφέρον, καθώς αποδεικνύει ότι πολύπλοκη δυναμική εξέλιξη ενός απομονωμένου πληθυσμού, μπορεί να προέλθει ακόμη και χωρίς καμία αλλαγή στο περιβάλλον! Επίσης εξηγεί την περιοδική συμπεριφορά που εμφανίζουν βιολογικά είδη (π.χ. πληθυσμοί ψαριών) ακόμη και σε απομονωμένα ή ελεγχόμενα οικοσυστήματα. Περισσότερες πληροφορίες για μελέτη συστημάτων που εμφανίζουν χαοτική συμπεριφορά μπορούν να βρεθούν σε πιο εξειδικευμένα συγγράμματα. (Strogatz, 2000)

5.3.3 Παράδειγμα: Διακριτό Μοντέλο Ανάπτυξης Καρκινικών Κυττάρων

Ω παράδειγμα, εδώ θα δούμε ένα διακριτό μοντέλο για την μελέτη του πληθυσμού (ανάπτυξη) καρκινικών κυττάρων το οποίο έχει προταθεί από τους S. Cross and D. Cotton το 1994 [S.S. Cross and D.W.K. Cotton. Chaos and antichaos in pathology. Human Pathol., 25:630–637, 1994].

Στο μοντέλο αυτό θεωρούμε το ποσοστό καρκινικών κυττάρων P_t , ως προς το σύνολο όλων των



Σχήμα 5.6: Διάγραμμα διακλάδωσης ενός πληθυσμού που ακολουθεί το διακριτό Λογιστικό μοντέλο.

κυττάρων, το οποίο στη διακριτή χρονική στιγμή t δίνεται από την εξίσωση:

$$P_{t+1} = rP_t[1 - P_t] = F(P) \quad (5.18)$$

όπου r είναι ο ρυθμός αύξησης των καρκινικών κυττάρων. Προσέξτε ότι η μορφή του μοντέλου είναι αρκετά παρόμοια, αλλά όχι ακριβώς ίδια, με αυτή του διακριτού Λογιστικού μοντέλου.

Προσέξτε ότι για να μην υπάρχει μείωση του πληθυσμού πρέπει και πάλι $r > 1$. Επίσης ως ποσοστό πληθυσμού, πρέπει: $0.0 \leq P_t \leq 1.0$.

Παρακάτω μελετούμε την ευστάθεια του μοντέλου. Αρχικά υπολογίζουμε την τιμή ισορροπίας, P^* , η οποία είναι:

$$P_{t+1} = F(P_t)|_{P_t=P^*} = P_t \Rightarrow r(1 - P^*) = 1 \Rightarrow P^* = \frac{r-1}{r}.$$

Όπως βλέπουμε η Τ.Ι. εξαρτάται από το ρυθμό r . Η ανάλυση ευστάθειας για την τιμή ισορροπίας στο συγκεκριμένο μοντέλο δίνει:

$$f'(P) = r - 2rP(t) \Rightarrow f'(P_t)|_{P_t=P^*} = r - 2(r-1) = 2 - r.$$

Συνεπώς:

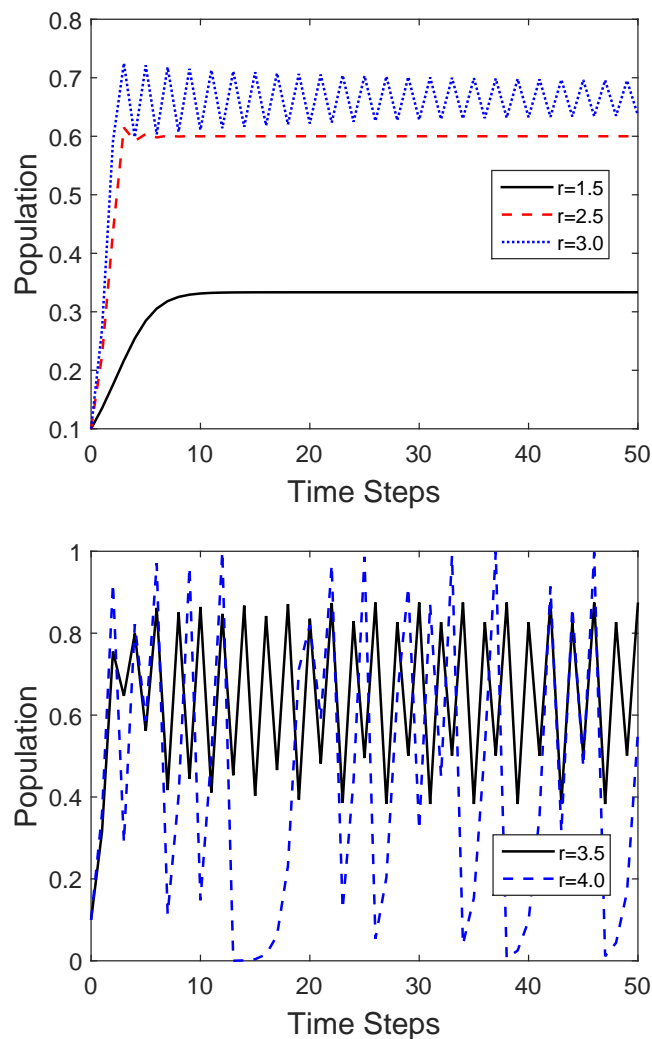
- Αν $|f'(P)| < 1$ ή $r < 3$: το σημείο είναι ευσταθές.
- Αν $|f'(P)| > 1$ ή $r > 3$: το σημείο είναι ασταθές.

Παράδειγμα χρονικής εξέλιξης ενός πληθυσμού ανάπτυξης καρκινικών κυττάρων που ακολουθεί το παραπάνω διακριτό μοντέλο φαίνεται στα Σχήματα 5.7α και 5.7β. Πιο συγκεκριμένα στο Σχήμα 5.7α βλέπουμε την μεταβολή του πληθυσμού για μικρές και στο Σχήμα 5.7β για μεγαλύτερες τιμές του ρυθμού ανάπτυξης. Παρατηρήστε τις διαφορές.

5.4 Μελέτη

5.4.1 Ασκήσεις

Άσκηση 5.1. Εκθετικό Μοντέλο – Επίλυση



Σχήμα 5.7: Χρονική εξέλιξη ενός πληθυσμού που ακολουθεί το διακριτό μοντέλο για την ανάπτυξη των καρκινικών κυττάρων για διαφορετικούς ρυθμούς ανάπτυξης. Ο αρχικός πληθυσμός είναι σε κάθε περίπτωση $P_0 = 0.1$.

Όπως είδαμε το Μαλθουσιανό (εκθετικό) μοντέλο ορίζεται από τη συνήθη διαφορική εξίσωση:

$$\frac{dN(t)}{dt} = (b - d)N(t) = rN(t)$$

- (α) Βρείτε τη λύση για αρχική τιμή του πληθυσμού $N(t = 0) = N_0$.
- (β) Βρείτε τα (ή το) σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ευστάθειά τους.

Άσκηση 5.2. Εκθετικό Μοντέλο – Περιγραφή

Όπως είδαμε το Μαλθουσιανό (εκθετικό) μοντέλο προβλέπει εξέλιξη του πληθυσμού η οποία δίνεται ως

$$N(t) = N_0 e^{rt}.$$

Μελετήστε την εξέλιξη του πληθυσμού, κάνοντας τη γραφική παράσταση $N(t)$ vs. t , για:

- (α) $r = 1.0$, και διαφορετικές τιμές του $N(0) = N_0$, π.χ. $N_0 = 0.01, 0.1, 1, 10, 100$.
- (β) $N_0 = 1.0$, και διαφορετικές τιμές του r , π.χ. $r = 0.1, 1, 2, 5$.

Τι παρατηρείτε;

Άσκηση 5.3. Συνεχές Λογιστικό Μοντέλο – Επίλυση

Η λογιστική εξίσωση, δηλαδή διαφορική εξίσωση που περιγράφει το συνεχές λογιστικό (logistic) μοντέλο είναι η εξής:

$$\frac{dN}{dt} = rN \left(1 - \frac{N}{K} \right)$$

όπου r, K θετικές σταθερές. Θεωρήστε αρχική συνθήκη $N(t=0) = N_0$. Δείξτε ότι η λύση του παραπάνω προβλήματος αρχικών τιμών είναι:

$$N(t) = \frac{N_0 K e^{rt}}{K + N_0(e^{rt} - 1)}.$$

[Υπόδειξη: Η λογιστική εξίσωση είναι μια υποπερίπτωση των εξισώσεων Bernoulli.]

Άσκηση 5.4. Συνεχές Λογιστικό Μοντέλο – Μελέτη

Έστω πληθυσμός που περιγράφεται από το συνεχές λογιστικό μοντέλο ως:

$$N(t) = \frac{N_0 K e^{rt}}{K + N_0(e^{rt} - 1)}$$

όπου r, K , και N_0 είναι θετικές σταθερές. Χρησιμοποιώντας ένα πρόγραμμα γραφικών παραστάσεων κάνετε τα παρακάτω:

- (α) Κάνετε τη γραφική παράσταση $N = N(t)$, για $K = 1, r = 1.0$, και διαφορετικές τιμές του $N(0) = N_0$, π.χ. $N_0 = 0.01, 0.1, 1, 10, 100$.
- (β) Κάνετε τη γραφική παράσταση $N = N(t)$, για $K = 1, N(0) = 2$, και διαφορετικές τιμές του ρυθμού αύξησης r , π.χ. $r = 0.1, 1, 2, 5, 10$.

Συζητήστε όλα τα παραπάνω αποτελέσματα.

Άσκηση 5.5. Εξίσωση von Bertalanffy

Μελετήστε το γενικευμένο συνεχές λογιστικό μοντέλο, ή αλλιώς εξίσωση von Bertalanffy.

1. Πρώτα επιβεβαιώστε τη λύση της εξίσωσης.
2. Κατόπιν κάνετε γραφικές παραστάσεις της λύσης για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων.

Σε κάθε περίπτωση συγκρίνετε με τις προβλέψεις του Λογιστικού μοντέλου.

Άσκηση 5.6. Λογιστικό μοντέλο με συγκομιδή

Έστω μονάδα ιχθυοκαλλιέργειας, στην οποία εκτρέφεται και αλιεύεται ένα συγκεκριμένο είδος ψαριού. Θεωρήστε ότι ο πληθυσμός του είδους περιγράφεται από το συνεχές λογιστικό μοντέλο με συγκομιδή της μορφής:

$$\frac{dN(t)}{dt} = rN(t) \left(1 - \frac{N(t)}{K} \right) - EN(t) = F(N)$$

- (α) Βρείτε τα σημεία ισορροπίας του πληθυσμού και μελετήστε την ευστάθειά τους.
- (β) Βρείτε τη μέγιστη απόδοση της μονάδας.

Άσκηση 5.7. Διακριτό Λογιστικό Μοντέλο

Θεωρήστε το διακριτό λογιστικό μοντέλο:

$$\Delta P = rP [1 - P/1000].$$

Βρείτε και γράψτε σε μια αναφορά τα ακόλουθα:

- (α) Αλλάξτε τις μονάδες πληθυσμού ώστε η χωρητικότητα K να είναι $K = 1$ και η μόνη παράμετρος του μοντέλου να είναι ο ρυθμός αύξησης r . Κατόπιν εξετάστε την μακροπρόθεσμη (long-term) χρονική συμπεριφορά για διαφορετικές τιμές του r ξεκινώντας από 0.5.
- (β) Για ποια τιμή του r παρατηρούμε την αλλαγή της συμπεριφοράς σε ταλαντώσεις 2 κύκλων; 4 κύκλων; 8-κύκλων;
- (γ) Πως επηρεάζει τη λύση η αύξηση της τιμής του r ; Συγκρίνετε με την περίπτωση του συνεχούς λογιστικού μοντέλου.

5.4.2 Εργασίες

Αναφέρουμε ενδεικτικά θέματα για εργασίες (projects) κατά τη διάρκεια της διδασκαλίας του μαθήματος. Οι εργασίες μπορεί να είναι ατομικές ή ομαδικές.

Εργασία 5.1. *Λογιστικό Μοντέλο: Συνεχές ή Μοντέλο με μη-σταθερή χωρητικότητα.*

Για είδη με μικρή χρονική διάρκεια ζωής (π.χ. έντομα) μπορεί να μην είναι καλή παραδοχή η σταθερή χωρητικότητα στο λογιστικό μοντέλο.

Μελετήστε τι γίνεται αν περιγράψουμε ένα πληθυσμό με το διακριτό λογιστικό μοντέλο:

$$P_{t+1} = P_t [1 + r (1 - P_t/K(t))]$$

όπου η χωρητικότητα μεταβάλλεται με ταλάντωση. Θεωρήστε: $= 5 + \sin((2\pi/12)t)$.

- A) Εξηγήστε γιατί η χωρητικότητα η οποία μεταβάλλεται με ταλάντωση μπορεί να είναι καλή υπόθεση για κάποιες περιβαλλοντικές συνθήκες.
- B) Μελετήστε τη συμπεριφορά, με κατάλληλα γραφήματα, για διαφορετικές τιμές των r , $P(0)$. Ελέγξτε κυρίως τη συμπεριφορά σε μεγάλους χρόνους. Είναι τα αποτελέσματα σε συμφωνία με ότι περιμένατε;
- Γ) Τι γίνεται αν η συχνότητα της ταλάντωσης αλλάξει; Δοκιμάστε $= 5 + \sin((2\pi/t)t)$ για διαφορετικά X .
- Δ) Όσο το r μεγαλώνει εμφανίζει το σύστημα διακλάδωση (bifurcation), χάος;

Εργασία 5.2. *Μοντέλα Leslie-Usher*

Κατηγοριοποίηση ενός πληθυσμού ανάλογα με κάποιους δείκτες. Τα μοντέλα Leslie-Usher μπορούν να χρησιμοποιηθούν για το σχεδιασμό στρατηγικών ανάπτυξης πληθυσμών οι οποίοι κινδυνεύουν. Στόχος: Η μελέτη μοντέλων με διάκριση πληθυσμού κατά ηλικία (Age structured population models). Εφαρμογή σε ένα μοντέλο για τις θαλάσσιες χελώνες.

Βιβλιογραφία: Allman and Rhodes, 2004, Κεφάλαιο 2.

Εργασία 5.3. *Καθορισμός φύλλου ανάλογα με τη θερμοκρασία (Temperature-Dependent Sex Determination, TSD).*

Σε κάποια είδη (π.χ. κροκόδειλος) το φύλο καθορίζεται από τη θερμοκρασία επώασης των αυγών κατά τη διάρκεια της κύησης. Στόχος: Η ανάπτυξη ενός πληθυσμιακού μοντέλου για τη μελέτη του φαινομένου TSD. Θα πρέπει να συμπεριλάβετε τη διαφορετική συμπεριφορά ανάλογα με το φύλλο καθώς και την ηλικία.

Βιβλιογραφία: (Murray 2002, Κεφάλαιο 4).

Βιβλιογραφία

Allman, J. R. (2004). *Mathematical models in biology: An introduction*. Cambridge: Cambridge University Press.

- Brauer, F., & Castillo-Chavez, C. (2012). *Mathematical models in population biology and epidemiology* (2nd ed.). New York: Springer. Retrieved from <http://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4614-1686-9>
- Chandra, P., & Weisstein, E. W. (2015). *Fibonacci number*. Retrieved from <http://mathworld.wolfram.com/FibonacciNumber.html> (From MathWorld—A Wolfram Web Resource)
- Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical models in biology*. Boston: McGraw-Hill.
- Murray, J. D. (2002). *Mathematical biology i: An introduction*. New York: Springer. Retrieved from <http://www.springerlink.com/content/j9x310>
- Shonkwiler, R. W. (2002). *Mathematical biology i: An introduction with maple and matlab*. Springer. Retrieved from <http://www.springerlink.com/content/978-0-387-70983-3/>
- Stewart. (1999). *Life's other secret: The new mathematics of the living world*. Wiley. John Wiley & Sons. Inc.
- Strogatz, S. (2000). *Nonlinear dynamics and chaos*. Westview Press.
- Wikipedia. (2015). *Μοντέλο malthus*. An Essay on the Principle of Population. Retrieved from https://en.wikipedia.org/wiki/An_Essay_on_the_Principle_of_Population
- Δημογραφικά μοντέλα. (2015). Models of Human Population Growth. Retrieved from <http://monkeysuncle.stanford.edu/?p=933>

Κεφάλαιο 6

Μαθηματική Βιολογία – Μοντέλα Αλληλεπιδρώντων Πληθυσμών

Περίληψη

Στο κεφάλαιο αυτό, συνεχίζουμε την παρουσίαση των μαθηματικών μοντέλων που περιγράφουν βιολογικά συστήματα. Πιο συγκεκριμένα, εδώ θα μελετήσουμε πληθυσμιακά μοντέλα με περισσότερα του ενός είδους καθώς και δυναμικά μοντέλα ασθενειών. Αρχικά περιγράφονται συνεχή και διακριτά μοντέλα πληθυσμών αλληλεπιδρώντων πληθυσμών. Βλέπουμε μοντέλα τύπου θηρευτή-θηράματος, ανταγωνισμού και συμβίωσης. Σε κάθε περίπτωση κοιτάμε συνεχή και διακριτά μοντέλα. Κατόπιν παρουσιάζουμε δυναμικά μοντέλα που περιγράφουν εξέλιξη ασθενειών. Αναφέρονται διεξοδικά παραδείγματα από κάθε περίπτωση. Η επίλυση αρκετών παραδειγμάτων γίνεται με αλγορίθμους, ενώ στο παράρτημα του κεφαλαίου υπάρχουν οι αντίστοιχοι κώδικες σε γλώσσα MATLAB.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Συνήθεις και μερικές διαφορικές εξισώσεις. Λύσεις γραμμικών διαφορικών εξισώσεων.
- Διαστατική ανάλυση.
- Βασικές γνώσεις Δυναμικών Συστημάτων.

6.1 Συνεχή Μοντέλα Αλληλεπιδρώντων Πληθυσμών

Όπως αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο τα πληθυσμιακά μοντέλα ενός είδους βασίζονται στην υπόθεση ότι δεν υπάρχει κάποιο άλλο είδος το οποίο να επηρεάζει τον πληθυσμό του υπό εξέταση είδους. Σε πολλές περιπτώσεις όμως έχουμε ένα οικοσύστημα στο οποίο δύο ή περισσότερα είδη αλληλεπιδρούν ισχυρά και ο πληθυσμός τους δεν μπορεί να περιγραφεί ανεξάρτητα αλλά θα πρέπει να ληφθούν υπόψη οι πληθυσμοί όλων των ειδών. Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι ένα περιβάλλον (π.χ. δάσος) στο οποίο συνυπάρχουν δύο είδη από το οποία το ένα τρώει το άλλο (π.χ. λαγός – αλεπού) (Murray, 2002). Μαθηματικά αυτό απαιτεί πεπλεγμένες εξισώσεις των μεταβλητών των πληθυσμών.

Η απλούστερη περίπτωση αλληλεπιδρώντων πληθυσμών αφορά τη μελέτη οικοσυστήματος στο οποίο δύο είδη αλληλεπιδρούν σε μεγάλο βαθμό. Υπάρχουν διαφορετικοί πιθανοί τύποι αλληλεπιδράσεων, οι κυριότεροι εκ των οποίων είναι οι εξής:

1. *Θηρευτής–Θήραμα* (Predator-Prey): Αν το ένα είδος τρέφεται με το άλλο, ο πληθυσμός του ενός (θηράματος) μειώνεται και του άλλου (θηρευτή) αυξάνεται. Χαρακτηριστικό παράδειγμα: λαγός – αλεπού σε ένα δάσος.
2. *Ανταγωνισμός* (Competition): Τα δύο είδη ανταγωνίζονται μεταξύ τους για κάποια κοινή τροφή στο οικοσύστημα. Σε αυτή την περίπτωση ο πληθυσμός και των δύο ειδών μειώνεται λόγω ανταγωνισμού. Χαρακτηριστικό παράδειγμα: δύο είδη πουλιών που ανταγωνίζονται για το ίδιο φαγητό.
3. *Συμβίωση* (Mutualism ή Symbiosis): Τα δύο είδη βρίσκονται σε αρμονική συμβίωση καθώς το ένα «βοηθάει» το άλλο. Ο πληθυσμός και των δύο ειδών αυξάνει. Χαρακτηριστικό παράδειγμα: έντομα (π.χ. μέλισσες) – λουλούδια, ή πουλιά – ιπποπόταμος, που βρίσκονται σε αρμονική συνεργασία.

Σύντομο πρόβλημα 6.1. Μπορείτε να προτείνετε περισσότερα παραδείγματα από κάθε παραπάνω τύπο οικοσυστήματος;

Παρακάτω θα παρουσιάσουμε διακριτά και συνεχή μοντέλα για κάθε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις. Αρχικά θα δούμε μοντέλα τύπου θηρευτή-θηράματος και πιο συγκεκριμένα το μοντέλο *Lotka-Volterra*. Θα μελετήσουμε λεπτομερώς την μορφή, τα σημεία ισορροπίας και θα κάνουμε ανάλυση ευστάθειας του μοντέλου, χρησιμοποιώντας τα εργαλεία που είδαμε και στην ανάλυση των δυναμικών συστημάτων, στο Κεφάλαιο 3. Επίσης, θα συζητήσουμε και τη διακριτή μορφή του μοντέλου. Κατόπιν θα δούμε πιο συνοπτικά συνεχή και διακριτά μοντέλα ανταγωνισμού και συμβίωσης. Η λεπτομερής μελέτη (π.χ. ανάλυση ευστάθειας) αυτών των μοντέλων προτείνεται ως άσκηση για τον αναγνώστη. Περισσότερες πληροφορίες για κάθε μοντέλο μπορούν να βρεθούν σε πιο εξειδικευμένα συγγράμματα Μαθηματικής Βιολογίας. (Allman, 2004; Edelstein-Keshet, 1988; Shonkwiler, 2002; Stewart, 1999; Brauer & Castillo-Chavez, 2012).

6.1.1 Μοντέλα Τύπου Θηράματος–Θηρευτή: Lotka–Volterra

Το πιο απλό μοντέλο θηράματος–θηρευτή (prey – predator), αλλά και συγχρόνως ίσως το πιο «διάσημο» μοντέλο Μαθηματικής Βιολογίας, είναι το μοντέλο Lotka-Volterra, το οποίο αναπτύχθηκε από τον Volterra το 1926 [Volterra, V., “Variazioni e fluttuazioni del numero d’individui in specie animali conviventi”, Mem. Acad. Lincei Roma, 2, 31–113, (1926), για να εξηγήσει τους περιοδικά ταλαντωμένους πληθυσμούς δύο ειδών ψαριών στην Αδριατική. Βασικές υποθέσεις του μοντέλου αυτού είναι ότι: (α) ο θηρευτής δεν μπορεί να τραφεί παρά μόνο με το θήραμα, ενώ (β) για το θήραμα υπάρχει «απεριόριστη» τροφή στο περιβάλλον. Αρχικά θα μελετήσουμε τη συνεχή και κατόπιν τη διακριτή του μορφή. (Murray, 2002; Wikipedia, 2015)

Έστω δύο είδη ψαριών από τα οποία το ένα τρέφεται με το άλλο και, οι πληθυσμοί των δύο ειδών περιγράφονται από συνεχείς μεταβλητές ως προς το χρόνο

- $N(t)$: ο πληθυσμός του θηράματος (prey), και
- $P(t)$: ο πληθυσμός του θηρευτή (predator), σε χρόνο t .

Στόχος μας είναι η δημιουργία κατάλληλων μαθηματικών σχέσεων (στην περίπτωση μας συνήθων διαφορικών εξισώσεων), οι οποίες περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη των δύο πληθυσμών. Ξεκινάμε με συγκεκριμένα (βιολογικές) υποθέσεις. Θεωρούμε ότι:

1. Ο πληθυσμός του θηράματος, απουσία του θηρευτή μεγαλώνει εκθετικά. Αυτό σημαίνει ότι στο ρυθμό μεταβολής (παράγωγος) του πληθυσμού του θηράματος θα υπάρχει θετικός όρος $(+aN)$.
2. Αντίστοιχα ο πληθυσμός του θηρευτή, απουσία του θηρευτή μειώνεται εκθετικά. Αυτό σημαίνει ότι στο ρυθμό μεταβολής (παράγωγος) του πληθυσμού του θηρευτή θα υπάρχει αρνητικός όρος $(-dN)$.
3. Η μείωση του πληθυσμού του θηράματος λόγω του θηρευτή είναι ανάλογη των «επαφών» θηράματος-θηρευτή, δηλαδή και μάλιστα είναι γραμμικής μορφής ως προς το γινόμενο NP . Δηλαδή στο ρυθμό μεταβολής του πληθυσμού του θηράματος υπάρχει αρνητικός όρος $(-bNP)$.
4. Αντίστοιχα η αύξηση του πληθυσμού του θηρευτή λόγω του θηράματος είναι ανάλογη των «επαφών» θηράματος-θηρευτή, δηλαδή και μάλιστα είναι γραμμικής μορφής ως προς το γινόμενο NP . Δηλαδή στο ρυθμό μεταβολής του πληθυσμού του θηρευτή υπάρχει θετικός όρος $(+cNP)$.

Στους παραπάνω όρους οι a, b, c, d είναι θετικές σταθερές. Τελικά το συνεχές μοντέλο Lotka-Volterra περιγράφεται ως ένα σύστημα δύο (συνήθων) διαφορικών εξισώσεων:

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= N(a - bP) \\ \frac{dP}{dt} &= P(cN - d).\end{aligned}\tag{6.1}$$

Θα πρέπει εδώ να σημειώσουμε ότι αν και το παραπάνω μοντέλο (σύστημα εξισώσεων) εμφανίστηκε όπως αναφέραμε για το συγκεκριμένο βιολογικό πρόβλημα το 1926, είχε αναπτυχθεί ανεξάρτητα από τον Lotka το 1920 για να περιγράψει μια χημική αντίδραση η οποία εμφανίζει περιοδική συμπεριφορά στις συγκεντρώσεις των στοιχείων που συμμετέχουν σε αυτή! Για αυτό το λόγο ονομάζεται Lotka-Volterra μοντέλο. Εύκολα καταλαβαίνουμε ότι το κοινό στοιχείο των παραπάνω προβλημάτων (η περιοδικότητα στους πληθυσμούς ή στις συγκεντρώσεις των στοιχείων) θα πρέπει να εμφανίζεται λόγω της πεπλεγμένης δομής των συγκεκριμένων εξισώσεων.

Ξεκινάμε τη μελέτη του παραπάνω μοντέλου κάνοντας μια κατάλληλη αδιαστατοποίηση ώστε να «απλοποιήσουμε» τη μορφή των εξισώσεων. Η αδιαστατοποίηση των μεταβλητών είναι συχνά μια πολύ χρήσιμη μαθηματική διαδικασία όπως είδαμε αναλυτικά στο Κεφάλαιο 1. Για τις παραπάνω εξισώσεις επιλέγουμε τις εξής αδιάστατες μεταβλητές.

$$u(\tau) = \frac{cN(t)}{d}, \quad v(\tau) = \frac{bP(t)}{a}, \quad \tau = at, \quad \tilde{d} = \frac{d}{a}.\tag{6.2}$$

Με την επιλογή αυτή το αρχικό σύστημα εξισώσεων γίνεται (η απόδειξη αφήνεται ως άσκηση):

$$\begin{aligned}\frac{du}{d\tau} &= u(1 - v) \\ \frac{dv}{d\tau} &= \tilde{d}v(u - 1)\end{aligned}\tag{6.3}$$

Το παραπάνω σύστημα εξισώσεων αποτελεί την αδιάστατη μορφή του (συνεχούς) μοντέλου Lotka-Volterra. Τα σημεία ισορροπίας του συστήματος, είναι οι τιμές των μεταβλητών u, v για τις οποίες

$$\left. \frac{du}{d\tau} \right|_{u^*, v^*} = \left. \frac{dv}{d\tau} \right|_{u^*, v^*} = 0$$

Το παραπάνω σύστημα έχει δύο σημεία ισορροπίας (fixed points):

A) $(u^*, v^*) = (0, 0)$

B) $(u^*, v^*) = (1, 1)$

Σύντομο πρόβλημα 6.2. Επιβεβαιώστε ότι το σύστημα (6.3) έχει τα παραπάνω σημεία ισορροπίας.

Κατόπιν εξετάζουμε την ευστάθεια του μοντέλου, ορίζοντας μικρή διαταραχή (x, y) στον πληθυσμό (u, v) και κάνοντας την αντίστοιχη γραμμικοποίηση, δηλαδή ανάπτυγμα Taylor και κράτημα μόνο των γραμμικών όρων.

A) Για το πρώτο σημείο $(u^*, v^*) = (0, 0)$ έχουμε τη διαταραχή:

$$u = u^* + x = x$$

$$v = v^* + y = y$$

Με γραμμικοποίηση θα καταλήξουμε (η απόδειξη αφήνεται ως άσκηση στον αναγνώστη), για τη χρονική εξέλιξη της διαταραχής, στις εξισώσεις:

$$\frac{dx}{d\tau} \approx x, \quad \frac{dy}{d\tau} \approx -\tilde{d}y. \quad (6.4)$$

Λύσεις του παραπάνω συστήματος είναι:

$$\begin{bmatrix} x(\tau) \\ y(\tau) \end{bmatrix} = B e^{\lambda\tau} \quad (6.5)$$

με ιδιοτιμές:

$$|A - \lambda I| = \begin{vmatrix} 1 - \lambda & 0 \\ 0 & -\tilde{d} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 1 \text{ και } \lambda_2 = -\tilde{d}.$$

Συνεπώς η ευστάθεια καθορίζεται ως:

- Αν $\lambda_1 > 0$ τότε η διαταραχές $x(\tau)$ και $y(\tau)$ μεγαλώνουν εκθετικά, δηλαδή το σημείο $(u, v) = (0, 0)$ είναι ασταθές.
- Αν $\lambda_1 > 0$ και $\lambda_2 < 0$ τότε $\lambda_1 \lambda_2 < 0$ και το σημείο είναι σαγματικό (saddle point).

B) Για το δεύτερο σημείο $(u^*, v^*) = (1, 1)$ ορίζουμε μικρή διαταραχή

$$u = u^* + x = 1 + x$$

$$v = v^* + y = 1 + y$$

Αντίστοιχη γραμμικοποίηση δίνει:

$$\begin{aligned} \frac{d(x+1)}{d\tau} &\approx (1+x)(1-1-y) = -y(1+x) = -y - xy \approx -y \\ \frac{d(y+1)}{d\tau} &\approx \tilde{d}(1+y)(1+x-1) = \tilde{d}x + \tilde{d}xy \approx \tilde{d}x \end{aligned}$$

εφόσον ισχύει: $xy \ll y$ και $xy \ll x$.

Οι ιδιοτιμές του παραπάνω συστήματος είναι:

$$\det(A - \lambda I) = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & -1 \\ -\tilde{d} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 = -\tilde{d} \Rightarrow \lambda_1, \lambda_2 = \pm i\sqrt{\tilde{d}}$$

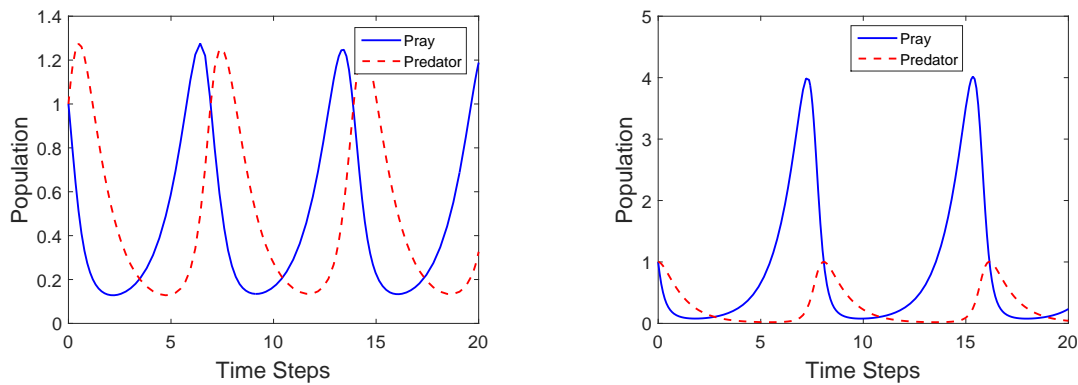
δηλαδή το σημείο $(u, v) = (1, 1)$ στο γραμμικοποιημένο σύστημα είναι κέντρο. Η παραπάνω λύση δίνει τα παρακάτω δύο ιδιοδιανύσματα, l, m :

$$\begin{bmatrix} x(\tau) \\ y(\tau) \end{bmatrix} = l \exp(i\sqrt{\tilde{d}}\tau) + m \exp(-i\sqrt{\tilde{d}}\tau) \quad (6.6)$$

Βασικό πρόβλημα του μοντέλου Lotka-Volterra είναι ότι οι λύσεις δεν είναι σταθερές (έλλειψη) με τη συνήθη έννοια, δηλαδή όπως είδαμε μια μικρή διαταραχή οδηγεί σε άλλη λύση. Αυτό είναι χαρακτηριστικό των συστημάτων διατήρησης. Παρόλα αυτά έχει εφαρμοστεί με σχετική επιτυχία σε διαφορετικά πραγματικά συστήματα.

Η λύση του αρχικού συστήματος μπορεί να γίνει με αριθμητικές μεθόδους. Μια τέτοια λύση πραγματοποιήθηκε, σε γλώσσα Matlab, χρησιμοποιώντας μεθόδους Runge-Kutta (ο κώδικας υπάρχει στο τέλος του κεφαλαίου). Στα Σχήματα 6.1α και 6.1β παρουσιάζεται η εξέλιξη των πληθυσμών του θηρευτή και του θηράματος για δυο διαφορετικούς συνδυασμούς τιμές των παραμέτρων του προβλήματος, δηλαδή των σταθερών a, b, c, d και για αρχικές τιμές των δύο πληθυσμών $N(t=0) = P(t=0) = 1.0$.

Όπως βλέπουμε η συμπεριφορά και των δύο πληθυσμών είναι περιοδική στο χρόνο.



Σχήμα 6.1: Εξέλιξη των πληθυσμών θηρευτή και θηράματος από τη λύση του μοντέλου Lotka-Volterra. Οι τιμές των παραμέτρων του μοντέλου είναι: (α) $a = 1.0, b = 2.0, c = 2.0, d = 1.0$ (β) $a = 1.0, b = 4.0, c = 1.0, d = 1.0$. Οι αρχικές τιμές των πληθυσμών είναι 1.0

Πιο συγκεκριμένα στο Σχήμα 6.1α βλέπουμε την συμπεριφορά των πληθυσμών για τιμές των παραμέτρων $a=1.0, b=2.0, c=2.0, d=1.0$. Στην περίπτωση αυτή οι δύο σταθερές b και c που αφορούν την μείωση του πληθυσμού του θηράματος, και την αντίστοιχη αύξηση του πληθυσμού του θηρευτή, λόγω της αλληλεπίδρασης θηράματος – θηρευτή, είναι ίσες. Επίσης και οι δύο σταθερές που περιγράφουν την αύξηση (μείωση) του πληθυσμού του θηράματος (θηρευτή) απουσία του θηρευτή (θηράματος) είναι ίσες. Για αυτό το λόγο η συμπεριφορά των δύο πληθυσμών είναι «παρόμοια», δηλαδή η «περίοδος» και το «πλάτος» της ταλάντωσης είναι το ίδιο.

Στο Σχήμα 6.1β βλέπουμε την συμπεριφορά των πληθυσμών για τιμές των παραμέτρων $a = 1.0, b = 4.0, c = 1.0, d = 1.0$. Η διαφορά σε αυτή την περίπτωση, σε σχέση με την προηγούμενη, είναι το ότι οι δύο σταθερές b και c είναι αρκετά διαφορετικές, δηλαδή η μείωση του πληθυσμού του θηράματος είναι αναλογικά μεγαλύτερη από την αύξηση του πληθυσμού του θηρευτή. Για αυτό το λόγο ο πληθυσμός του θηράματος μεταβάλλεται πολύ περισσότερο από τον πληθυσμό του θηρευτή.

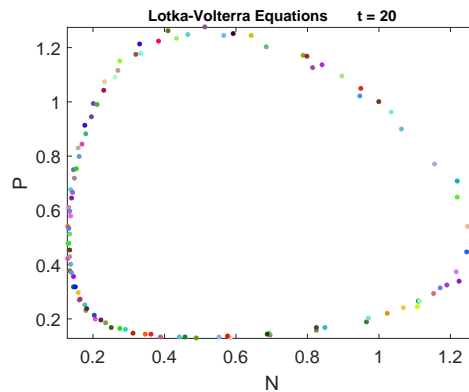
Οι καμπύλες του χώρου φάσεων, ή καλύτερα επιπέδου φάσεων (phase plane, βλέπε επίσης Κεφ. 3), καθώς έχουμε δύο μεταβλητές, δίνονται από την παρακάτω διαφορική εξίσωση:

$$\frac{dv}{du} = \frac{\tilde{d}v(u-1)}{u(1-v)} \quad (6.7)$$

Ολοκλήρωση στο χώρο φάσεων μας δίνει:

$$\tilde{d}u + v - \ln(u\tilde{d}v) = H \quad (6.8)$$

όπου H είναι σταθερά με: $H > H_{\min}, H_{\min} = 1 + \tilde{d}$.



Σχήμα 6.2: Χώρος φάσεων του αδιάστατου μοντέλου Lotka-Volterra. Οι τιμές των σταθερών είναι: $a = 1.0$, $b = 3.0$, $c = 2.0$, $d = 1.0$, ενώ παρουσιάζονται δεδομένα για χρόνους μέχρι και $t = 20$.

Για $H > H_{\min}$, και συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων του μοντέλου, ο χώρος φάσεων του μοντέλου φαίνεται γραφικά στο Σχήμα 6.2. Κάθε τροχιά (trajectory) είναι περιοδική λύση των αδιάστατων μεταβλητών u , και v στο χρόνο τ . Όπως βλέπουμε η μορφή του χώρου φάσεων είναι έλλειψη με κέντρο στο σημείο $(1, 1)$.

Ερώτηση κατανόησης 6.1. Ποια από τις παραπάνω δύο περιπτώσεις περιμένετε να περιγράψει καλύτερα του πληθυσμού λαγών – αλεπούδων σε ένα δάσος;

Ερώτηση κατανόησης 6.2. Δώστε παραδείγματα από διαφορετικούς πληθυσμούς τύπου θηρευτή – θηράματος, και εκτιμήστε (ποιοτικά) τις αντίστοιχες τιμές των σταθερών του μοντέλου Lotka – Volterra που περιμένετε.

Γενικά Μοντέλα Θηρευτή-Θηράματος

Το μοντέλο Lotka-Volterra είναι μια πρώτη περιγραφή μοντέλων τύπου θηρευτή-θηράματος. Στην παραγωγή του μοντέλου υποθέσαμε εκθετική (Μαλθουσιανό μοντέλο) αύξηση του πληθυσμού του θηράματος απουσία του θηρευτή, δηλαδή θεωρήσαμε ότι υπάρχει «άπειρο» φαγητό στο περιβάλλον για το θήραμα.

Όμως όπως είδαμε στη μελέτη πληθυσμών ενός είδους, αυτή δεν είναι γενικά ικανοποιητική υπόθεση εφόσον κάθε δεδομένο περιβάλλον έχει μια συγκεκριμένη χωρητικότητα πληθυσμού. Συνεπώς μια πρώτη επέκταση του μοντέλου Lotka-Volterra είναι να θεωρήσουμε λογιστική αύξηση για το θήραμα. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= rN \left(1 - \frac{N}{K}\right) - bNP \\ \frac{dP}{dt} &= P(cN - d).\end{aligned}$$

Το παραπάνω σύστημα εξισώσεων είναι το λογιστικό μοντέλο Lotka-Volterra και είναι ιδιαίτερα επιτυχημένο μοντέλο για αρκετά ρεαλιστικά οικοσυστήματα δύο ειδών.

Γενικότερα μπορούμε να περιγράψουμε μοντέλα τύπου θηρευτή – θηράματος με την παρακάτω μορφή:

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= NF(N, P) \\ \frac{dP}{dt} &= PG(N, P)\end{aligned}\tag{6.9}$$

όπου F και G είναι συναρτήσεις των δύο πληθυσμών N και P . Η εκλογή των συναρτήσεων F και G γίνεται ανάλογα με το φυσικό σύστημα το οποίο μελετάμε. Παράδειγμα, μία μορφή της F είναι:

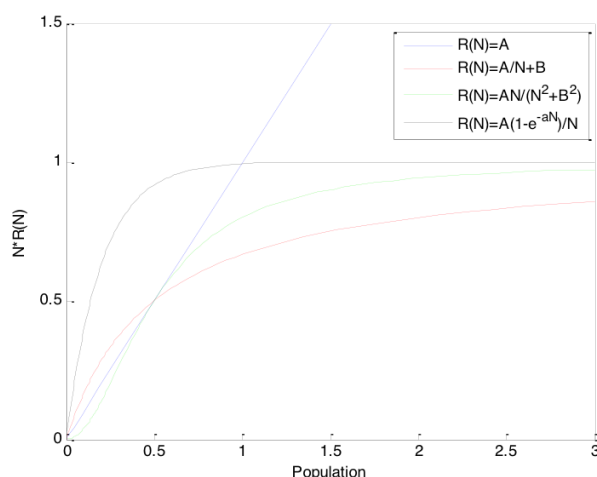
$$F(N, P) = r \left(1 - \frac{N}{K} \right) - PR(N) \quad (6.10)$$

όπου υποθέτουμε ότι το θήραμα, απουσία του θηρευτή, ακολουθεί την λογιστική εξίσωση αλλά η αλληλεπίδραση θηρευτή – θηράματος, έχει μια γενικότερη, σε σχέση με τη γραμμική ως προς το γινόμενο NP , μορφή.

Πιο συγκεκριμένα, στην παραπάνω σχέση η συνάρτηση $R(N)$ περιγράφει την αλλαγή του πληθυσμού του θηρευτή ως προς τις μεταβολές της πυκνότητας πληθυσμού του θηράματος. Διαφορετικές πιθανές μορφές της $R(N)$ είναι οι:

- $R(N) = :$ Αυτή η μορφή αντιστοιχεί στο μοντέλο Lotka – Volterra,
- $R(N) = \frac{A}{N+B}$
- $R(N) = \frac{AN}{N^2+B^2}$
- $R(N) = \frac{A(1-e^{-aN})}{N}$

Στα παραπάνω μοντέλα: A, B, a είναι θετικές σταθερές. Οι παραπάνω φαίνονται στο Σχήμα 6.3. Ως γενική παρατήρηση μπορούμε να πούμε ότι η γενική μορφή των παραπάνω μορφών της συνάρτησης F πρέπει να είναι τέτοια ώστε ο όρος $NR(N)$ να είναι περίπου σταθερός για μεγάλα .



Σχήμα 6.3: Πιθανές συναρτήσεις $R(N)$ οι οποίες περιγράφουν την αλλαγή του πληθυσμού του θηρευτή ως προς τις μεταβολές της πυκνότητας πληθυσμού του θηράματος.

Αντίστοιχα με την παραπάνω συζήτηση, η συνάρτηση G που περιγράφει την εξέλιξη του πληθυσμού του θηρευτή μπορεί επίσης να γίνει πιο «ρεαλιστική», σε σχέση με το αρχικό μοντέλο Lotka-Volterra.

Για παράδειγμα, αν υποθέσουμε ότι η χωρητικότητα του θηρευτή είναι ανάλογη της πυκνότητας του θηράματος έχουμε:

$$G(N, P) = k \left(1 - \frac{hP}{N} \right), \quad \text{ή} \quad G(N, P) = -d + eR(N) \quad (6.11)$$

όπου k, h, d, e : σταθερές > 0 .

Γενικότερα, πρέπει να επαναλάβουμε ότι η ακριβής μορφή των παραπάνω συναρτήσεων $F(N, P)$ και $G(N, P)$ εξαρτάται πάντα από το συγκεκριμένο πρόβλημα το οποίο μελετάμε.

Σε πρακτικό επίπεδο, αν έχουμε στατιστικά δεδομένα για κάποιο συγκεκριμένο σύστημα θηρευτή-θηράματος επιλέγουμε την συνάρτηση η οποία αναπαράγει σε καλύτερο βαθμό τα δεδομένα αυτά.

Ερώτηση κατανόησης 6.3. Ποια είναι η βιολογική σημασία των παραπάνω τροποποιήσεων των συναρτήσεων $F(N, P)$ και $G(N, P)$; Προτείνεται αντίστοιχα παραδείγματα βιολογικών συστημάτων.

6.1.2 Μοντέλα Ανταγωνισμού

Τα μοντέλα ανταγωνισμού περιγράφουν ένα οικοσύστημα στο οποίο δύο ή περισσότεροι οργανισμοί ανταγωνίζονται για την εξεύρεση τροφής από την ίδια πηγή.

Έστω δύο είδη με πληθυσμούς $N_1(t)$ και $N_2(t)$ σε χρόνο t , τα οποία ανταγωνίζονται για την ίδια πηγή τροφής. Για την δημιουργία του μοντέλου κάνουμε τις παρακάτω υποθέσεις:

- Ο πληθυσμός κάθε είδους, απουσία του άλλου, ακολουθεί λογιστική μορφή.
- Η αλληλεπίδραση (ανταγωνισμός) οδηγεί σε μείωση και των δύο πληθυσμών. Σε πρώτη προσέγγιση, η μείωση αυτή είναι ένας γραμμικός όρος, ως προς το γινόμενο $N_1 N_2$.

Με βάση τις υποθέσεις αυτές, οι εξισώσεις που περιγράφουν την εξέλιξη του πληθυσμού τους είναι:

$$\begin{aligned}\frac{dN_1}{dt} &= r_1 N_1 \left(1 - \frac{N_1}{K_1} - b_{12} \frac{N_2}{K_2} \right) \\ \frac{dN_2}{dt} &= r_2 N_2 \left(1 - \frac{N_2}{K_2} - b_{21} \frac{N_1}{K_1} \right).\end{aligned}\tag{6.12}$$

Στις παραπάνω σχέσεις $r_1, r_2, k_1, k_2, b_{12}$, και b_{21} είναι θετικές σταθερές. Ειδικότερα οι σταθερές b_{12} , και b_{21} εκφράζουν το μέτρο του ανταγωνισμού στο συγκεκριμένο σύστημα. Η μελέτη του μοντέλου, όπως και στα μοντέλα θηρευτή-θηράματος, γίνεται σε δύο στάδια.

Ερώτηση κατανόησης 6.4. Ποια είναι η βιολογική σημασία όλων των σταθερών στο παραπάνω μοντέλο;

Πρώτα αδιαστατοποιούμε το σύστημα ορίζοντας τις νέες μεταβλητές:

$$u_1(\tau) = \frac{N_1(t)}{K_1}, \quad u_2(\tau) = \frac{N_2(t)}{K_2}, \quad \tau = r_1 t$$

και τις νέες παραμέτρους

$$\rho = \frac{r_2}{r_1}, \quad a_{12} = b_{12} \frac{K_2}{K_1}, \quad a_{21} = b_{21} \frac{K_1}{K_2}.$$

Με την παραπάνω επιλογή το αρχικό σύστημα εξισώσεων γίνεται:

$$\begin{aligned}\frac{du_1}{d\tau} &= u_1(1 - u_1 - a_{12}u_2) = f_1(u_1, u_2) \\ \frac{du_2}{d\tau} &= \rho u_2(1 - u_2 - a_{21}u_1) = f_2(u_1, u_2).\end{aligned}\tag{6.13}$$

Σύντομο πρόβλημα 6.3. Επιβεβαιώστε την παραπάνω αδιάστατη μορφή του μοντέλου ανταγωνισμού.

Τα σημεία ισορροπίας, u_1^* και u_2^* , του παραπάνω συστήματος βρίσκονται λύνοντας τις $f_1 = 0$ και $f_2 = 0$ και είναι:

- $(u_1^*, u_2^*) = (0, 0)$,
- $(u_1^*, u_2^*) = (1, 0)$,

- $(u_1^*, u_2^*) = (0, 1)$ και
- $(u_1^*, u_2^*) = \left(\frac{1-a_{12}}{1-a_{12}a_{21}}, \frac{1-a_{21}}{1-a_{12}a_{21}} \right)$.

Η ανάλυση ευστάθειας για κάθε σημείο ισορροπίας γίνεται όπως και στην περίπτωση του μοντέλου Lotka-Volterra, την οποία είδαμε στο προηγούμενο υποκεφάλαιο και αφήνεται ως άσκηση για τον αναγνώστη.

6.1.3 Μοντέλα Συμβίωσης

Στο τελευταίο μέρος της μελέτης μοντέλων αλληλεπιδρώντων πληθυσμών εξετάζουμε τα μοντέλα συμβίωσης. Τα μοντέλα αυτά περιγράφουν ένα οικοσύστημα στο οποίο δύο ή περισσότεροι οργανισμοί συμβιώνουν με αρμονικό τρόπο, δηλαδή η αλληλεπίδραση μεταξύ τους αποβαίνει προς όφελος όλων των ειδών. Κλασικό παράδειγμα αποτελεί ένα οικοσύστημα στο οποίο φυτά και πουλιά συμβιώνουν με αρμονικό τρόπο. Έστω και πάλι δύο είδη με πληθυσμούς $N_1(t)$ και $N_2(t)$ σε χρόνο t , τα οποία συμβιώνουν στο περιβάλλον. Το απλούστερο δυνατό μοντέλο προκύπτει κάτω από τις εξής υποθέσεις:

Υπάρχει άφθονο φαγητό και για τα δύο είδη, δηλαδή ο πληθυσμός κάθε είδους, απουσία του άλλου, ακολουθεί εκθετική μορφή. Η αλληλεπίδραση (Συμβίωση) οδηγεί σε αύξηση και των δύο πληθυσμών. Σε πρώτη προσέγγιση, η μείωση αυτή είναι ένας γραμμικός όρος, ως προς το γινόμενο N_1N_2 .

Συνεπώς το μοντέλο το οποίο θα περιέγραφε τους πληθυσμούς θα ήταν:

$$\frac{dN_1}{dt} = r_1N_1 + a_1N_1N_2, \quad \frac{dN_2}{dt} = r_2N_2 + a_2N_1N_2 \quad (6.14)$$

όπου r_1, r_2, a_1 και a_2 είναι θετικές σταθερές.

Το μοντέλο όμως αυτό δεν είναι ρεαλιστικό καθώς προβλέπει συνεχή αύξηση των πληθυσμών $N_1(t)$ και $N_2(t)$, θυμίζει δηλαδή το Μαλθουσιανό-εκθετικό μοντέλο του ενός πληθυσμού.

Ερώτηση κατανόησης 6.5. Ποια είναι η βιολογική σημασία της κάθε μίας από τις σταθερές στο παραπάνω μοντέλο;

Ένα πιο ρεαλιστικό μοντέλο συμβίωσης έχει προταθεί [May 1975] σε αναλογία με το μοντέλο ανταγωνισμού που είδαμε στο προηγούμενο υπό-κεφάλαιο. Δηλαδή η διαφορά από το παραπάνω μοντέλο είναι το ότι θεωρούμε πως ο πληθυσμός κάθε είδους, απουσία του άλλου, ακολουθεί λογιστική μορφή. Πιο συγκεκριμένα το μοντέλο αυτό έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= r_1N_1 \left[1 - \frac{N_1}{K_1} + b_{12}N_2/K_1 \right] \\ \frac{dN_2}{dt} &= r_2N_2 \left[1 - \frac{N_2}{K_2} + b_{21}N_1/K_2 \right] \end{aligned} \quad (6.15)$$

όπου $r_1, r_2, k_1, k_2, b_{12}$, και b_{21} είναι θετικές σταθερές.

Ειδικότερα οι σταθερές b_{12} , και b_{21} εκφράζουν το μέτρο της συμβίωσης στο συγκεκριμένο σύστημα.

Παρατήρηση 6.1. Προσέξτε ότι αν και το μοντέλο αυτό «μοιάζει» με το μοντέλο ανταγωνισμού που είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, οι όροι συμβίωσης είναι, όπως θα περιμέναμε, θετικοί, δηλαδή η συμβίωση συνεισφέρει θετικά στην αύξηση του πληθυσμού, ενώ στο μοντέλο ανταγωνισμού ήταν αρνητικοί.

Η αδιαστατοποίηση των παραπάνω εξισώσεων γίνεται με τις νέες μεταβλητές, παρόμοια με το μοντέλο ανταγωνισμού:

$$u_1(\tau) = \frac{N_1(t)}{K_1}, \quad u_2(\tau) = \frac{N_2(t)}{K_2}, \quad \tau = r_1t, \quad \rho = \frac{r_2}{r_1}, \quad a_{12} = b_{12}\frac{K_2}{K_1}, \quad a_{21} = b_{21}\frac{K_1}{K_2}.$$

Τελικά το σύστημα των αδιάστατων εξισώσεων συμβίωσης γίνεται:

$$\begin{aligned}\frac{du_1}{d\tau} &= u_1(1 - u_1 + a_{12}u_2) = f_1(u_1, u_2) \\ \frac{du_2}{d\tau} &= \rho u_2(1 - u_2 + a_{21}u_1) = f_2(u_1, u_2).\end{aligned}\tag{6.16}$$

Σύντομο πρόβλημα 6.4. Εξαγάγετε την παραπάνω αδιάστατη μορφή του μοντέλου συμβίωσης.

Τα σημεία ισορροπίας, u_1^* και u_2^* , του παραπάνω συστήματος είναι:

- $(u_1^*, u_2^*) = (0, 0)$,
- $(u_1^*, u_2^*) = (1, 0)$,
- $(u_1^*, u_2^*) = (0, 1)$, και
- $(u_1^*, u_2^*) = \frac{1+a_{12}}{1-a_{12}a_{21}}, \frac{1+a_{21}}{1-a_{12}a_{21}}$

Η ανάλυση ευστάθειας για κάθε σημείο ισορροπίας αφήνεται ως άσκηση για τον αναγνώστη.

6.2 Διακριτά Μοντέλα Αλληλεπιδρώντων Πληθυσμών

Όπως είδαμε και στη μελέτη πληθυσμών ενός είδους (Κεφάλαιο 5) θα περιμέναμε καταρχήν οι πληθυσμοί να περιγράφονται με μεγαλύτερη ακρίβεια μέσω διακριτών και όχι συνεχών μεταβλητών, και συνεπώς τα διακριτά μοντέλα να είναι πιο «ρεαλιστικά» σε σχέση με τα συνεχή.

Παρακάτω μελετάμε, συνοπτικά διαφορετικά διακριτά μοντέλα αλληλεπιδρώντων πληθυσμών.

6.2.1 Διακριτά Μοντέλα Θηράματος–Θηρευτή

Ας μελετήσουμε τώρα τα διακριτά μοντέλα τύπου θηράματος – θηρευτή. Έστω: P_t και Q_t οι πληθυσμοί του θηράματος και του θηρευτή αντίστοιχα και:

$$\Delta P = P_{t+1} - P_t, \Delta Q = Q_{t+1} - Q_t$$

οι αλλαγές των πληθυσμών σε μία χρονική περίοδο. Η γενική διακριτή μορφή των μοντέλων θηρευτή-θηράματος είναι η παρακάτω:

$$\Delta P = F(P, Q), \quad \Delta Q = G(P, Q)\tag{6.17}$$

όπου F και G είναι συναρτήσεις των πληθυσμών P και Q . Θεωρώντας ότι ο πληθυσμός του θηράματος, χωρίς θηρευτή περιγράφεται από το λογιστικό μοντέλο και υποθέτοντας ότι η αλληλεπίδραση των δύο ειδών είναι γραμμική σε όρους PQ , ένα τυπικό διακριτό μοντέλο θηρευτή-θηράματος είναι:

$$\begin{aligned}\Delta P &= rP \left(1 - \frac{P}{K}\right) - sPQ \\ \Delta Q &= -uQ + vPQ\end{aligned}\tag{6.18}$$

όπου $r, K, s, u, v > 0$, σταθερές. Η παραπάνω σχέση δίνεται συνήθως και ως:

$$\begin{aligned}P_{t+1} &= P_t \left[1 + r \left(1 - \frac{P_t}{K}\right)\right] - sP_tQ_t \\ Q_{t+1} &= (1 - u)Q_t + vP_tQ_t\end{aligned}\tag{6.19}$$

και αποτελεί τη διακριτή μορφή του μοντέλου Lotka-Volterra με λογιστικό όρο για τον πληθυσμό του θηράματος.

Ερώτηση κατανόησης 6.6. Ποιες είναι οι (βιολογικά) αποδεκτές πιθανές τιμές των παραμέτρων r, K, s, u, v ;

Παρατήρηση 6.2. Προσέξτε ότι στο παραπάνω μοντέλο η αλληλεπίδραση θηρευτή-θηράματος εκφράζεται από τις σταθερές s, v : όσο μεγαλύτερες είναι οι τιμές των σταθερών τόσο μεγαλύτερη είναι η αλληλεπίδραση. Αυτές οι δύο σταθερές είναι εν γένει διαφορετικές, καθώς ο πληθυσμός των δύο ειδών επηρεάζεται με διαφορετικό ρυθμό από την αλληλεπίδρασή τους.

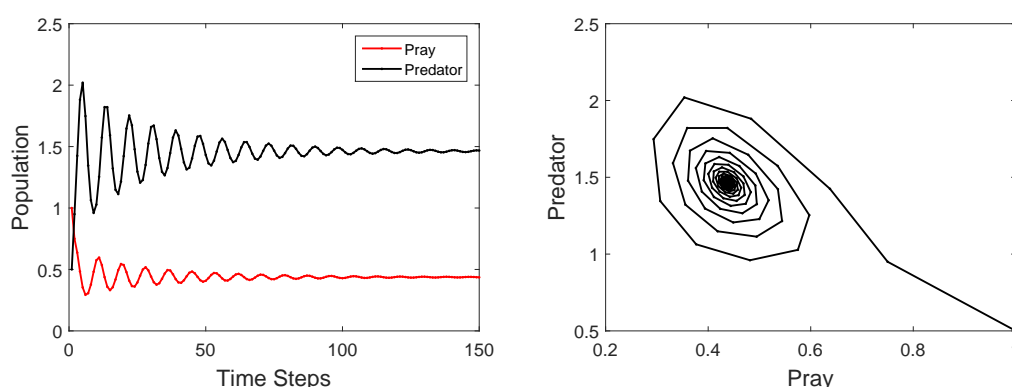
Η επίλυση του μοντέλου μπορεί να γίνει, όπως και στην περίπτωση των διακριτών μοντέλων ενός είδους, μπορεί να γίνει επαναληπτικά με χρήση υπολογιστή. Στην περίπτωση μας η επίλυση του μοντέλου έχει γίνει με κώδικα σε γλώσσα MATLAB, ο οποίος βρίσκεται στο τέλος του κεφαλαίου.

Η γραφική αναπαράσταση του παραπάνω μοντέλου για ένα συγκεκριμένο παράδειγμα φαίνεται στο Σχήμα 6.4, όπου βλέπουμε την χρονική εξέλιξη των δύο πληθυσμών, θηρευτή (prey) και θηράματος (predator), για συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων. Σε κάθε περίπτωση η χωρητικότητα για το θήραμα είναι $K = 1.0$ και οι αρχικές τιμές των πληθυσμών είναι $P_0 = 1.0$ και $Q_0 = 0.5$. Ουσιαστικά έχουμε κανονικοποιήσει και τους δύο πληθυσμούς με την τιμή πληθυσμού που εκφράζει την χωρητικότητα του περιβάλλοντος του θηράματος.

Γενικότερα για μικρές τιμές των όρων αλληλεπίδρασης s και v οι πληθυσμοί τείνουν «ομαλά» σε σταθερές, χρονικά ανεξάρτητες τιμές τους. Όσο όμως γίνεται πιο ισχυρή η αλληλεπίδραση των δύο πληθυσμών, τόσο περισσότερο «μη-ομαλή» γίνεται η χρονική συμπεριφορά τους. Παρακάτω παρουσιάζουμε πιο αναλυτικά δύο διαφορετικές περιπτώσεις για συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων ρυθμού αύξησης του πληθυσμού του θηράματος r και θνησιμότητας του πληθυσμού του θηρευτή u , και διαφορετικές τιμές των παραμέτρων s και v .

Πιο συγκεκριμένα στο Σχήμα 6.4α βλέπουμε την χρονική εξέλιξη των δύο πληθυσμών για τιμές των παραμέτρων: $r = 1.3, s = 0.5, u = 0.7, v = 1.6$. Όπως παρατηρούμε η χρονική εξέλιξη και των δύο πληθυσμών εμφανίζει συμπεριφορά φθίνουσας ταλάντωσης, ενώ μετά από περίπου 100 χρονικά βήματα και οι δύο πληθυσμοί έχουν φτάσει στις σταθερές, χρονικά ανεξάρτητες, τιμές του.

Στο Σχήμα 6.4β παρουσιάζουμε το χώρο (επίπεδο) φάσεων των δύο πληθυσμών για τις παραπάνω τιμές των παραμέτρων. Όπως βλέπουμε το επίπεδο φάσεων ακολουθεί μια «σπειροειδής» μορφή, ενώ σε μεγάλους χρόνους, όπως περιμένουμε από το Σχήμα 6.4α, οι πληθυσμοί αποκτούν σταθερές χρονό-ανεξάρτητες τιμές, και ο χώρος φάσεων γίνεται ένα σταθερό σημείο.

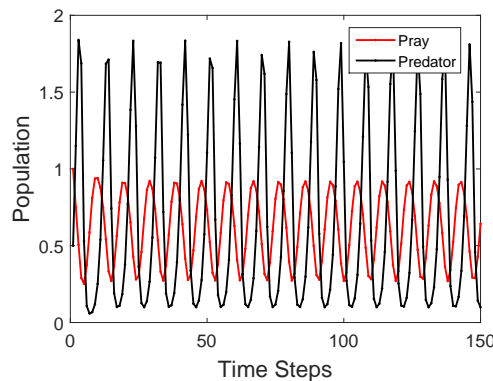


Σχήμα 6.4: Εξέλιξη των πληθυσμών θηρευτή και θηράματος από τη λύση του διακριτού μοντέλου Lotka-Volterra. Οι τιμές των σταθερών είναι: (α) $r = 1.3, s = 0.5, u = 0.7, v = 1.6$ και (β), $r = 1.0, s = 0.5, u = 1.5, v = 2.8$. Οι αρχικές τιμές των πληθυσμών είναι $P_0 = 1.0, Q_0 = 0.5$, ενώ η χωρητικότητα $K = 1.0$.

Στη δεύτερη περίπτωση (Σχήμα 6.5) παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη των δύο πληθυσμών για τιμές των παραμέτρων: $r = 1.0, s = 0.5, u = 0.7, v = 2.8$. Εδώ ο όρος αύξησης του πληθυσμού του θηρευτή

λόγω των «επαφών» του με το θήραμα είναι ιδιαίτερα μεγάλος, με άλλα λόγια ο πληθυσμός του επηρεάζεται σε πολύ μεγαλύτερο βαθμό. Αυτή ακριβώς η ισχυρή αλληλεπίδραση οδηγεί σε μεγάλες μεταβολές και των δύο πληθυσμών, ιδιαίτερα του πληθυσμού του θηρευτή. Επίσης οι μεταβολές αυτές είναι σχεδόν περιοδικές για όλο το εύρος των χρόνων που μελετάμε. Πιο συγκεκριμένα ο πληθυσμός του θηράματος (prey) μεταβάλλεται από περίπου 0.2 σε 0.9, θυμηθείτε ότι η χωρητικότητα του περιβάλλοντος για το θήραμα είναι 1.0. Ειδικά για τον πληθυσμό του θηρευτή (predator) η ισχυρή αλληλεπίδραση οδηγεί σε ένα μεγάλο εύρος τιμών του πληθυσμού, από περίπου 0.05 σε 1.8.

Ερώτηση κατανόησης 6.7. Τι χρονική συμπεριφορά για τους δύο πληθυσμούς περιμένετε σε ακόμη μεγαλύτερες τιμές των σταθερών s ή v ; Θυμηθείτε το διακριτό λογιστικό μοντέλο ενός πληθυσμού.



Σχήμα 6.5: Διάγραμμα φάσεων των πληθυσμών θηρευτή και θηράματος από τη λύση του διακριτού μοντέλου Lotka-Volterra. Οι τιμές των σταθερών είναι: $r = 1.3$, $s = 0.5$, $u = 0.7$, $v = 1.6$. Οι αρχικές τιμές των πληθυσμών είναι $P_0 = 1.0$, $P_0 = 0.5$, ενώ η χωρητικότητα $K = 1.0$.

6.2.2 Διακριτά Μοντέλα Ανταγωνισμού

Σε αναλογία με την παραπάνω ανάλυση υπάρχουν διαφορετικά διακριτά μοντέλα ανταγωνισμού. Παρακάτω, ως παράδειγμα, αναφέρουμε τρία από αυτά. Σε κάθε περίπτωση οι μεταβλητές ορίζονται όπως και στα διακριτά μοντέλα τύπου θηρευτή-θηράματος, δηλαδή P_t και Q_t είναι οι πληθυσμοί των δύο ειδών κατά τη χρονική στιγμή t , και οι μεταβολές (αλλαγή) των πληθυσμών σε μια χρονική περίοδο ορίζονται ως:

$$\Delta P = P_{t+1} - P_t, \quad \Delta Q = Q_{t+1} - Q_t.$$

Πρώτο, και σχετικά απλούστερο, μοντέλο ανταγωνισμού είναι το παρακάτω:

$$\begin{aligned} \Delta P &= rP \left[1 - \frac{P+Q}{K} \right] \\ \Delta Q &= uQ \left[1 - \frac{P+Q}{K} \right] \end{aligned} \quad (6.20)$$

όπου r, u , είναι σταθερές του μοντέλου. Στο παραπάνω μοντέλο κάθε πληθυσμός απουσία του άλλου ακολουθεί το Λογιστικό μοντέλο. Πρόβλημα του μοντέλου είναι ότι σε μεγάλους χρόνους όποιο είδος έχει τον μεγαλύτερο ρυθμό ανάπτυξης (r ή u) επικρατεί πλήρως, δηλαδή το άλλο είδος εξαφανίζεται!

Δεύτερο, και σχετικά πιο ρεαλιστικό είναι το παρακάτω μοντέλο:

$$\begin{aligned} \Delta P &= rP \left[1 - \frac{P+Q}{K} \right] - sPQ \\ \Delta Q &= uQ \left[1 - \frac{P+Q}{K} \right] - vPQ \end{aligned} \quad (6.21)$$

Το μοντέλο αυτό εμπεριέχει ένα επιπλέον αρνητικό όρο αλληλεπίδρασης.

Ερώτηση κατανόησης 6.8. Ποιες είναι οι υποθέσεις από τις οποίες έχει προκύψει το παραπάνω μοντέλο και ποια η αντίστοιχη βιολογική σημασία όλων των σταθερών;

Παράδειγμα 6.1. (*Ιός – Ανοσοποιητικό σύστημα*). Το τρίτο μοντέλο που θα δούμε είναι ιδιαίτερα σημαντικό από την πλευρά της βιολογίας - ιατρικής καθώς περιγράφει την αλληλεπίδραση κάποιου ιού και του ανοσοποιητικού συστήματος. Παράδειγμα, θεωρώντας ως: P τον πληθυσμό των κυττάρων που «πολεμούν την ασθένεια (π.χ. T cells) και Q τον πληθυσμό των βακτηρίων μιας ασθένειας, ένα τυπικό διακριτό μοντέλο είναι:

$$\begin{aligned}\Delta P &= rQ - sPQ \\ \Delta Q &= uQ - vPQ\end{aligned}\tag{6.22}$$

όπου r, s, u, v είναι θετικές σταθερές. Η παραπάνω μορφή του μοντέλου προκύπτει από τις παρακάτω υποθέσεις:

Όρος $+rQ$: κύτταρα του ανοσοποιητικού συστήματος δημιουργούνται ως «απάντηση» στην μόλυνση του οργανισμού. Όρος $-sPQ$: αρνητικός όρος (μείωση) του πληθυσμού των κυττάρων λόγω της μάχης με την ασθένεια. Όρος $+uQ$: ρυθμός ανάπτυξης των βακτηριακών κυττάρων. Όρος $-vPQ$: αρνητικός όρος (μείωση) του πληθυσμού των βακτηριακών κυττάρων λόγω της μάχης με το ανοσοποιητικό σύστημα. \square

Περαιτέρω και ιδιαίτερα σημαντικά παραδείγματα αυτής της κατηγορίας είναι μοντέλα που μελετούν την ανάπτυξη ιών όπως ο HIV (Human Immunodeficiency Virus) ο οποίος οδηγεί στο AIDS.

6.2.3 Διακριτά Μοντέλα Συμβίωσης

Όπως και παραπάνω υπάρχουν διαφορετικά πιθανά διακριτά μοντέλα συμβίωσης δύο πληθυσμών. Ένα πρώτο μοντέλο με γραμμικούς μόνο όρους ως προς την αλληλεπίδραση PQ είναι το ακόλουθο:

$$\begin{aligned}\Delta P &= rP + sPQ \\ \Delta Q &= uQ + vPQ.\end{aligned}\tag{6.23}$$

Το μοντέλο όπως και στη συνεχή του μορφή δεν είναι ιδιαίτερα ρεαλιστικό καθώς οδηγεί σε συνεχή αύξηση των P, Q . Ένα πιο ρεαλιστικό μοντέλο είναι το παρακάτω:

$$\begin{aligned}\Delta P &= rP \left[1 - \frac{P}{K} \right] + sPQ \\ \Delta Q &= -uQ + vPQ.\end{aligned}\tag{6.24}$$

Ερώτηση κατανόησης 6.9. Ποιες είναι οι υποθέσεις από τις οποίες έχει προκύψει το παραπάνω μοντέλο και ποια η αντίστοιχη βιολογική σημασία όλων των σταθερών;

6.3 Μοντέλα Επιδημιών

Έως τώρα, στο κεφάλαιο αυτό, είδαμε μοντέλα αλληλεπιδρώντων συστημάτων, τα οποία αφορούν πληθυσμούς βιολογικών ειδών. Στο μέρος αυτό θα εστιάσουμε στην μελέτη μοντέλων που αφορούν αλληλεπιδράσεις βιολογικών συστημάτων σε περιπτώσεις ασθενειών, και πιο συγκεκριμένα επιδημιών. Η διαφορά έγκειται στο ότι δεν είναι απαραίτητο να πρόκειται για διαφορετικά βιολογικά είδη, συνήθως οι πληθυσμοί αφορούν «ομάδες» ατόμων ενός πληθυσμού, π.χ. «υγιείς» και «ασθενείς».

Ένα από τα παραδείγματα που είδαμε παραπάνω αφορούσε την αλληλεπίδραση ιού – ανοσοποιητικού συστήματος. Εδώ θα μελετήσουμε μοντέλα επιδημιών. Εύκολα καταλαβαίνει κανείς το πόσο

σημαντικά είναι τέτοιου τύπου μαθηματικά μοντέλα, καθώς στόχος του είναι η πρόβλεψη της (χρονικής) εξέλιξης ασθενειών – επιδημιών. Αρκεί να σκεφτούμε ότι οι επιδημίες γρίπης είναι κάθε χρόνο μια από τις κύριες αιτίες θανάτου σε κάθε χώρα της γης.

Ιστορικά, υπάρχουν πάμπολλες επιδημίες κατά τη διάρκεια των ετών. Για παράδειγμα ήδη από τον Θουκυδίδη περιγράφεται η επιδημία πανούκλας στην αρχαία Αθήνα (430 – 428 π.χ.) όταν 1050 από τους 4000 στρατιώτες πεθαίνουν. Ακόμη πιο τραγική είναι η επιδημία πανούκλας στην Ευρώπη το 14ο αιώνα, ή αλλιώς «μαύρος θάνατος» (black death) εκείνη την εποχή, κατά τη διάρκεια της οποίας από ένα πληθυσμό περίπου 85 εκατ. Κατοίκων, πεθαίνει περίπου το 1/3. Πιο σύγχρονη είναι η επιδημία του HIV (Human Immunodeficiency Virus) ο οποίος οδηγεί στο AIDS (Acquired Immune Deficiency Syndrome).

Ακριβώς λόγω των τραγικών αποτελεσμάτων πολλών επιδημιών συχνά αυτές έχουν περιγραφεί ως «τιμωρία από το Θεό»! Η μαθηματική μελέτη λοιπόν τέτοιων προβλημάτων είναι ασφαλώς σημαντική από πολλές διαφορετικές πλευρές. Ως γενική παρατήρηση θα επισημαίναμε ότι ένα καλό μαθηματικό μοντέλο εξέλιξης μιας ασθένειας είναι αυτό που, όπως κάθε μαθηματικό μοντέλο, εμπεριέχει τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά της, απαλείφοντας ότι δεν είναι σημαντικό, ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί.

Γενικότερα στην μελέτη της εξέλιξης μιας επιδημίας, όπως αναφέραμε και παραπάνω, πρέπει να ξεχωρίσουμε τα άτομα ενός γενικού πληθυσμού, σε πρώτη φάση, ανάλογα με το αν νοσούν, ή όχι. Παρακάτω βλέπουμε με λεπτομέρεια τα πιο βασικά μαθηματικά μοντέλα που αφορούν εξέλιξη επιδημιών.

6.3.1 Συνεχές Επιδημιολογικό Μοντέλο SIR

Πρώτα θα παρουσιάσουμε το πιο ευρέως διαδεδομένο συνεχές επιδημιολογικό μοντέλο. Έστω, με βάση και αυτά που αναφέραμε παραπάνω, μια συγκεκριμένη ασθένεια, η οποία οδηγεί είτε σε ανοσία, μετά τη θεραπεία, είτε σε θάνατο.

Ερώτηση κατανόησης 6.10. Είναι η παραπάνω υπόθεση «καλή» για ασθένειες όπως η κοινή γρίπη ή παιδικές ασθένειες, π.χ. η ιλαρά; Δώστε παραδείγματα ασθενειών στις οποίες είναι ή δεν είναι ικανοποιητική.

Σε αυτή την περίπτωση ο πληθυσμός του είδους μπορεί να χωριστεί στις παρακάτω τρεις κατηγορίες:

1. Ευπαθείς (Susceptibles, S): Άτομα του πληθυσμού, τα οποία είναι υγιείς αλλά μπορούν να μολυνθούν.
2. Μολυσμένοι (Infectives, I): Άτομα του πληθυσμού, τα οποία νοσούν (ασθενείς).
3. Διαγραμμένοι (Removed, R): Άτομα του πληθυσμού τα οποία είτε έχουν θεραπευτεί και έχουν αποκτήσει ανοσία, είτε έχουν πεθάνει.

Διαγραμματικά (θεωρούμε ότι τα βέλη δείχνουν την χρονική εξέλιξη) η χρονική μετάβαση για ένα άτομο του πληθυσμού είναι της μορφής:

$$S \longrightarrow I \longrightarrow R$$

Προσέξτε ότι η τελευταία κατηγορία (R) περιλαμβάνει τόσο όσους έχουν θεραπευτεί αλλά και όσους έχουν πεθάνει. Ο λόγος είναι ότι και οι δύο ομάδες δεν επηρεάζονται (αλληλεπιδρούν) πλέον με την ασθένεια, εφόσον οι πρώτοι έχουν αποκτήσει ανοσία, οπότε μπορούν να περιγραφούν με μια μεταβλητή. Αυτό μας επιτρέπει να δούμε το σύνολο του πληθυσμού, N , ως μια σταθερά, ανεξάρτητη του χρόνου, δηλαδή

$$S(t) + I(t) + R(t) = N \neq N(t).$$

Οι παραπάνω λοιπόν κατηγορίες, εύκολα περιγράφονται με τις αντίστοιχες μεταβλητές $S(t)$, $I(t)$, $R(t)$ οι οποίες δηλώνουν τον αριθμό των ατόμων σε κάθε κατηγορία σε χρόνο t . Στόχος μας, όπως σε κάθε μαθηματικό μοντέλο είναι η εύρεση των σχέσεων (εδώ διαφορικών εξισώσεων), οι οποίες περιγράφουν τους πληθυσμούς.

Το πρώτο μοντέλο SIR έχει προταθεί από τους Kermack – McKendrick το 1927 και βασίζεται στις εξής απλές υποθέσεις:

- Πρώτον, ο αριθμός των ασθενών (μολυσμένων) αυξάνει ανάλογα με τον αριθμό των επαφών μεταξύ ασθενών και ευπαθών με ένα γραμμικό όρο ως προς το γινόμενο της μορφής rSI
- Δεύτερον, ο αριθμός των ευπαθών αντίστοιχα μειώνεται ανάλογα με τον αριθμό των επαφών μεταξύ ασθενών και ευπαθών με τον όρο rSI
- Τρίτον, ο αριθμός των διαγραφωμένων αυξάνει ανάλογα με τον αριθμό των ασθενών, κατά ένα ποσοστό aI , ενώ αντίστοιχα με το ίδιο ποσοστό μειώνεται ο αριθμός των ασθενών.

Με βάση τα παραπάνω οι Σ.Δ.Ε. του μοντέλου SIR είναι:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -rSI \\ \frac{dI}{dt} &= rSI - aI \\ \frac{dR}{dt} &= aI\end{aligned}\tag{6.25}$$

όπου r (ρυθμός διαγραφής) και a (ρυθμός μόλυνσης) είναι θετικές σταθερές. Έστω επίσης ότι οι αρχικές συνθήκες του μοντέλου είναι:

$$S(0) = S_0, \quad I(0) = I_0 \quad \text{και} \quad R(0) = R_0, \quad S_0 + I_0 + R_0 = N.$$

όπου S_0, I_0, R_0 είναι θετικές σταθερές.

Παρατήρηση 6.3. Προσέξτε ότι αν $I_0 = 0$ ή $S_0 = 0$ δεν υπάρχει εξέλιξη της ασθένειας. Επίσης συνήθως θεωρούμε ότι $R_0 = 0$.

Η κρίσιμη ερώτηση σε κάθε ρεαλιστική επιδημιολογική μελέτη είναι δεδομένων των παραμέτρων του προβλήματος, που αφορούν την ασθένεια και τον πληθυσμό (r, a, S_0, I_0, R_0) αν η ασθένεια θα εξαπλωθεί, θα γίνει δηλαδή επιδημία, ή όχι. Για να εξετάσουμε αυτό το ερώτημα ως υπολογίσουμε την μεταβολή του πληθυσμού των ασθενών σε χρόνο $t = 0$, η οποία είναι:

$$\left. \frac{dI}{dt} \right|_{t=0} = I_0(rS_0 - a).$$

Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις για την παραπάνω παράγωγο:

(Α) Προσέξτε ότι η παραπάνω παράγωγος είναι αρνητική αν: $S_0 < \rho$ τότε $dI/dt < 0$ για αρχικό χρόνο αλλά και για κάθε χρόνο. Το τελευταίο ισχύει καθώς: $dS/dt \leq 0$, δηλαδή $S \leq S_0$. Σε αυτήν λοιπόν την περίπτωση ο αριθμός των ασθενών μειώνεται συνεχώς και η επιδημία σταματά!

(Β) Αν αντίθετα αν: $S_0 > \rho$ ($\rho = a/r$), η παράγωγος είναι θετική, δηλαδή σε αυτή την περίπτωση ο αριθμός των ασθενών, $I(t)$, αυξάνει με το χρόνο. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε εξάπλωση της ασθένειας, δηλαδή η ασθένεια γίνεται επιδημία.

Παρατήρηση 6.4. Βλέπουμε λοιπόν ότι ο λόγος ρ ($\rho = a/r$), είναι η κρίσιμη παράμετρος για την εξάπλωση, ή μη, της επιδημίας.

Επίσης μια σημαντική ποσότητα με την οποία περιγράφουμε μια επιδημία είναι η ακόλουθη:

Ορισμός. Ρυθμός αναπαραγωγής της ασθένειας: $R_0 = \frac{rS_0}{a}$ □

Ο ρυθμός αναπαραγωγής της ασθένειας, βιολογικά εκφράζει τον αριθμό δευτερογενών μολύνσεων από ένα μολυσμένο μέλος σε ολόκληρο τον πληθυσμό. Αν $R_0 > 1$ υπάρχουν περισσότερες από μια μόλυνση από 1 μολυσμένο μέλος, και υπάρχει επιδημία. Σε αυτή την περίπτωση η αποτροπή της επιδημίας μπορεί να επιτευχθεί μέσω μείωσης του ρυθμού R_0 . Αυτό μπορεί να γίνει, για παράδειγμα, με τον εμβολιασμό, ο οποίος μειώνει τον αρχικό αριθμό του ευπαθούς πληθυσμού.

6.3.2 Διακριτό Επιδημιολογικό Μοντέλο SIR

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε το διακριτό επιδημιολογικό μοντέλο SIR. Για τη μελέτη αυτού του μοντέλου εργαζόμαστε όπως και στα διακριτά μοντέλα που είδαμε παραπάνω.

Πιο συγκεκριμένα αν θεωρήσουμε και πάλι ως S_t, I_t και R_t τους πληθυσμούς σε χρονική στιγμή t , τότε κάνοντας τις ανάλογες υποθέσεις με αυτές του συνεχούς SIR μοντέλου που είδαμε παραπάνω, το διακριτό SIR μοντέλο, δηλαδή οι εξισώσεις διαφορών που περιγράφουν τους πληθυσμούς την επόμενη χρονική στιγμή, έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned} S_{t+1} &= S_t - aS_t I_t \\ I_{t+1} &= I_t + aS_t I_t - \gamma I_t \\ R_{t+1} &= R_t + \gamma I_t. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Παρατήρηση: Όπως σε κάθε διακριτό μοντέλο, ιδιαίτερη προσοχή απαιτείται στη σωστή εκλογή του χρονικού βήματος (χρονική διάρκεια μεταξύ δύο επαναλήψεων), Δt . Το βήμα αυτό μπορεί για παράδειγμα να είναι μια ώρα, μια μέρα ή μια εβδομάδα ανάλογα με το είδος της ασθένειας που μελετάμε.

Το παραπάνω μοντέλο, μπορεί επίσης να γραφτεί στη μορφή:

$$\begin{aligned} \Delta S &= -aS_t I_t \\ \Delta I &= aS_t I_t - \gamma I_t = I_t(aS_t - \gamma) \\ \Delta R &= \gamma I_t. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Και πάλι μας ενδιαφέρει κυρίως η χρονική εξέλιξη του πληθυσμού των ασθενών ΔI . Εύκολα διαπιστώνουμε ότι η κρίσιμη παράμετρος είναι ο λόγος γ/a , δηλαδή αν:

$$\begin{aligned} S_t &> \frac{\gamma}{a}, & \Delta &> 0 \\ S_t &= \frac{\gamma}{a}, & \Delta &= 0 \\ S_t &< \frac{\gamma}{a}, & \Delta &< 0. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Παρόμοια λοιπόν με το συνεχές μοντέλο ορίζουμε τον συντελεστή αναπαραγωγής της ασθένειας ως: $R_0 = aS_0/\gamma$. Αν $R_0 > 1$, τότε και $\Delta I > 0$, οπότε έχουμε εξέλιξη της ασθένειας σε επιδημία.

Παρατήρηση 6.5. Προσέξτε τη βιολογικά σημασία των παραπάνω όρων

- (1) (aS_0) : αριθμός νέων μολύνσεων από ένα μολυσμένο άτομο ανά μονάδα χρόνου, και
- (2) $(1/\gamma)$: μέση διάρκεια της μόλυνσης.

Η περεταίρω μελέτη του μοντέλου αφήνεται ως άσκηση στον αναγνώστη.

6.3.3 Παραλλαγές των Επιδημιολογικών Μοντέλων SIR

Όπως αναφέραμε και παραπάνω το SIR μοντέλο είναι καλό για την περίπτωση ασθένειας στην οποία οι ασθενείς που θεραπεύονται αποκτούν ανοσία. Σε πολλές περιπτώσεις όμως αυτό δεν είναι καλή υπόθεση και χρειάζονται διαφορετικά μοντέλα. Παρακάτω βλέπουμε, πολύ συνοπτικά, κάποιες παραλλαγές του SIR μοντέλου. Η μελέτη τους προτείνεται ως άσκηση στο αναγνώστη.

(A) SI Μοντέλα

Αν θέλουμε να μελετήσουμε κάποια ασθένεια, στην οποία δεν υπάρχει ίαση τότε η χρονική εξέλιξη, μεταξύ των διαφορετικών ομάδων, για ένα άτομο του πληθυσμού είναι της μορφής:

$$S \longrightarrow I$$

Σε αυτή την περίπτωση οι εξισώσεις του μοντέλου θα έχουν τη μορφή:

$$\begin{aligned} S_{t+1} &= S_t - aS_t I_t \\ I_{t+1} &= I_t + aS_t I_t \end{aligned} \quad (6.29)$$

(B) SIS Μοντέλα

Στη περίπτωση ασθένειας για την οποία δεν υπάρχει ανοσία, το μοντέλο μπορεί να περιγραφεί ως:

$$S \leftrightarrow I$$

Σε αυτή την περίπτωση οι εξισώσεις του μοντέλου θα έχουν τη μορφή:

$$\begin{aligned} S_{t+1} &= S_t - aS_t I_t + \gamma I_t \\ I_{t+1} &= I_t + aS_t I_t - \gamma I_t. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Το παραπάνω μοντέλο είναι αρκετά συνηθισμένο καθώς περιγράφει περιπτώσεις ασθενειών στις οποίες οι ασθενείς που θεραπεύονται δεν αποκτούν ανοσία, όπως συμβαίνει για παράδειγμα στην κοινή γρίπη.

Ερώτηση κατανόησης 6.11. Ποιες είναι οι βιολογικές υποθέσεις σε καθένα από τα παραπάνω μοντέλα; Προτείνετε παραδείγματα ασθενειών, οι οποίες μπορούν να περιγραφούν ικανοποιητικά με τα παραπάνω μοντέλα.

(Γ) SIR Μοντέλα με Ομάδες

Όλα τα παραπάνω μοντέλα τύπου SIR θεωρούν ολόκληρο τον πληθυσμό σαν ένα ομογενές μέσο. Για αυτό το λόγο δεν μπορούν να περιγράψουν ικανοποιητικά περιπτώσεις ασθενειών, οι οποίες έχουν διαφορετική επίδραση στα μέλη του πληθυσμού ανάλογα με την ηλικία, το φύλο, το ιατρικό ιστορικό, κλπ. Σε αυτή την περίπτωση απαιτείται διαχωρισμός του πληθυσμού σε ομάδες και κατόπιν διαμόρφωση του μοντέλου για κάθε ομάδα του πληθυσμού.

Ως παράδειγμα, αν θεωρήσουμε ασθένεια η οποία επηρεάζει με διαφορετικό τρόπο τον πληθυσμό ανάλογα με το φύλο, και για την οποία δεν υπάρχει ανοσία (SI μοντέλο). Αν χωρίσουμε τον πληθυσμό σε δύο ομάδες: αρσενικά (male, m) και θηλυκά (female, f), και ορίσουμε ως $S(m)$, $S(f)$, και $I(m)$, $I(f)$, τους πληθυσμούς των ευπαθών και των ασθενών για τις δύο ομάδες του πληθυσμού αντίστοιχα, η διαγραμματική εξέλιξη της ασθένειας είναι:

$$\begin{aligned} S^{(m)} &\longrightarrow I^{(m)} \\ S^{(f)} &\longrightarrow I^{(f)} \end{aligned}$$

Τέλος αν θέλουμε να περιγράψουμε τον πληθυσμό των διαγραμμένων χωριστά από τον αριθμό των ευπαθών για την περίπτωση που δεν υπάρχει γενικά ανοσία (π.χ. μπορεί μετά την θεραπεία για ένα διάστημα τα άτομα να έχουν ανοσία στην ίδια ασθένεια) θα πρέπει να συμπεριλάβουμε και την κατηγορία R , δηλαδή η πιθανή διαγραμματική (χρονική) εξέλιξη, μεταξύ των διαφορετικών ομάδων, για ένα άτομο του πληθυσμού να είναι της μορφής:

$$S \longrightarrow I \longrightarrow R \longrightarrow S$$

Μια τέτοια, σχετικά απλή, επέκταση των μοντέλων SIR με επιπλέον όρους που περιγράφουν τη δυνατότητα των διαγραμμένων ατόμων να μολυνθούν και πάλι δίνεται από τα SIRS μοντέλα.

6.4 Μελέτη

6.4.1 Ασκήσεις

Άσκηση 6.1. Μοντέλο Lotka–Volterra – Αδιάστατη μορφή

Όπως είδαμε το Μοντέλο Lotka – Volterra μοντέλο ορίζεται από το σύστημα εξισώσεων:

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= N(a - bP) \\ \frac{dP}{dt} &= P(cN - d).\end{aligned}$$

Βρείτε την αδιάστατη μορφή του μοντέλου, ορίζοντας τις κατάλληλες νέες μεταβλητές.

Άσκηση 6.2. Μοντέλο Lotka–Volterra – Ανάλυση Ευστάθειας

Ξεκινώντας από την αδιάστατη μορφή του μοντέλου Lotka–Volterra, βρείτε τα σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ανάλυση ευστάθειάς τους.

Άσκηση 6.3. Γενικευμένο μοντέλου τύπου θηρευτή – θηράματος

Μελετήστε ένα γενικευμένο μοντέλο τύπου θηρευτή της παρακάτω μορφής:

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= rN \left(1 - \frac{N}{K}\right) - PR(N) \\ \frac{dP}{dt} &= P(cN - d).\end{aligned}$$

Ως συνάρτηση $R(N)$ θεωρήστε μία από τις παρακάτω

$$R(N) = \frac{A}{N + B} \quad \text{ή} \quad R(N) = \frac{AN}{N^2 + B^2}.$$

Χρησιμοποιώντας κατάλληλες τιμές των παραμέτρων μελετήστε το μοντέλο.

Άσκηση 6.4. Μοντέλο Ανταγωνισμού – Ανάλυση Ευστάθειας

Ξεκινώντας από την αδιάστατη μορφή του μοντέλου ανταγωνισμού, βρείτε τα σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ανάλυση ευστάθειάς τους.

Άσκηση 6.5. Μοντέλο Συμβίωσης – Ανάλυση Ευστάθειας

Ξεκινώντας από την αδιάστατη μορφή του μοντέλου συμβίωσης, βρείτε τα σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ανάλυση ευστάθειάς τους.

Άσκηση 6.6. Διακριτό Μοντέλο Θηράματος – Θηρευτή

Ξεκινώντας από την αδιάστατη μορφή του μοντέλου συμβίωσης, βρείτε τα σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ανάλυση ευστάθειάς τους.

Άσκηση 6.7. Διακριτό Μοντέλο Θηράματος – Θηρευτή

Ξεκινώντας από την αδιάστατη μορφή του μοντέλου συμβίωσης, βρείτε τα σημεία ισορροπίας και μελετήστε την ανάλυση ευστάθειάς τους.

Άσκηση 6.8. Συνεχές Μοντέλο SIR

Θεωρείστε το συνεχές SIR μοντέλο. Μελετήστε το χώρο φάσεων του μοντέλου, εστιάζοντας στις μεταβλητές S και I . [Υπόδειξη: Υπολογίστε πρώτα τον λόγο dI/dS .]

Άσκηση 6.9. Συνεχές Μοντέλο SIR – Σοβαρότητα επιδημίας

Θεωρείστε το συνεχές SIR μοντέλο. Εξετάστε τη σοβαρότητα της επιδημίας, υπολογίζοντας το μέγιστο στη μεταβολή του αριθμού της ομάδας των ασθενών, βρίσκοντας το σημείο που η παράγωγος dI/dt γίνεται ίση με μηδέν.

Άσκηση 6.10. Διακριτό Μοντέλο SIR

Θεωρείστε το διακριτό SIR μοντέλο. Επιλύστε το επαναληπτικά στον υπολογιστή και μελετήστε τη μορφή των καμπυλών $S(t)$, $I(t)$, και $R(t)$ για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων των μοντέλων.

6.4.2 Εργασίες

Εργασία 6.1. Μοντέλο Ανταγωνισμού

Υποθέστε πληθυσμιακό μοντέλο ανταγωνισμού της μορφής που είδαμε παραπάνω, στο υποκεφάλαιο 1.2:

$$\begin{aligned}\frac{dN_1}{dt} &= r_1 N_1 \left(1 - \frac{N_1}{K_1} - b_{12} \frac{N_2}{K_2} \right) \\ \frac{dN_2}{dt} &= r_2 N_2 \left(1 - \frac{N_2}{K_2} - b_{21} \frac{N_1}{K_1} \right)\end{aligned}$$

- Περιγράψτε τι δηλώνει ο κάθε όρος.
- Αδιαστατοποιήστε το σύστημα. Βρείτε τα σημεία ισορροπίας και ελέγξτε την ευστάθεια τους.
- Επιλύστε το σύστημα στον υπολογιστή.
- Κάνετε τη γραφική παράσταση $N_1(t)$, $N_2(t)$, vs. t , για $r_1 = r_2 = 1$ και διαφορετικές τιμές των ρυθμών αύξησης r . Συζητήστε τα αποτελέσματα. Πως σχετίζεται η συμπεριφορά με αυτή του συνεχούς μοντέλου;

Εργασία 6.2. Διακριτό SIS μοντέλο

Θέλουμε να μελετήσουμε την περίπτωση εξάπλωσης μιας μορφής της κοινής γρίπης. Θεωρήστε το μοντέλο SIS της μορφής:

$$\begin{aligned}S_{t+1} &= S_t - a S_t I_t + \gamma I_t \\ I_{t+1} &= I_t + a S_t I_t - \gamma I_t\end{aligned}$$

- Περιγράψτε τι δηλώνει ο κάθε όρος.
- Επιλύστε το σύστημα στον υπολογιστή.
- Κάνετε τη γραφική παράσταση $S(t)$, $I(t)$, vs. t , για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων (σταθερών) του μοντέλου.

Συζητήστε τα αποτελέσματα. Πως σχετίζεται η συμπεριφορά με αυτή του SIR μοντέλου;

Εργασία 6.3. Κανιβαλισμός

Ο κανιβαλισμός είναι σύνηθες φαινόμενο για μερικά είδη εντόμων και ψαριών. Ένα μοντέλο (Cushing et al., 2001) για ένα είδος σκαθαριών (tribolium) χρησιμοποιεί 3 στάδια ανάπτυξης: L = νύμφη (larvae), P = χρυσαλλίδα (pupae) και A = ενήλικοι (adults) και τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$\begin{aligned}L_{t+1} &= f A_t \exp(-c_{EL} L_t - c_{EA} A_t) \\ P_{t+1} &= \tau_{LP} L_t \\ A_{t+1} &= P_t \exp(-c_{PA} A_t) + \tau_{AA} A_t.\end{aligned}$$

Όλες οι σταθερές είναι > 0 και το μοντέλο δεν λαμβάνει υπόψη ότι ο πληθυσμός περνά και από το στάδιο του αυγού. Μελετήστε το μοντέλο ως εξής:

- Εξηγήστε την βιολογική σημασία κάθε όρου. Αν $c_{EL} = c_{EA} = c_{PA} = 0$ το μοντέλο γίνεται τύπου Usher. Περιγράψτε ποιοτικά τις διαφορές μεταξύ των δύο μοντέλων.
- Επιλύστε το αρχικό σύστημα στον υπολογιστή σε διακριτή μορφή.
- Κάνετε τη γραφική παράσταση $L(t)$, $P(t)$, $A(t)$, T ($T = L + P + A$) vs. t , για συγκεκριμένες τιμές των σταθερών: $f = 7.483$, $c_{EL} = 0.01200$, $c_{EA} = 0.009170$, $c_{PA} = 0.004139$, $\tau_{L,P} = 0.7330$, και διαφορετικές τιμές της σταθεράς $\tau_{A,A}$ από 0.1 έως 0.9. Ποια είναι η συμπεριφορά των πληθυσμών σε μεγάλους χρόνους;

- (δ) Δοκιμάστε επίσης διαφορετικές τιμές των παραμέτρων (π.χ. $f = 10.45$, $c_{EL} = 0.01731$, $c_{EA} = 0.01310$, $c_{PA} = 0.35$, $\tau_{L,P} = 0.8$, $\tau_{A,A} = 0.04$). Συζητήστε τη διαφορά των αποτελεσμάτων.

Εργασία 6.4. Καθορισμός φύλλου με τη θερμοκρασία (*Temperature-Dependent Sex Determination, TSD*)

Σε κάποια είδη (π.χ. κροκόδειλος) το φύλο καθορίζεται από τη θερμοκρασία επώασης των αυγών κατά τη διάρκεια της κύησης. Στόχος: Η ανάπτυξη ενός πληθυσμιακού μοντέλου για τη μελέτη του φαινομένου TSD. Θα πρέπει να συμπεριλάβετε τη διαφορετική συμπεριφορά ανάλογα με το φύλλο καθώς και την ηλικία. Βιβλιογραφία: (Murray 1989, Chapter 4). Κατηγοριοποίηση ενός πληθυσμού ανάλογα με κάποιους δείκτες. Τα μοντέλα Leslie-Usher μπορούν να χρησιμοποιηθούν για το σχεδιασμό στρατηγικών ανάπτυξης πληθυσμών οι οποίοι κινδυνεύουν.

Εργασία 6.5. Μελέτη ανοσοποιητικού συστήματος (*immune system*)

Στόχος: Η μαθηματική μοντελοποίηση του ανοσοποιητικού συστήματος. Μελετήστε τη βιβλιογραφία και επιλέξτε ένα μοντέλο. Παρουσιάστε το μοντέλο ελέγχοντας ποιοτικά και ποσοτικά τη συμπεριφορά του.

Βιβλιογραφία: (“A basic mathematical model for the immune response” by Mayer et al. in Chaos 5:155-160, 1995; “Modeling Dynamic Aspects of the Immune Response,” in Theoretical Immunology, Vol I by A. Perelson, pp. 167-188.).

6.4.3 Αλγόριθμοι / Κώδικες

Κώδικας MATLAB για το Συνεχές Μοντέλο Lotka-Volterra

```
% =====
% Biological_Models_Prey_Predator_Lotka_Volterra.m
% This is a script-function that simulates the Lotka-Volterra pray-predator model.
%
% Pray - Predator Biological Models
%
% This m-file describes a prey-predator systems.
% The general form of the system's equations is:
%
% dN/dt = F(N,P)
% dP/dt = G(N,P)
%
% =====
% Different models can be considered with different functional forms for F
% and G.
% Here we consider the following models:
% (a) Lotka-Volterra model
%      dN/dt = N(a-bP)
%      dP/dt = P(cN-d)
%
% Model parameters are a, b, c, d
%
% -- First we draw a phase portrait for the pray-predator model.
% Results are shown at each time step.
% -- Second, we plot the populations of pray and predator for the time
% period
%
% Equations are solved using a numerical ODE solver.
```

```

%
% 04/15
% =====

function Lotka_Volterra()

% Clears history and command window
close all; clear all;

% -- run parameters
pausetime = 0.1; % Shows solutions at each time step.
iterations = 1; % Sets initial iteration count to 1;
runtime = 20; % Duration time of simulation.

% -- Equation parameter values
a = 1.0;
b = 2.0;
c = 2.0;
d = 1.0;

% -- Initial conditions for x and y
initialx = 1.0;
initialy = 1.0;

fprintf('-----\nLotkaVolterra Predator Prey model \n\nMatlab code\n-----')
%fprintf('\n\nParameter values set,')
%fprintf('\n\nalpha = %2.6f \nbeta = %2.6f \ngamma = %2.6f \ndelta = %2.6f ',alpha,beta,gamma,d)
%fprintf('\n\nTo plot a time series graph for x, set the choice parameter in the code to 1.')
%fprintf('\n\nSet choice to 2 to plot a time series graph for y.\n\nSimulation will run in ')

% Solves equations using numerical ODE solver 45 (nonstiff runge kutta)
deq1=@(t,x) [x(1)*(a - b*x(2)); x(2)*(c*x(1)-d)];
[t,sol] = ode45(deq1,[0 runtime],[initialx initialy]);

arraysize = size(t); % Sets time array size for the for loop.

% -- Solutions are plotted at each time step
for i = 1 : max(arraysize)
    plot(sol(iterations,1),sol(iterations,2),'.','color',[rand; rand; rand],'markersize',14,'l')
    hold on
    title(['Lotka-Volterra Equations      t = ' num2str(t(iterations))'],'fontsize',12)
    xlabel('N','fontsize',12)
    ylabel('P','fontsize',12)
    axis([min(sol(:,1)) max(sol(:,1)) min(sol(:,2)) max(sol(:,2))])

    %text(0.1,0.5,'Time Series graph will be shown at the end of the simulation')

    iterations = iterations + 1; % Adds 1 to the iteration count.
    pause(pausetime)
end

```

```
% -- Graph of x and y time series
figure (2);
hold on;
%title(['Lotka-Volterra time series for x and y, run time = ' num2str(max(t)) ' seconds '], 'font
%plot(t(:,1),sol(:,1),'b.','markersize',10)
plot(t(:,1),sol(:,1),'b')
plot(t(:,1),sol(:,2),'r','markersize',10)
%axis([0 max(t(:,1)) 0 max(sol(:,2),sol(:,1))])
%axis([min(t(:,1)) max(t(:,1)) min(sol(:,2)) max(sol(:,2))])
legend('Prey','Predator');
xlabel('Time Steps');
ylabel('Population');
hold off;
```

Κώδικας MATLAB για το Διακριτό Μοντέλο Lotka–Volterra

```
function prey_predator()
% =====
% Biological_Models_Discrete_Prey_Predator.m
% This is a script-function that simulates a discrete prey-predator model.
% Note that an m-file can contain many functions.
%
% Pray - Predator Biological Models
%
% This m-file describes a prey-predator systems.
% The general form of the system's equations is:
%
%  $dN = F(N,P)$ 
%  $dP = G(N,P)$ 
%
% Different models can be considered with different functional forms
%
% 04/15
% =====

% Clears history and command window
close all; clear all;

% number of time steps
N = 150;
% -- const is a struct containing all constants for the model
const.K = 1;
%const.r = 1.3;
%const.s = 0.5;
%const.u = 0.7;
%const.v = 1.6;
const.r = 1.0;
const.s = 0.5;
const.u = 1.5;
```

```

const.v = 2.8;

% p: prey
% q: predator
p = zeros(1,N);
q = zeros(1,N);

% initial population
p(1) = 1.0;
q(1) = 0.5;

% find populations at each time step
for i=2:N
    [p(i) q(i)] = F(p(i-1),q(i-1),const);
end

% population vs time plot
figure (1);
%subplot(1,2,1)
plot(1:N,p(:),'r.-',1:N,q(:),'k.-')
legend('prey','predator')
xlabel('Time Steps')
ylabel('Population')

% phase plot
%subplot(1,2,2)
figure (2);
plot(p(:),q(:),'k.-')
xlabel('prey')
ylabel('predator')

%-----

function [y1 y2] = F(x1,x2,c)

x1x2 = x1*x2;

y1 = x1 * (1+c.r*(1-x1/c.K)) - c.s * x1x2;
y2 = (1-c.u)*x2 + c.v * x1x2;

```

Βιβλιογραφία

- Allman, J. R. (2004). *Mathematical models in biology: An introduction*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Brauer, F., & Castillo-Chavez, C. (2012). *Mathematical models in population biology and epidemiology* (2nd ed.). New York: Springer. Retrieved from <http://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4614-1686-9>
- Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical models in biology*. Boston: McGraw-Hill.

- Murray, J. D. (2002). *Mathematical biology ii: Spatial models and biomedical applications*. New York: Springer. Retrieved from <http://www.springerlink.com/content/r8h0h7>
- Shonkwiler, R. W. (2002). *Mathematical biology i: An introduction with maple and matlab*. Springer. Retrieved from <http://www.springerlink.com/content/978-0-387-70983-3/>
- Stewart. (1999). *Life's other secret: The new mathematics of the living world*. Wiley. John Wiley & Sons. Inc.
- Wikipedia. (2015). *Lotka–volterra model*. An Essay on the Principle of Population. Retrieved from https://en.wikipedia.org/wiki/Lotka-Volterra_equations

Κεφάλαιο 7

Στοχαστικά Συστήματα – Μέθοδοι Monte Carlo

Περίληψη

Το κεφάλαιο αυτό ασχολείται με τη μαθηματική μοντελοποίηση στοχαστικών συστημάτων και πιο ειδικά με τις μεθόδους Monte Carlo. Αρχικά αναφέρονται συνοπτικά οι βασικές έννοιες των στοχαστικών διεργασιών, των Μαρκοβιανών αλυσίδων και των μεθόδων στοχαστικής προσομοίωσης. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στους αλγόριθμους τύπου Monte Carlo και στις γεννήτριες τυχαίων αριθμών. Κατόπιν παρουσιάζεται λεπτομερώς ο αλγόριθμος Metropolis-Hastings. Ακολουθούν παραδείγματα εφαρμογής του Metropolis Monte Carlo σε διαφορετικά συστήματα που αφορούν: (α) υπολογισμό βασικών ολοκληρωμάτων, (β) μοντελοποίηση απλών μοριακών συστημάτων. Για την καλύτερη υλοποίηση των αλγορίθμων από το χρήστη παρουσιάζονται ψευδοκώδικες σε αναλυτική μορφή. Η επίλυση των παραδειγμάτων γίνεται με χρήση της γλώσσας MATLAB, ενώ στο παράρτημα του κεφαλαίου υπάρχουν οι αντίστοιχοι κώδικες. Τέλος σε υπερ-σύνδεσμο (ιστοσελίδα του μαθήματος) θα υπάρχει επιπλέον διαδραστικό υλικό που έχει σχέση με τους υπολογιστικούς αλγόριθμους αυτού του κεφαλαίου και πιο συγκεκριμένα προσομοιώσεις Monte Carlo μοριακών συστημάτων με παραμέτρους οι οποίες ορίζονται από το χρήστη.

Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Βασικές γνώσεις πιθανοτήτων και Στατιστικής.
- Επιθυμητή γνώση στις Στοχαστικές Διεργασίες.
- Αριθμητική ανάλυση.
- Σχετικά κεφάλαια του παρόντος συγγράμματος: Κεφάλαια 2 και 3.

7.1 Εισαγωγή: Στοχαστικά Συστήματα

Το κεφάλαιο αυτό είναι μια σύντομη εισαγωγή σε μεθόδους μαθηματικής μοντελοποίησης στοχαστικών συστημάτων. Αρχικά θα δούμε τι είναι τα στοχαστικά συστήματα και ποιες είναι οι βασικές τους ιδιότητες. Η μαθηματική μοντελοποίηση των στοχαστικών συστημάτων μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας πολλές διαφορετικές κατηγορίες αριθμητικών μεθόδων, η παρουσίαση των οποίων είναι πέρα από τους σκοπούς ενός βασικού μαθήματος «Μαθηματικής Μοντελοποίησης» αλλά και του συγγράμματος. Εδώ θα εστιάσουμε στις μεθόδους προσομοιώσεων Monte Carlo. Πιο συγκεκριμένα, θα παρουσιάσουμε διεξοδικά τους πιο σημαντικούς αλγόριθμους Monte Carlo. Επίσης θα δούμε εφαρμογές τους σε διάφορα συστήματα.

Ως ένα πρώτο ορισμό θα λέγαμε ότι οι μέθοδοι μοντελοποίησης στοχαστικών συστημάτων Monte Carlo είναι μια μεγάλη κατηγορία υπολογιστικών μεθόδων, κοινά χαρακτηριστικά των οποίων είναι: (α) χρήση «τυχαίων αριθμών», και (β) η παρατήρηση ότι αυτοί έχουν συγκεκριμένες ιδιότητες. (Robert, 2004; Liu, 2001) Μέσω των παραπάνω χαρακτηριστικών ένα πολύ μεγάλο εύρος πιθανών προβλημάτων μπορεί να μελετηθεί, το οποίο σχετίζεται με τις φυσικές επιστήμες, τα οικονομικά, τις κοινωνικές επιστήμες κλπ. (Landau & Binder, 2009; Gardiner, 2009)

7.1.1 Ντετερμινιστικά – Στοχαστικά Συστήματα

Αρχικά ας θυμηθούμε κάποιες βασικές ιδιότητες των δυναμικών συστημάτων ($\Delta\Sigma$), τα οποία μελετήθηκαν εκτενώς σε προηγούμενο μέρος (δες Κεφάλαιο 3). Γενικά, με τον όρο $\Delta\Sigma$ εννοούμε την περιγραφή της (χρονικής) εξέλιξης μιας μεταβλητής, ή ενός σημείου, στο γεωμετρικό χώρο μέσω συγκεκριμένων κανόνων. Τα $\Delta\Sigma$ μπορούν να χωριστούν σε ντετερμινιστικά και στοχαστικά ανάλογα με τη μορφή της χρονικής εξέλιξης τους. Πιο συγκεκριμένα, θεωρήστε μια (εξαρτημένη) μεταβλητή $A(t)$, όπου t η ανεξάρτητη μεταβλητή, συνήθως χρόνος. Το $\Delta\Sigma$ της $A(t)$ είναι:

- **Ντετερμινιστικό:** Αν η μελλοντική κατάσταση του συστήματος, $A(t)$, καθορίζεται πλήρως από δεδομένες αρχικές τιμές του συστήματος, $A(0)$. Σε μια τέτοια περίπτωση δεν υπάρχει τυχαιότητα στην εξέλιξη της A .
- **Στοχαστικό:** Αν δεδομένες αρχικές τιμές του συστήματος, $A(0)$ υπάρχουν περισσότερες από μία πιθανές μελλοντικές καταστάσεις, $A(t)$. Οι καταστάσεις αυτές δεν είναι κατ' ανάγκη ισοπίθανες.

Εύκολα καταλαβαίνουμε ότι η έννοια των στοχαστικών συστημάτων συνδέεται άμεσα με τις πιθανότητες και τις στοχαστικές διεργασίες, τις οποίες παρουσιάζουμε συνοπτικά στην παρακάτω ενότητα.

Παραδείγματα ντετερμινιστικών συστημάτων:

- Κλασική μηχανική: Νόμοι του Νεύτωνα.
- Κβαντική μηχανική: Εξίσωση Schroendiger.
- Ροή ρευστών: Εξισώσεις Navier-Stokes.
- Ντετερμινιστικό Χάος.
- κλπ.

Παραδείγματα στοχαστικών συστημάτων:

- Τυχαίοι περίπατοι (Random walks).
- Κίνηση Brown.
- Χρηματιστήριο: Τιμές μετοχών.
- Τιμές βιολογικών-ιατρικών παραμέτρων ασθενών. κλπ.

Ερώτηση κατανόησης 7.1. Προτείνετε περισσότερα παραδείγματα ντετερμινιστικών και στοχαστικών συστημάτων;

Όπως έχουμε δει σε όλη τη διάρκεια του βιβλίου, ένας από τους κύριους στόχους της μαθηματικής μοντελοποίησης είναι η μελέτη φαινομένων τα οποία εξελίσσονται στο χρόνο και τα οποία συνήθως περιγράφονται με τη μορφή δυναμικών συστημάτων. Συνεπώς απαιτείται η επίλυση των εξισώσεων που περιγράφουν κάποιο συγκεκριμένο ΔΣ. Στα προηγούμενα κεφάλαια παρουσιάσαμε αναλυτικά την επίλυση ΔΣ σε διαφορετικά προβλήματα από τις φυσικές επιστήμες (Κεφ. 2, 3 και 4) και τη Βιολογία (Κεφ. 5 και 6). Όλα τα παραπάνω παραδείγματα αφορούν ντετερμινιστικά συστήματα τα οποία εμφανίζουν προβλεπόμενη ή χαοτική (ντετερμινιστικό χάος) χρονική συμπεριφορά. Το παρόν κεφάλαιο αφορά τη μελέτη στοχαστικών συστημάτων και την αριθμητική τους επίλυση χρησιμοποιώντας μεθόδους Monte Carlo.

7.1.2 Πιθανότητες – Στοχαστικές Διεργασίες

Όπως αναφέραμε και παραπάνω βασικό χαρακτηριστικό των στοχαστικών μαθηματικών μοντέλων είναι η τυχαιότητα που υπάρχει στην εξέλιξη των μεταβλητών, οι οποίες συνήθως ακολουθούν μια συγκεκριμένη κατανομή πιθανότητα. Εύκολα καταλαβαίνουμε ότι για την παρουσίαση αυτών των μοντέλων είναι απαραίτητες βασικές γνώσεις πιθανοτήτων και στατιστικής. Μια συνοπτική παρουσίαση βασικών εννοιών πιθανότητας παρουσιάζεται στο Παράρτημα του συγγράματος. Επίσης, πριν προχωρήσουμε στην λεπτομερή παρουσίαση μελέτη των στοχαστικών συστημάτων θα θέλαμε να υπενθυμίσουμε κάποιους βασικούς ορισμούς σχετικά με τις στοχαστικές διεργασίες, οι οποίοι είναι απαραίτητοι σε κάθε στοχαστικό μαθηματικό μοντέλο.

Ορισμός. Τυχαιοί Αριθμοί ή Τυχαίες Μεταβλητές (Random Numbers / Random Variables): Τυχαιοί αριθμοί ή τυχαίες μεταβλητές, T.M., είναι ποσότητες των οποίων οι τιμές προέρχονται από μια κατανομή πιθανότητας και δεν έχουν κάποια συγκεκριμένη συσχέτιση μεταξύ τους. □

Χαρακτηριστικό παράδειγμα τυχαίας μεταβλητής είναι το πόσες φορές έφερε «γράμματα» ή «κορώνα» ένα νόμισμα σε N τυχαίες ρίψεις.

Ορισμός. Στοχαστικές ή Τυχαίες Διεργασίες (Stochastic or Random Processes): Στοχαστικές διεργασίες είναι συναρτήσεις των οποίων οι τιμές είναι τυχαίες (μη ντετερμινιστικές) μεταβλητές. Είναι δηλαδή ποσότητες με συγκεκριμένες κατανομές πιθανότητας. □

Παραδείγματα στοχαστικών διεργασιών είναι:

- Διακριτό χρόνο (discrete time): Χρονική σειρά τυχαίων μεταβλητών.
- Τυχαίο Πεδίο (random field): Τυχαία συνάρτηση με πεδίο τιμών μια περιοχή του χώρου.

Ορισμός. Γεννήτρια Τυχαίων Αριθμών (Random Number Generator): Γεννήτρια τυχαίων αριθμών (ή μεταβλητών) ονομάζουμε ένα αλγόριθμο, ο οποίος δημιουργεί μια ακολουθία τυχαίων αριθμών. □

Παρακάτω θα συζητήσουμε λεπτομερώς τις έννοιες των «τυχαίων αριθμών» και αλγορίθμων δημιουργίας τους.

Ερώτηση κατανόησης 7.2. Δώστε παραδείγματα τυχαίων μεταβλητών.

7.2 Αλγόριθμοι Monte Carlo

Τι ονομάζουμε αλγόριθμους ή προσομοιώσεις Monte Carlo;

Όπως είδαμε και στην εισαγωγή του κεφαλαίου οι μέθοδοι μοντελοποίησης ή προσομοίωσης Monte Carlo είναι μια μεγάλη κατηγορία υπολογιστικών μεθόδων, κοινά χαρακτηριστικά των οποίων είναι: (α) χρήση «τυχαίων αριθμών», και (β) η παρατήρηση ότι αυτοί υπακούουν σε συγκεκριμένες ιδιότητες (Robert, 2004; Liu, 2001)

Που χρησιμοποιούνται οι προσομοιώσεις Monte Carlo; Υπάρχει ένα πολύ μεγάλο εύρος προβλημάτων τα οποία μπορούν να επιλυθούν χρησιμοποιώντας μεθόδους Monte Carlo. Τα περισσότερα εξ' αυτών εμπίπτουν σε δύο γενικές κατηγορίες:

- *Υπολογισμός ολοκληρωμάτων* (ολοκλήρωση Monte Carlo): Δηλαδή υπολογισμός αναμενόμενων τιμών (expectation values) συναρτήσεων μίας ή περισσότερων ανεξάρτητων (τυχαίων) μεταβλητών.
- *Εύρεση ελαχίστου ή μεγίστου συναρτήσεων* (βελτιστοποίηση Monte Carlo): Σε πολλά προβλήματα, κυρίως από τη βελτιστοποίηση διεργασιών, καταλήγουμε σε υπολογισμούς που αφορούν ελάχιστα, ή μέγιστα, συναρτήσεων (π.χ. συναρτήσεις κόστους).

Σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις οι υπό μελέτη συναρτήσεις έχουν ως ανεξάρτητες μεταβλητές, τυχαίες μεταβλητές.

7.2.1 Ένα πρώτο παράδειγμα

Ας δούμε ένα πολύ απλό παράδειγμα. Στόχος μας είναι ο υπολογισμός του αριθμού π μέσω του παρακάτω μοντέλου – αλγορίθμου.

Το πείραμα σταγόνων βροχής (raindrop experiment): Έστω τετράγωνο το οποίο περικλείει ένα κύκλο. Η ακτίνα του κύκλου είναι r ενώ το μήκος κάθε πλευράς του τετραγώνου είναι ίσο με τη διάμετρο του κύκλου, $2r$ (Σχήμα 7.1). Το εμβαδόν του κύκλου είναι:

$$A_c = \pi r^2 \quad (7.1)$$

ενώ το εμβαδόν του τετραγώνου με το οποίο τον περικλείουμε

$$A_s = (2r)^2 = 4r^2. \quad (7.2)$$

Εύκολα βλέπουμε ότι ο αριθμός π μπορεί να υπολογισθεί ως:

$$\pi = 4 \frac{A_c}{A_s}. \quad (7.3)$$

Για τον υπολογισμό λοιπόν του π χρειαζόμαστε τον υπολογισμό του λόγου των δύο εμβαδών, A_c/A_s . Ο υπολογισμός αυτός περιμένουμε ότι δεν μπορεί να γίνει «ακριβώς» δεδομένου ότι το π είναι άρρητος αριθμός. Αυτό όμως που μπορεί να γίνει είναι να προσεγγίσουμε τον λόγο A_c/A_s , και μέσω αυτού τον αριθμό π , με μια συγκεκριμένη ακρίβεια. Ο υπολογισμός κάθε εμβαδού απαιτεί τον υπολογισμό του αντίστοιχου ολοκληρώματος. Μια επιλογή για να επιτευχθεί αυτό θα ήταν η αριθμητική ολοκλήρωση. Αυτό θα μπορούσε να γίνει με διάφορες αριθμητικές μεθόδους, όπως ο κανόνας του τραπεζίου και οι εξισώσεις τύπου Newton – Cotes (π.χ.. Simpson's rule). Μια εναλλακτική επιλογή αριθμητικής ολοκλήρωσης για τον υπολογισμό θα ήταν η ακόλουθη διαδικασία (ολοκλήρωση Monte Carlo):

- Δημιουργία N τυχαίων σημείων μέσα στο τετράγωνο.
- Εύρεση του αριθμού των σημείων, εκ των N τυχαίων σημείων που βρίσκονται στο τετράγωνο, τα οποία βρίσκονται επίσης μέσα στον κύκλο. Έστω M αυτά τα σημεία.
- Συνεπώς ο αριθμός π προσεγγίζεται ως

$$\pi(N) = 4 \frac{M}{N}.$$

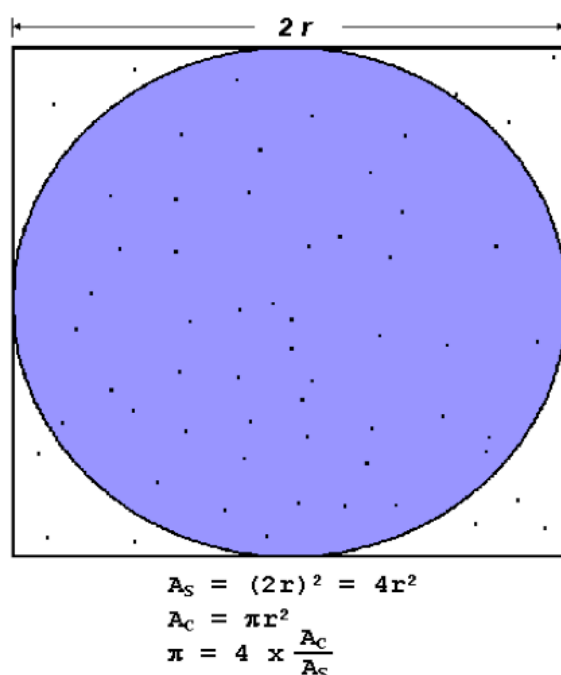
Η παραπάνω διαδικασία προσέγγισης ενός ολοκληρώματος (εδώ εμβαδού ενός γεωμετρικού σχήματος) με τη χρήση τυχαίων αριθμών, είναι ένας πολύ απλός αλγόριθμος Monte Carlo, ο οποίος μπορεί εύκολα να υλοποιηθεί μέσα σε λίγες γραμμές κώδικα από κάθε φοιτητή (ή μαθητή) ο οποίος γνωρίζει μια οποιοδήποτε γλώσσα προγραμματισμού. Η υλοποίηση του παραπάνω αλγορίθμου προτείνεται ως άσκηση για τον αναγνώστη.

Η γραφική αναπαράσταση του παραπάνω αλγορίθμου φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα (Σχήμα 7.1), για ένα συγκεκριμένο υπολογιστικό «πείραμα».

Προσέξτε ότι ο λόγος M/N προσεγγίζει τον λόγο των δύο εμβαδών για μεγάλα N , δηλαδή

$$\frac{A_c}{A_s} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M}{N}.$$

Συνεπώς η προσέγγιση του λόγου των δύο εμβαδών και κατ' επέκταση του αριθμού π βελτιώνεται όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των «τυχαίων σημείων» N .



Σχήμα 7.1: Σχηματική αναπαράσταση για τον υπολογισμό του αριθμού π . Με τελείες βλέπουμε σημεία τα οποία δημιουργούνται με κάποιο τρόπο «τυχαία» μέσα στο τετράγωνο, ενώ κάποια από αυτά βρίσκονται και μέσα στον κύκλο.

7.2.2 Ιστορικά στοιχεία

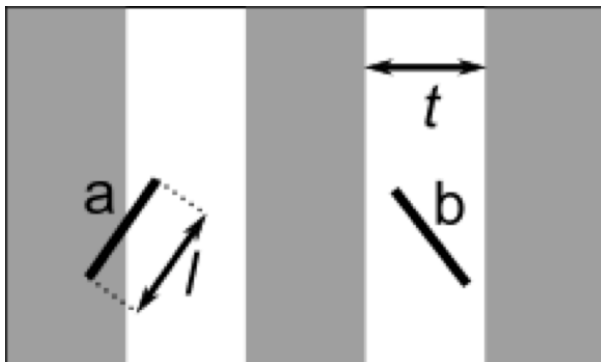
Ο πρώτος (:) αλγόριθμος τύπου Monte Carlo αναπτύχθηκε από τον Buffon το 1777. Στην πραγματικότητα είναι ένας ακόμη αλγόριθμος υπολογισμού του αριθμού π , λίγο πιο περίπλοκος από τον αλγόριθμο που είδαμε παραπάνω. Έστω το παρακάτω πρόβλημα. Υποθέστε ότι έχουμε ένα χώρο με παράλληλες ξύλινες πλάκες, με ακριβώς το ίδιο πάχος, και πετάμε σε αυτόν μια βελόνα. Το πάχος κάθε πλάκας είναι t και το μήκος κάθε βελόνας l .

Ερώτηση: Ποια είναι η πιθανότητα, P , η βελόνα να διασταυρώνει μια γραμμή (την ένωση) μεταξύ δύο πλακών; (Δες Σχήμα 7.2)

Απάντηση: Θεωρούμε ότι ρίχνουμε τυχαία βελόνες μέσα στο χώρο. Αν υποθέσουμε ότι το μήκος κάθε βελόνας είναι μικρότερο του πάχους των πλακών, δηλαδή $l < t$, τότε η ζητούμενη πιθανότητα είναι:

$$P = \frac{2l}{\pi t}. \quad (7.4)$$

Η απόδειξη της παραπάνω σχέσης αφήνεται ως άσκηση στον αναγνώστη.



Σχήμα 7.2: Σχηματική αναπαράσταση για τον υπολογισμό του αριθμού π με τη μέθοδο του Buffon.

Όπως βλέπουμε η παραπάνω σχέση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του αριθμού π . Πιο συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος υπολογισμού του π με βάση το παραπάνω πείραμα θα ήταν ο εξής:

- Πρώτα δημιουργούμε «τυχαία» N βελόνες μέσα στο χωρίο μας. Αυτό επιτυγχάνεται με τη χρήση τυχαίων μεταβλητών μέσα σε ένα συγκεκριμένο χωρίο. Κάθε βελόνα περιγράφεται από 2 τ.μ., τη θέση του κέντρου της και τη γωνία ως προς τη κάθετη γραμμή (ένωση) μεταξύ δύο πλακών.
- Κατόπιν μετράμε πόσες από αυτές διασταυρώνονται με τις γραμμές (ενώσεις) μεταξύ των πλακών. Έστω ότι αυτές είναι M .
- Η πιθανότητα διασταύρωσης είναι $P = M/N$. Άρα τελικά: $\pi \simeq \frac{2l}{Pt} = \frac{N}{M} \frac{2l}{t}$.

Παρατήρηση 7.1. Προσέξτε ότι με τον παραπάνω αλγόριθμο, όπως και με αυτόν που είδαμε σε στο προηγούμενο υπό-κεφάλαιο, για να υπολογίσουμε ακριβώς τον αριθμό π πρέπει να υπολογίσουμε ακριβώς την πιθανότητα P . Χρησιμοποιώντας N τυχαίες μεταβλητές (βελόνες) ουσιαστικά έχουμε μια προσέγγιση της P , την P_N , (και αντίστοιχα του αριθμού π). Η προσέγγιση αυτή βελτιώνεται όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των τυχαίων μεταβλητών N .

7.3 Γεννήτριες Τυχαίων Αριθμών

Από τα παραπάνω απλά παραδείγματα ολοκλήρωσης Monte Carlo παρατηρούμε ότι το κοινό στοιχείο των μεθόδων επίλυσής τους είναι η δημιουργία «τυχαίων αριθμών» από μια κατανομή, ή αλλιώς η δειγματοληψία της συγκεκριμένης κατανομής. Η σωστή δειγματοληψία, την οποία συχνά περιγράφουμε και ως προσομοίωση, είναι το πρώτο και σημαντικότερο βήμα σε κάθε αλγόριθμο Monte Carlo, καθώς το στοχαστικό μοντέλο θα επιλυθεί χρησιμοποιώντας τους τυχαίους αριθμούς, οι οποίοι έχουν προκύψει από την συγκεκριμένη δειγματοληψία. Οι τυχαίοι αριθμοί είναι μια πολύ σημαντική έννοια στη θεωρία πιθανοτήτων και γενικότερα στην στατιστική ανάλυση. Τι είναι όμως οι «τυχαίοι αριθμοί» και πως δημιουργούνται; Όπως είδαμε και στην εισαγωγή τυχαίοι αριθμοί είναι μια ακολουθία αριθμών, η οποία έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

- (α) Οι τιμές των αριθμών κατανέμονται μέσα σε ένα διάστημα, ακολουθώντας κάποια συγκεκριμένη κατανομή (συνήθως την ομοιόμορφη), και

- (β) Δεν υπάρχει καμία συσχέτιση μεταξύ των αριθμών. Δηλαδή δεν μπορούμε να προβλέψουμε τις επόμενες (μελλοντικές) τιμές των αριθμών δεδομένων των προηγούμενων τιμών τους.

Οι τυχαίοι αριθμοί είναι μια πρωταρχική έννοια σε κάθε αλγόριθμο Monte Carlo και γενικότερα στοχαστικής μοντελοποίησης – προσομοίωσης. Συνδέονται δε άμεσα με την έννοια των τυχαίων μεταβλητών, που είδαμε παραπάνω.

Ορισμός. *Γεννήτρια Τυχαίων Αριθμών:* Γεννήτρια τυχαίων αριθμών ονομάζουμε τον αλγόριθμο δημιουργίας τυχαίων αριθμών σε κάποιο διάστημα, ακολουθώντας κάποια συγκεκριμένη κατανομή. Συνήθως το διάστημα είναι το $[0, 1]$ και οι αριθμοί δημιουργούνται έτσι ώστε να υπακούουν την Ομοιόμορφη Κατανομή (uniform distribution). Πιο συγκεκριμένα αν $u = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ είναι μια σειρά n τυχαίων αριθμών, η γεννήτρια:

- Ξεκινώντας από μια αρχική τιμή u_0 δημιουργεί, μέσω μιας σχέσης $Di(u_0)$, την σειρά (u_i) στο διάστημα $[0, 1]$.
- Οι τιμές $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ πρέπει να αναπαράγουν τη συμπεριφορά ομοιόμορφων τυχαίων μεταβλητών, δηλαδή να υπακούουν την κατανομή $U[0, 1]$.

□

Παρατήρηση 7.2. «Φιλοσοφικό Παράδοξο»: Προσέξτε ότι οι «τυχαίοι αριθμοί» δημιουργούνται από ένα ντετερμινιστικό αλγόριθμο. Για το λόγο αυτό ονομάζονται και ψεύδο-τυχαίοι. Λόγω ακριβώς της ντετερμινιστικής τους φύσης οι παραπάνω αλγόριθμοι επαναλαμβάνουν περιοδικά την ίδια ακολουθία τυχαίων αριθμών, αν ξεκινήσουν από ακριβώς τις ίδιες αρχικές συνθήκες.

Ορισμός. *Περίοδος Γεννήτριας Τυχαίων Αριθμών:* Περίοδος ενός αλγορίθμου δημιουργίας τυχαίων αριθμών είναι ο ακέραιος αριθμός m για τον οποίο ισχύει:

$$u_{i+m} = u_i.$$

□

Η επαναλαμβανόμενη σειρά τυχαίων αριθμών δεν είναι σημαντικό πρόβλημα όσο το μέγεθός της δεν ξεπερνά την περίοδο του αλγορίθμου. Αν όμως την ξεπεράσει μπορεί να δημιουργήσει πρόβλημα λόγω της ισχυρής συσχέτισης μεταξύ των δημιουργούμενων αριθμών. Παρακάτω θα δούμε αναλυτικά τρόπους – αλγορίθμους δημιουργίας «τυχαίων», ή καλύτερα ψευδό-τυχαίων αριθμών.

7.3.1 Ομοιόμορφη Κατανομή

Όπως είδαμε και παραπάνω, η πιο συνηθισμένη σειρά τυχαίων αριθμών αφορά μια ακολουθία αριθμών στο διάστημα $[0, 1]$, η οποία ακολουθεί την ομοιόμορφη κατανομή, δηλαδή την $U[0, 1]$. Στο κεφάλαιο αυτό θα εξετάσουμε δύο διαφορετικούς αλγορίθμους δημιουργίας τυχαίων αριθμών από την ομοιόμορφη κατανομή.

Αλγόριθμος «Συμβατική Γεννήτρια»

Ο πρώτος αλγόριθμος που θα δούμε είναι η συμβατική γεννήτρια (congruential generator) τυχαίων αριθμών. Έστω $X = [X_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$) μία σειρά n τυχαίων αριθμών. Η σειρά αναπαράγεται μέσω της σχέσης:

$$Y_i = D(x) = (aY_{i-1} + b) \mod (M), \quad X_i = \frac{Y_i}{M} \quad (7.5)$$

όπου a, b, M είναι σταθερές (ακέραιοι φυσικοί αριθμοί). Το δεξί μέλος της παραπάνω σχέσης υποδηλώνει το υπόλοιπο της διαίρεσης των ακεραίων αριθμών M και $(aY_i - 1 + b)$.

Πιο συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- (α) Αρχικά επιλέγουμε τις τιμές των ακεραίων a, b, M καθώς και μία αρχική τιμή (“seed”) $Y_0 \in \{1, 2, \dots, M - 1\}$.
- (β) Για $i = 1, 2, \dots$ υπολογίζουμε μέσω των παραπάνω σχέσεων την ακεραία μεταβλητή Y_i και την πραγματική X_i .

Ο αλγόριθμος αυτός είναι αρκετά απλός και μια υλοποίηση του παρουσιάζεται στο Παράρτημα του κεφαλαίου σε γλώσσα MATLAB. Πώς ξέρουμε όμως ότι ο παραπάνω αλγόριθμος είναι μια «καλή» γεννήτρια τυχαίων αριθμών; Όπως αναφέραμε θα πρέπει να ελέγξουμε:

- (α) Αν αναπαράγει την ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $[0, 1]$, και
- (β) Αν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των τυχαίων αριθμών που δημιουργεί.

Κατόπιν υλοποιούμε τον παραπάνω αλγόριθμο για συγκεκριμένες τιμές των σταθερών. Αποτελέσματα φαίνονται στο παρακάτω διάγραμμα (Σχήμα 7.3). Πρώτα, στο Σχήμα 7.3α βλέπουμε ενδεικτικά μια σειρά $n_1 (= 1000)$ τυχαίων αριθμών. Όπως παρατηρούμε όλοι οι αριθμοί βρίσκονται, όπως θα περιμέναμε, μέσα στο επιθυμητό διάστημα $[0, 1]$ ενώ ακολουθούν μια αρκετά «ακανόνιστη» τροχιά.

Στο Σχήμα 7.3β βλέπουμε την κατανομή αυτών, η οποία όπως βλέπουμε προσεγγίζει την ομοιόμορφη κατανομή. Ο συγκεκριμένος αριθμός όμως δεν είναι ακόμη αρκετά μεγάλος για να αναπαράγει με ακρίβεια την ομοιόμορφη κατανομή. Στο Σχήμα 7.3γ βλέπουμε την κατανομή ενός μεγαλύτερου αριθμού τυχαίων αριθμών $n_2 (= 10000)$. Όπως βλέπουμε η κατανομή αυτών είναι πολύ πιο «κοντά» στην ομοιόμορφη. Αυτό είναι κάτι που περιμένουμε καθώς όσο αυξάνει η δειγματοληψία από μια συγκεκριμένη κατανομή, τόσο περισσότερο θα πρέπει η κατανομή των δειγματοληπτούμενων Τ.Μ. θα πρέπει να προσεγγίζει τη κατανομή αυτή. Στο όριο που ο αριθμός αυτός φτάνει στο άπειρο θα πρέπει να αναπαράγεται ακριβώς η συγκεκριμένη κατανομή.

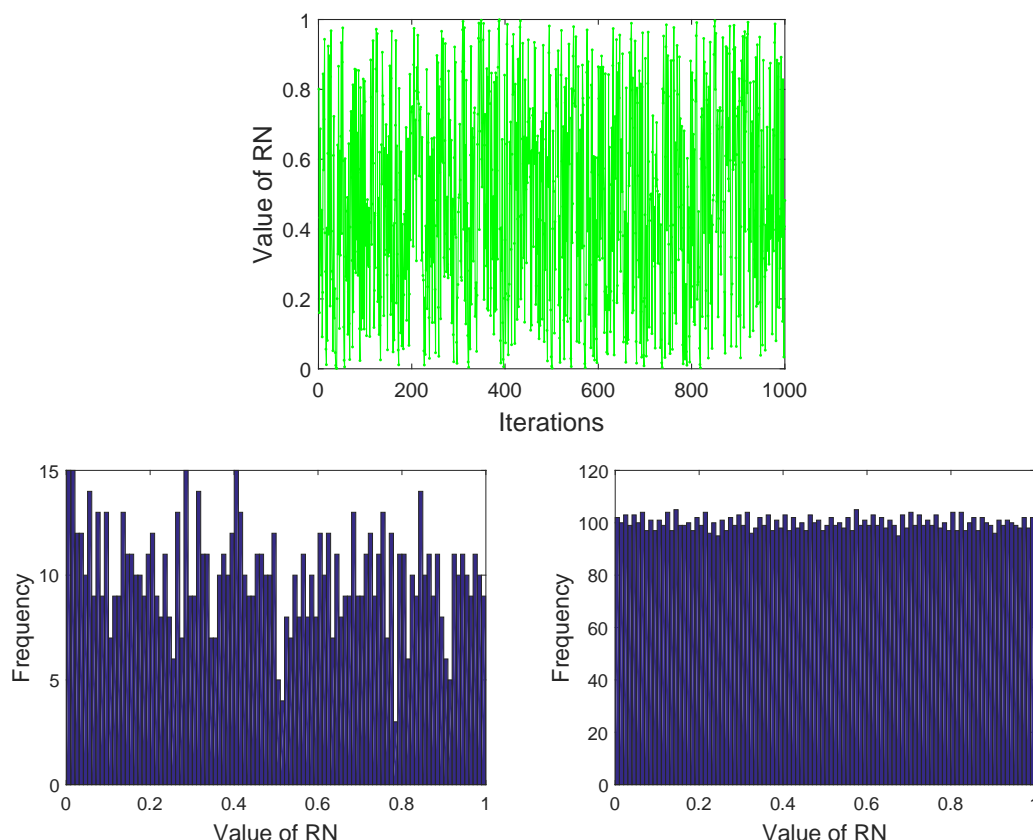
Ερώτηση κατανόησης 7.3. Για ποιο λόγο η κατανομή συχνοτήτων στο Σχήμα 7.3γ για $n = 10000$ έχει τιμές περίπου ίσες με 100; Θα άλλαζε αυτός ο αριθμός αν άλλαζε ο αριθμός των τυχαίων αριθμών n ;

Σε δεύτερο στάδιο ελέγχουμε το αν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των διαφορετικών τυχαίων αριθμών. Αν υπάρχει θα περιμέναμε να είναι πιο ισχυρή μεταξύ διαδοχικών τυχαίων αριθμών. Για το λόγο αυτό ελέγχουμε τη συσχέτιση με διαγράμματα διαδοχικών αριθμών τύπου X_{2k} vs. X_{2k+1} όπου $k = 1, 2, \dots$, δηλαδή άρτιων-περιττών. Αν δεν υπάρχει συσχέτιση τα ζευγάρια (X_{2k}, X_{2k+1}) μπορούν να πάρουν κάθε τιμή στο $[0-1, 0-1]$, ενώ αν υπάρχει συσχέτιση δεν είναι όλα τα ζευγάρια δυνατά και δημιουργούνται συγκεκριμένα «μοτίβα». Στο Σχήμα 7.4 παρουσιάζουμε τα ζευγάρια (X_{2k}, X_{2k+1}) από την παραπάνω υλοποίηση. Βλέπουμε ότι, τουλάχιστον για τις συγκεκριμένες τιμές των σταθερών του αλγορίθμου, υπάρχει ισχυρή συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών τυχαίων αριθμών. Συνεπώς ο συγκεκριμένος αλγόριθμος δεν είναι η καλύτερη δυνατή λύση.

Αλγόριθμος «Mersenne Twister»

Ο δεύτερος αλγόριθμος που θα δούμε είναι ο αλγόριθμος Mersenne Twister. Αυτός είναι ένας ιδιαίτερα πολύπλοκος αλγόριθμος που χρησιμοποιείται σε πολλά πακέτα μοντελοποίησης για την ακριβή δημιουργία τυχαίων αριθμών. Επίσης είναι ενσωματωμένη συνάρτηση και προεπιλεγμένη γεννήτρια τυχαίων αριθμών σε διάφορες γλώσσες προγραμματισμού, όπως η γλώσσα MATLAB (συνάρτηση rand). Τα αποτελέσματα από την εφαρμογή του αλγορίθμου Mersenne Twister φαίνονται παρακάτω στο Σχήμα 7.5. Αρχικά στο Σχήμα 7.5α βλέπουμε την κατανομή $n(n = 1000)$ τυχαίων αριθμών η οποία όπως θα περιμέναμε προσεγγίζει πολύ καλά την ομοιόμορφη κατανομή. Κατόπιν στο Σχήμα 7.5β εξετάζουμε συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών αριθμών μέσω γραφημάτων X_{2k} vs. X_{2k+1} όπως και παραπάνω. Είναι ξεκάθαρο ότι δεν υπάρχει καμία συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών τυχαίων αριθμών.

Ερώτηση κατανόησης 7.4. Πώς μπορούν οι κατανομές συχνοτήτων (Σχήματα 7.3β, 7.3γ και 7.5α) να γίνουν κατανομές πιθανοτήτων;



Σχήμα 7.3: Τυχαίοι αριθμοί που ακολουθούν την ομοιόμορφη κατανομή από τον αλγόριθμο «συμβατική γεννήτρια»: (α) Μια «Χρονό-σειρά» $n = 1000$ τυχαίων αριθμών. (β) Κατανομή συχνοτήτων $n = 1000$ τυχαίων αριθμών. (γ) Κατανομή συχνοτήτων $n = 10000$ τυχαίων αριθμών.

Συμπερασματικά μια καλή γεννήτρια τυχαίων αριθμών είναι ένας ντετερμινιστικός αλγόριθμος ο οποίος θα πρέπει:

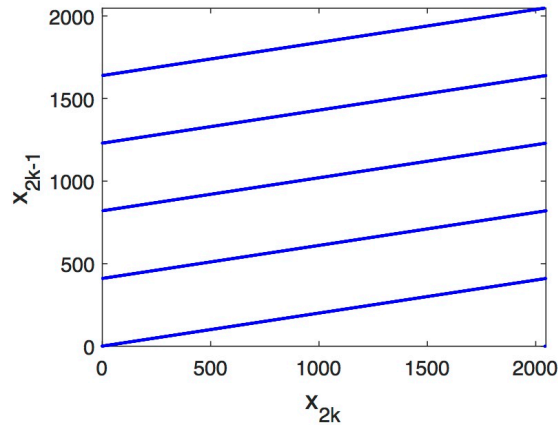
- (α) να αναπαράγει την συγκεκριμένη κατανομή,
- (β) να μην υπάρχει συσχέτιση μεταξύ των τ.μ., και
- (γ) να έχει αρκετά μεγάλη περίοδο.

Σήμερα υπάρχουν πλέον αρκετά καλοί τέτοιοι αλγόριθμοι, οι οποίοι είναι ενσωματωμένοι ως εσωτερικές συναρτήσεις σε κάθε γλώσσα προγραμματισμού.

7.3.2 Αντίστροφη Μέθοδος

Όπως είδαμε παραπάνω η δειγματοληψία τυχαίων μεταβλητών από την ομοιόμορφη κατανομή μπορεί να γίνει με μεγάλη επιτυχία. Τι γίνεται όμως αν επιθυμούμε δειγματοληψία από μια διαφορετική κατανομή; Αυτό είναι ένα αρκετά δύσκολο πρόβλημα το οποίο δεν έχει λύση για οποιαδήποτε κατανομή.

Στην πραγματικότητα μπορούμε να πάρουμε απ' ευθείας δειγματοληψία, μόνο από ένα μικρό αριθμό κατανομών. Υπάρχει όμως ένα θεώρημα που μας επιτρέπει να πάρουμε από μία κατανομή αν ξέρουμε την αντίστροφη συνάρτηση κατανομής. Παρακάτω, πρώτα ορίζουμε την αντίστροφη συνάρτηση και μετά δίνουμε ένα παράδειγμα δειγματοληψίας από μια κατανομή, χρησιμοποιώντας την αντίστροφή



Σχήμα 7.4: Συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών τυχαίων αριθμών που ακολουθούν την ομοιόμορφη κατανομή από τον αλγόριθμο συμβατική γεννήτρια.

της.

Ορισμός. *Αντίστροφη Συνάρτηση (Inverse Function):* Για μια συνάρτηση $F \rightarrow R$ η αντίστροφή της F^- είναι η:

$$F^-(u) = \inf\{x : F(x) \geq u\}. \quad (7.6)$$

□

Λήμμα. Έστω U μια τυχαία μεταβλητή με $u \sim \text{Uniform}(0, 1)$ και F η προσθετική συνάρτηση κατανομής. Τότε η τ.μ. $X = F^-(u)$ έχει κατανομή $f(\cdot)$ όπου $F^-(u) = \inf\{x : F(x) \geq u\}$.

Σύντομο πρόβλημα 7.1. Αποδείξτε το παραπάνω Λήμμα.

Υπενθυμίζουμε εδώ τον ορισμό της προσθετικής συνάρτησης κατανομής.

Ορισμός. *Προσθετική Συνάρτηση Κατανομής (Cumulative Distribution Function)* Έστω μια τυχαία μεταβλητή X . Η συνάρτηση:

$$F(x) = P(X \leq x) \quad (7.7)$$

ονομάζεται προσθετική συνάρτηση κατανομής.

□

Παράδειγμα 7.1. *Εκθετική κατανομή.* Η εκθετική κατανομή είναι μια οικογένεια κατανομών η οποία ορίζεται, για ένα δεδομένο φυσικό αριθμό λ , ως:

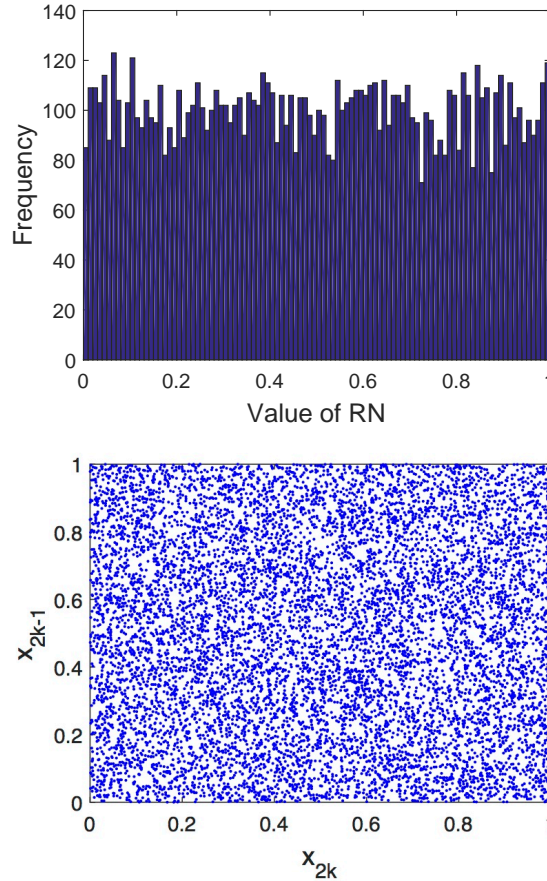
$$\text{Exp}(\lambda) = \begin{cases} \lambda \exp(-\lambda x), & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}. \quad (7.8)$$

Έστω μια τυχαία μεταβλητή, X , η οποία υπακούει την εκθετική κατανομή με $\lambda = 1$, δηλαδή: $X \sim \text{Exp}(1)$. Η προσθετική συνάρτηση κατανομής είναι: $F(x) = 1 - \exp(-x)$. Υπολογίζοντας την αντίστροφη συνάρτηση, δηλαδή λύνοντας ως προς x , έχουμε την: $u = 1 - \exp(-x) \Rightarrow x = -\log(1 - u)$. Άρα, για $u \sim U(0, 1)$ η $x = -\log(u)$ ακολουθεί την εκθετική κατανομή. □

Παρατήρηση 7.3. Προσέξτε ότι σε αυτό το παράδειγμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα ότι αν η u είναι τ.μ. που ακολουθεί την ομοιόμορφη κατανομή στο $(0, 1)$ τότε το ίδιο ισχύει και για την $(1 - u)$, δηλαδή αν $u \sim U(0, 1)$ και η $(1 - u) \sim U(0, 1)$.

Παρατήρηση 7.4. Η εφαρμογή της παραπάνω μεθόδου απαιτεί ακριβής γνώση (υπολογισμό) της προσθετικής συνάρτησης κατανομής. Σε πολλές περιπτώσεις (κατανομές) αυτό δεν είναι εφικτό.

Ερώτηση κατανόησης 7.5. Ποια είναι η προσθετική συνάρτησης κατανομής της κανονικής κατανομής;



Σχήμα 7.5: Δημιουργία n τυχαίων αριθμών που ακολουθούν την ομοιόμορφη κατανομή από τον αλγόριθμο Mersenne Twister ($n = 10000$). (α) Κατανομή συχνοτήτων (β) Συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών τυχαίων αριθμών.

7.3.3 Κανονική Κατανομή

Όπως είδαμε παραπάνω η δειγματοληψία τυχαίων μεταβλητών από την ομοιόμορφη κατανομή μπορεί να γίνει με μεγάλη επιτυχία. Τι γίνεται όμως αν επιθυμούμε δειγματοληψία από μια διαφορετική κατανομή; Αυτό είναι ένα αρκετά δύσκολο πρόβλημα το οποίο δεν έχει λύσει για οποιαδήποτε κατανομή.

Στην πραγματικότητα μπορούμε να πάρουμε απευθείας δειγματοληψία, μόνο από ένα μικρό αριθμό κατανομών. Από τις κατανομές αυτές πιο σημαντική είναι η κανονική κατανομή καθώς σε πολλά προβλήματα εμφανίζονται τυχαίες μεταβλητές οι οποίες υπακούουν την κανονική κατανομή. Παρακάτω περιγράφουμε ένα αλγόριθμο δημιουργίας τ.μ. από την κανονική κατανομή.

Αλγόριθμος Box – Muller

Θεωρήστε ζευγάρι τ.μ. (X_1, X_2) και τις αντίστοιχες πολικές συντεταγμένες (R, θ) , όπου:

$$X_1 = R \cos \theta, \quad X_2 = R \sin \theta. \quad (7.9)$$

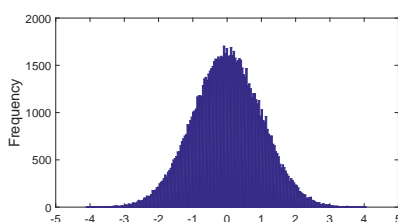
Αν οι X_1, X_2 έρχονται από την κανονική κατανομή με μέση τιμή 0 και διασπορά 1, $N(0, 1)$ τότε, η τ.μ. θ έρχεται από την ομοιόμορφη κατανομή στο $0 - 2\pi$, $U(0, 2\pi)$ και η R_2 από την εκθετική κατανομή με $\lambda = 1/2$, $\text{Exp}(1/2)$.

Σύντομο πρόβλημα 7.2. Αποδείξτε την παραπάνω ιδιότητα.

Συνεπώς ένας αλγόριθμος δημιουργίας τ.α. από την κανονική κατανομή είναι ο ακόλουθος:

- (α) Δημιουργία μιας τ.μ. («γωνίας») $\theta \sim U(0, 2\pi)$ και μιας δευτέρας τ.μ. («ακτίνας») $R_2 \sim \text{Exp}(1/2)$. Υπενθυμίζουμε ότι στα προηγούμενα υπο-κεφάλαια είδαμε τρόπους δημιουργίας τ.μ. τόσο από την ομοιόμορφη όσο και από την εκθετική κατανομή.
- (β) Μετατροπή των τ.μ. θ και R στις καρτεσιανές συντεταγμένες από τις παραπάνω σχέσεις (7.9).
- (γ) Επιστροφή στο βήμα (α).

Στο Σχήμα 7.6 παρουσιάζεται η κατανομή που ακολουθούν n ($n = 10000$) τυχαίοι αριθμοί που έχουν δημιουργηθεί από τον παραπάνω αλγόριθμο. Όπως βλέπουμε ότι προσεγγίζουν με μεγάλη ακρίβεια την κανονικά κατανομή.



Σχήμα 7.6: Κατανομή n ($n = 10000$) τυχαίων αριθμών που ακολουθούν την κανονική κατανομή από τον αλγόριθμο Box-Muller.

7.3.4 Μέθοδοι Αποδοχής – Απόρριψης

Όπως αναφέραμε και παραπάνω στη γενική περίπτωση δεν μπορούμε να πάρουμε δειγματοληψία, για μια τ.μ. X , από οποιαδήποτε πυκνότητα πιθανότητας $f(\cdot)$. Μια εναλλακτική μέθοδο σε αυτή την περίπτωση είναι οι εφαρμογή μεθόδων αποδοχής-απόρριψης (accept-reject).

Βασική ιδέα των μεθόδων αποδοχής – απόρριψης: Δειγματοληπτούμε την τ.μ. X από μια άλλη πυκνότητα $g(\cdot)$ η οποία είναι σχετικά παρόμοια της $f(\cdot)$, και από την οποία μπορούμε να πάρουμε δειγματοληψία.

Η παραπάνω ιδέα βασίζεται στο παρακάτω θεώρημα:

Θεώρημα. *Πρωταρχικό Θεώρημα προσομοίωσης (Fundamental Theorem of Simulation).* Η προσομοίωση της τ.μ. $X \sim F(x)$ είναι ισοδύναμη με την προσομοίωση του ζευγαριού τ.μ. $(X, U) \sim U\{(x, u) : 0 < u < F(x)\}$.

Το παραπάνω θεώρημα δεν μας βοηθά άμεσα καθώς η προσομοίωση του ζευγαριού (X, U) είναι εξίσου δύσκολη με αυτή της αρχικής μεταβλητής. Αυτό όμως που μπορεί να γίνει είναι η προσομοίωση του ζευγαριού (X, U) σε ένα μεγαλύτερο σύνολο και κατόπιν η τελική επιλογή του ζευγαριού που ικανοποιεί τον παραπάνω περιορισμό.

Αλγόριθμος Αποδοχής – Απόρριψης (Accept – Reject or Rejection Sampling Algorithm)

Έστω δύο πυκνότητες $f(\cdot), g(\cdot)$ με $f(x) < Mg(x)$ για κάθε x . Μπορούμε να δημιουργήσουμε δείγμα από την $f(\cdot)$ μέσω του παρακάτω αλγορίθμου:

- (α) Δημιουργία $X \sim g, U \sim U[0, 1]$

(β) Αποδοχή $Y = X$ με πιθανότητα $f(x)/Mg(x)$

(γ) Επιστροφή στο βήμα (α).

Τελικά εύκολα δείχνουμε ότι για κάθε μετρήσιμο σύνολο οι τιμές της X είναι από την κατανομή $f(\cdot)$:

$$P(X \leq x) = P(Y \leq x | U < F(y)) = \frac{\int_a^x \int_0^{F(y)} du dy}{\int_a^b \int_0^{F(y)} du dy} = \int_a^x F(y) dy. \quad (7.10)$$

Με άλλα λόγια αν θεωρήσουμε ότι οι τ.μ. που θέλουμε να δημιουργήσουμε βρίσκονται μέσα σε ένα σύνολο τιμών και δημιουργήσουμε ομοιόμορφο δείγμα τ.μ. από ένα υπερσύνολό του, τότε κρατώντας μόνο τους όρους που είναι και μέσα στο μπορούμε τελικά να έχουμε ένα ομοιόμορφο δείγμα στο.

7.4 Αλγόριθμοι Monte Carlo Μαρκοβιανών Αλυσίδων

Στα προηγούμενα παραδείγματα παρουσιάσαμε αλγορίθμους Monte Carlo, οι οποίοι δειγματοληπτούν (προσομοιώνουν) μια τυχαία μεταβλητή X από μια συγκεκριμένη κατανομή, έστω $\pi(x)$. Αυτό μπορεί να γίνει, όπως είδαμε, είτε απ' ευθείας από την κατανομή $\pi(x)$, είτε, αν αυτό δεν είναι δυνατόν, χρησιμοποιώντας μια βοηθητική κατανομή, έστω $g(x)$.

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιάσουμε μεθόδους Monte Carlo, και πιο συγκεκριμένα αλγορίθμους τύπου Metropolis – Hastings, οι οποίοι βασίζονται στη δημιουργία στατιστικά εξαρτώμενου δείγματος από μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα. Οι αλγόριθμοι αυτοί στη γενική τους μορφή ονομάζονται αλγόριθμοι MCMC (Markov Chain based Monte Carlo).

Παράδειγμα 7.2. Έστω ότι θέλουμε να πάρουμε δειγματοληψία από μια τυχαία μεταβλητή x , η οποία ακολουθεί την κατανομή Boltzmann:

$$\pi(x) = \frac{1}{Z} \exp [-h(x)] \quad (7.11)$$

όπου x είναι η τιμή της τ.μ., X , $h(x)$ είναι μια συνάρτηση της x και Z είναι μια σταθερά κανονικοποίησης. \square

Η δειγματοληψία από την παραπάνω κατανομή δεν είναι εύκολη καθώς δεν μπορεί να γίνει με άμεσο τρόπο, ενώ και η σταθερά Z είναι συνήθως άγνωστη. Στη περίπτωση αυτή μπορούμε προσομοιώσουμε την $\pi(x)$ χρησιμοποιώντας μια Μαρκοβιανή διεργασία. Τι είναι όμως μια Μαρκοβιανή αλυσίδα;

7.4.1 Μαρκοβιανές Αλυσίδες

Ορισμός. *Μαρκοβιανή Αλυσίδα (Markovian Chain).* Μαρκοβιανή αλυσίδα ονομάζουμε μια σειρά τυχαίων μεταβλητών (μπορούμε να τη δούμε και σαν «χρονική» σειρά), για την οποία η πιθανότητα μετάβασης σε μια νέα κατάσταση εξαρτάται μόνο από τη δεδομένη κατάσταση της σειράς. \square

Έστω μια ακολουθία τ.μ. της μορφής:

$$x^{(0)}, \quad x^{(1)}, \quad x^{(2)}, \quad \dots, \quad x^{(t)}.$$

Η παραπάνω σειρά («αλυσίδα») ονομάζεται Μαρκοβιανή αν ισχύει η Μαρκοβιανή ιδιότητα, δηλαδή αν η τιμή της σειράς σε μια χρονική στιγμή, έστω $t+1$, εξαρτάται μόνο από τη τιμή της σειράς στην αμέσως προηγούμενη στιγμή, t . Δηλαδή αν η πιθανότητα η τ.μ. να λάβει μια τιμή στην $t+1$ εξαρτάται μόνο από την τιμή της στην αμέσως προηγούμενη τιμή:

$$P \left(x^{(t+1)} = x_{t+1} | x^{(t)} = x_t, \dots, x^{(0)} = x_0 \right) = P \left(x^{(t+1)} = x_{t+1} | x^{(t)} = x_t \right) \quad (7.12)$$

όπου x_{t+1}, x_t, \dots, x_0 είναι οι τιμές της τ.μ. X στις χρονικές στιγμές $t+1, t, \dots$ και 0 αντίστοιχα.

Ορισμός. Πίνακας ή Πυρήνας Μετάβασης (Transition Matrix or transition kernel): Η πιθανότητα:

$$A(x, y) := P\left(x^{(t+1)} = y \mid x^{(t)} = x\right)$$

ονομάζεται Πίνακας Μετάβασης. □

Παρατήρηση 7.5. Προσέξτε ότι το άθροισμα των πιθανοτήτων πάνω σε όλες τις δυνατές τιμές του y πρέπει να δίνει μονάδα, δηλαδή, $\sum_y A(x, y) = 1$ για κάθε x .

Παράδειγμα 7.3. Τυχαίος Περίπατος σε 1 Διάσταση. Υποθέστε την παρακάτω ακολουθία τυχαίων μεταβλητών:

$$x_n = x_{n-1} + \epsilon_n \quad (7.13)$$

όπου x_n και x_{n-1} είναι οι τιμές της τ.μ. στις «χρονικές» στιγμές n και $n - 1$ αντίστοιχα, είναι ένας πραγματικός αριθμός και η ϵn είναι ένας τυχαίος αριθμός από την κανονική κατανομή, δηλαδή $\epsilon n \sim N(\mu, \sigma_2)$, π.χ. την τυπική κανονική κατανομή, $\epsilon n \sim N(0, 1)$.

Σε αυτή την περίπτωση η ακολουθία των x είναι μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα καθώς οι τυχαίοι αριθμοί ϵn είναι, από τον ορισμό τους, ανεξάρτητοι του n . Η ακολουθία αυτή ονομάζεται τυχαίος περίπατος (random walk). □

Το παράδειγμα αυτό είναι αρκετά γενικό και μπορεί να περιγράψει ένα πολύ μεγάλο εύρος προβλημάτων. Ως εφαρμογή θεωρήστε ότι x_n είναι τ.μ. που ακολουθούν την κατανομή Bernoulli (π.χ. προέρχονται από ρίψη νομισμάτων) με πιθανές τιμές $x_n = 1$ ή $x_n = -1$ και:

$$P(x_n = 1) = 1 - P(x_n = -1) = P.$$

Έστω τώρα η τ.μ. S , οι τιμές της οποίας ορίζονται ως:

$$S^{(t)} = x_1 + x_2 + \dots + x_t, S^{(0)} = 0$$

δηλαδή η οποία περιγράφει τη διαφορά μεταξύ φορών «γράμματα» και «κορώνας» σε n ρίψεις νομισμάτων. Εύκολα μπορούμε να δείξουμε ότι η $S^{(t)}$, $t = 0, 1, 2, \dots$, είναι μια Μαρκοβιανή αλυσίδα.

Σύντομο πρόβλημα 7.3. Δείξτε ότι η παραπάνω ακολουθία $S(t)$, $t = 0, 1, \dots$, είναι μια Μαρκοβιανή αλυσίδα.

Παράδειγμα 7.4. Τυχαίος Περίπατος σε d – διαστάσεις. Ο τυχαίος περίπατος μπορεί εύκολα να γενικευτεί στην περίπτωση μιας ακολουθίας τυχαίων μεταβλητών σε πολλές διαστάσεις, δηλαδή αν το x είναι διάνυσμα τυχαίων μεταβλητών της μορφής: $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$.

Σε αναλογία με το παραπάνω παράδειγμα η σειρά:

$$x_n = Ax_n + \epsilon_n \quad (7.14)$$

είναι μια Μαρκοβιανή αλυσίδα. □

Παρατήρηση 7.6. Προσέξτε ότι στη γενική περίπτωση οι παραπάνω τυχαίοι αριθμοί ϵn είναι ένα διάνυσμα τυχαίων αριθμών.

Ορισμός. Εναλλακτικός Ορισμός – Μαρκοβιανή Αλυσίδα (Markovian Chain): Έστω το πιθανό σύνολο τιμών της τ.μ. X για μια δεδομένη χρονική στιγμή $t + 1$. Αν η πιθανότητα η τ.μ. να λάβει μια τιμή στην $t + 1$ εξαρτάται μόνο από την τιμή της την αμέσως προηγούμενη τιμή, δηλαδή αν:

$$P\left(x^{(t+1)} \in \mid x_0, x_1, x_2, \dots, x_t\right) = P\left(x^{(t+1)} \in \mid x^{(t)} = x_t\right) \quad (7.15)$$

η αλυσίδα ονομάζεται Μαρκοβιανή. Και στην παραπάνω σχέση x_t, \dots, x_0 είναι οι τιμές της τ.μ. X στις χρονικές στιγμές t, \dots και 0 αντίστοιχα. □

7.4.2 Αλγόριθμος Metropolis

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζουμε το πιο γνωστό αλγόριθμο Monte Carlo βασισμένο σε Μαρκοβιανές αλυσίδες, αλλά και γενικότερα το πιο γνωστό αλγόριθμο Monte Carlo. Θεωρούμε το παρακάτω πρόβλημα, που συζητήσαμε και σε προηγούμενο υπο-κεφάλαιο. Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε ιδιότητες μέσω προσομοίωσης για ένα στοχαστικό σύστημα το οποίο ακολουθεί την κατανομή Boltzmann:

$$\pi(x) = \frac{\exp[-h(x)]}{\iint \exp[-h(x)] dx} = \frac{1}{Z} \exp[-h(x)]. \quad (7.16)$$

Στην παραπάνω σχέση η $h(x)$ είναι μια συνάρτηση της (n -διάστατης στη γενική μορφή) τυχαίας μεταβλητής x και Z είναι μια σταθερά κανονικοποίησης (n -πολλαπλό ολοκλήρωμα).

Η σταθερά Z είναι συνήθως άγνωστη, καθώς ο υπολογισμός της απαιτεί τον υπολογισμό του n -διάστατου ολοκληρώματος, πρόβλημα που είναι εξίσου δύσκολο, αν όχι πιο δύσκολο, από το αρχικό πρόβλημα, δηλαδή την προσομοίωση της $\pi(x)$. Το πρόβλημα αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό καθώς όλα τα μοριακά συστήματα σε ισορροπία ακολουθούν την κατανομή Boltzmann. Σε αυτή την ιδιότητα οφείλεται κυρίως το πολύ μεγάλο εύρος εφαρμογών του αλγορίθμου Metropolis Monte Carlo.

Το παραπάνω πρόβλημα επιλύεται με τη χρήση Μαρκοβιανών αλυσίδων και τον αλγόριθμο Metropolis.

Ο αλγόριθμος Metropolis αναπτύχθηκε από τους N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller and E. Teller (MRRTT) το 1953 και είναι ο πιο γνωστός αλγόριθμος Monte Carlo.

Θεωρείστε μια n -διάστατη τυχαία μεταβλητή, στη χρονική στιγμή t , $\mathbf{x}(t) = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)\}$ η οποία ακολουθεί την κατανομή $\pi(\mathbf{x})$, παράδειγμα την κατανομή Boltzmann. Ο αλγόριθμος Metropolis αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- **Βήμα 1:** Αρχικά δημιουργούμε μια πρόταση (n -διάστατη τυχαία μεταβλητή) \mathbf{y} από ένα κανόνα μετάβασης (προτεινόμενη κατανομή) $T(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})$.
- **Βήμα 2:** Κατόπιν υπολογίζουμε την ποσότητα $r(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})$ όπου:

$$r(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{y}) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(\mathbf{y})}{\pi(\mathbf{x})} \right\}. \quad (7.17)$$

- **Βήμα 3:** Δημιουργία τυχαίου αριθμού από ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $(0, 1)$, δηλαδή $u \sim U(0, 1)$. Η νέα τιμή της Μαρκοβιανής αλυσίδας $\mathbf{x}(t+1)$ είναι:

$$\mathbf{x}^{(t+1)} = \begin{cases} \mathbf{y}, & \text{αν } u \leq r(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{y}) \\ \mathbf{x}^{(t)}, & \text{αν } u > r(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{y}) \end{cases} \quad (7.18)$$

Όπως βλέπουμε από τον αλγόριθμο αυτό η νέα τιμή της Τ.Μ., σε χρόνο $t+1$, είναι είτε η προηγούμενη (δηλαδή αυτή σε χρόνο t) είτε η νέα, η οποία προτείνεται με βάση κάποιο κανόνα μετάβασης.

Τέλος από την Μαρκοβιανή αλυσίδα της μεταβλητής \mathbf{x} , μπορούμε να υπολογίσουμε συναρτήσεις της \mathbf{x} οι οποίες σχετίζονται με τις ιδιότητες που μας ενδιαφέρουν. Ως παράδειγμα μπορούμε να βρούμε την μέση τιμή συναρτήσεων της μεταβλητής $f(\mathbf{x})$, δηλαδή να υπολογίσουμε n -διάστατα ολοκληρώματα της μορφής:

$$E\{f(\mathbf{x})\} = \int f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Παρατήρηση 7.7. Το μεγάλο πλεονέκτημα του παραπάνω αλγορίθμου είναι ότι μπορούμε να αναπτύξουμε την Μαρκοβιανή αλυσίδα, χωρίς να χρειάζεται να προσομοιώσουμε κατευθείαν από την κατανομή $\pi(\mathbf{x})$. Επίσης είναι σχετικά «απλός» αλγόριθμος στην υλοποίησή του.

Παρατήρηση 7.8. Ουσιαστικά η πολυπλοκότητα του Metropolis Monte Carlo αλγορίθμου έγκειται στην καλή επιλογή του κανόνα μετάβασης $T(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})$. Για κάθε πρόβλημα μπορούν γενικά να προταθούν διαφορετικοί κανόνες μετάβασης; η αποτελεσματικότητα σε κάθε περίπτωση πρέπει να εξετάζεται από

7.4.3 Αλγόριθμος Metropolis – Hastings

Ο παραπάνω αλγόριθμος υποθέτει ότι ο κανόνας μετάβασης είναι συμμετρικός, δηλαδή $T(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}) = T(\mathbf{y}, \mathbf{x}(t))$. Λίγα χρόνια αργότερα, το 1970, ο Hastings πρότεινε μια γενίκευση του παραπάνω αλγορίθμου για μη συμμετρικούς κανόνες μετάβασης.

Η μόνη διαφορά το γενικευμένου αλγορίθμου Metropolis – Hastings σε σχέση με τον αρχικό αλγόριθμο Metropolis είναι στον υπολογισμό της ποσότητας $r(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})$. Πιο συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος Metropolis – Hastings (1970) αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- **Βήμα 1:** Αρχικά δημιουργούμε μια πρόταση (n-διάστατη τυχαία μεταβλητή) \mathbf{y} από ένα κανόνα μετάβασης (προτεινόμενη κατανομή) $T(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})$.
- **Βήμα 2:** Κατόπιν υπολογίζουμε την ποσότητα $r(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})$ όπου:

$$r(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(\mathbf{y}) T(\mathbf{y}, \mathbf{x}(t))}{\pi(\mathbf{x}(t)) T(\mathbf{x}(t), \mathbf{y})} \right\} \quad (7.19)$$

- **Βήμα 3:** Δημιουργία τυχαίου αριθμού από ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $(0, 1)$, δηλαδή $u \sim U(0, 1)$. Η νέα τιμή της Μαρκοβιανής αλυσίδας $\mathbf{x}^{(t+1)}$ είναι:

$$\mathbf{x}^{(t+1)} = \begin{cases} \mathbf{y}, & \text{αν } u \leq r(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}) \\ \mathbf{x}(t), & \text{αν } u > r(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}) \end{cases} \quad (7.20)$$

Ο αλγόριθμος Metropolis – Hastings (η ο αλγόριθμος Metropolis) χρησιμοποιείται στις μέρες μας κατά κόρον σε ένα τεράστιο εύρος επιστημονικών πεδίων, από τη στατιστική φυσική, τη βιολογία, τη χημεία, και την οικονομία. Στο τέλος του κεφαλαίου υπάρχει πρότυπο ανάπτυξης γενικού αλγορίθμου Metropolis – Hasting σε γλώσσα MATLAB.

7.5 Παράδειγμα – Μοριακό Μοντέλο Σκληρών Σφαιρών

Εδώ παρουσιάζουμε ένα πρώτο παράδειγμα εφαρμογής αλγορίθμων Monte Carlo βασισμένων σε Μαρκοβιανές Αλυσίδες, και πιο συγκεκριμένα του αλγορίθμου Metropolis Monte Carlo.

Έστω N σφαιρικά σωματίδια (π.χ. άτομα ή μόρια), με συντεταγμένες

$$\mathbf{r} = (r_1, r_2, \dots, r_N)$$

σε ένα κουτί. Θεωρούμε ότι τα σωματίδια αλληλεπιδρούν ανά δύο, με ένα δυναμικό ζεύγους (pair potential) αλληλεπίδρασης της μορφής:

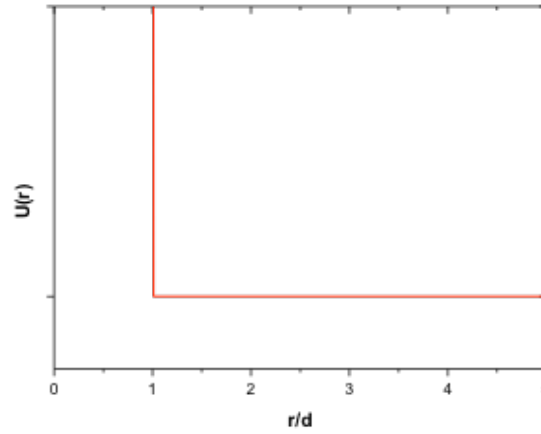
$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i=1, j>i}^N U(r_{ij}), \quad U(r_{ij}) = \begin{cases} \infty, & \text{αν } r_{ij} \leq d \\ 0, & \text{αν } r_{ij} > d \end{cases} \quad (7.21)$$

όπου r_{ij} είναι το μέτρο της απόστασης μεταξύ δύο σωματιδίων i, j και d η διάμετρος κάθε σωματιδίου.

Αν εξετάσουμε το πρόβλημα σε 3 διαστάσεις (η πιο γενική μορφή, αλλά επίσης το πρόβλημα μπορεί να μελετηθεί σε 2 ή ακόμη και 1 διάσταση), με x_i, y_i , και z_i , αντίστοιχα τις x, y, z συντεταγμένες, στο Καρτεσιανό επίπεδο, του μορίου i τότε η απόσταση μεταξύ δύο σωματιδίων i και j είναι:

$$t_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

Πρακτικά, το ότι η ενέργεια είναι άπειρη για αποστάσεις μικρότερες ή ίσες του d σημαίνει ότι τα σωματίδια δεν μπορούν να βρεθούν σε αποστάσεις μικρότερες ή ίσες με d , ενώ μηδενική ενέργεια για αποστάσεις μεγαλύτερες του d , σημαίνει ότι σε αυτές τις αποστάσεις τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν. Για το λόγο αυτό το παραπάνω μοντέλο ονομάζεται μοντέλο «σκληρών σφαιρών» (hard spheres model).



Σχήμα 7.7: Δυναμικό αλληλεπίδρασης μοντέλου σκληρών σφαιρών.

Παρατήρηση 7.9. Αν θεωρήσουμε ότι τα παραπάνω σωματίδια αντιπροσωπεύουν ένα μοριακό σύστημα στο κανονικό στατιστικό σύνολο NVT (σταθερός αριθμός σωματιδίων N , όγκου του συστήματος V και θερμοκρασίας) τότε η κατανομή την οποία υπακούουν είναι η κατανομή Boltzmann (δες Εξ. (7.11)):

$$\pi(\mathbf{r}) = \frac{\exp[-\beta U(\mathbf{r})]}{\int \int \int \exp[-\beta U(\mathbf{r})] d\mathbf{r}} = \frac{1}{Z} \exp[-\beta U(\mathbf{r})]$$

όπου β είναι η αντίστροφη θερμική ενέργεια, $\beta = 1/(k_B T)$, όπου k_B είναι η σταθερά Boltzmann και T η θερμοκρασία του συστήματος.

Στο Σχήμα 7.7 φαίνεται η μορφή του δυναμικού σκληρών σφαιρών. Προσέξτε ότι το παραπάνω δυναμικό καταρχήν δεν είναι ένα ρεαλιστικό δυναμικό για συγκεκριμένα μοριακά συστήματα. Σε μακροσκοπικό επίπεδο θα λέγαμε ότι τα σωματίδια συμπεριφέρονται σαν «μπάλες μπιλιάρδου».

Αντίθετα υπάρχουν πιο ρεαλιστικά δυναμικά (π.χ. δυναμικό Lennard – Jones) τα οποία εμφανίζουν πιο ρεαλιστική περιοχή άπωσης και έλξης. Ωστόσο το δυναμικό σκληρών σφαιρών είναι μια πολύ καλή πρώτη προσέγγιση για μεγάλο εύρος μοριακών συστημάτων, όπως αερίων, απλών μορίων, κολλοειδών, κλπ.

Ο αλγόριθμος Metropolis Monte Carlo για το παραπάνω μοντέλο σωματιδίων τύπου σκληρών σφαιρών αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- **Βήμα 1:** Έστω ότι τα σωματίδια βρίσκονται σε θέσεις r . Τυχαιά επιλογή ενός σωματιδίου, π.χ. το σωματίδιο i με συντεταγμένες x_i, y_i , και z_i .
- **Βήμα 2:** (Κανόνας Μετάβασης) Προτεινόμενη νέα θέση μέσω τυχαιάς μετατόπισης της θέσης του σωματιδίου σε κάθε διεύθυνση, δηλαδή:

$$r_i^{\text{temp}} = r_i + \Delta r, \quad \text{ή} \quad (x_i^{\text{temp}}, y_i^{\text{temp}}, z_i^{\text{temp}}) = (x_i + \Delta x, y_i + \Delta y, z_i + \Delta z)$$

όπου οι ποσότητες $\Delta x, \Delta y$ και Δz είναι τυχαιές μεταβλητές από μια συγκεκριμένη κατανομή, π.χ. την τυπική κανονική, δηλαδή $\Delta x \sim N(0, 1)$, $\Delta y \sim N(0, 1)$, $\Delta z \sim N(0, 1)$.

- **Βήμα 3:** Κατόπιν υπολογίζουμε την ποσότητα:

$$\exp[-\beta \Delta U] = \exp[-\beta (U(r^{\text{temp}}) - U(r))]$$

- **Βήμα 4:** Αποδοχή της νέας θέσης για το σωματίδιο i , με πιθανότητα ΔU , δηλαδή δημιουργία τυχαίου αριθμού u , από ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $(0, 1)$, $u \sim U(0, 1)$ και:

$$r_i^{\text{new}} = \begin{cases} r_i^{\text{temp}}, & \text{αν } u \leq \exp[-\Delta U] \\ r_i, & \text{αν } u > \exp[-\Delta U] \end{cases}$$

Παρατήρηση 7.10. Προσέξτε ότι η παραπάνω ποσότητα ΔU , στο μοντέλο των σκληρών σφαιρών, είναι ∞ ή 0. Συνεπώς πρακτικά το βήμα 4 δεν χρειάζεται καθώς η προτεινόμενη μετάβαση είναι αποδεκτή κάθε φορά που $\Delta U = 0$ και μη αποδεκτή αν $\Delta U = \infty$.

Με τον παραπάνω αλγόριθμο μπορούμε να δημιουργήσουμε μια Μαρκοβιανή αλυσίδα T.M. των θέσεων των σωματιδίων r , η οποία, σε μεγάλους χρόνους, υπακούει την επιθυμητή κατανομή Boltzmann. Κατόπιν οι τιμές της Μαρκοβιανής αλυσίδας μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να υπολογίσουν αναμενόμενες (μέσες) τιμές για διάφορες ποσότητες – συναρτήσεις των r , όπως για παράδειγμα την ενέργεια, την πίεση ως συνάρτηση τη θερμοκρασίας T .

7.6 Μελέτη

7.6.1 Ασκήσεις

Άσκηση 7.1. Οι «βελόνες του Buffon»

Θεωρήστε ένα χώρο με παράλληλες ξύλινες πλάκες, με ακριβώς το ίδιο πάχος, και πετάμε σε αυτόν μια βελόνα. Το πάχος κάθε πλάκας είναι t και το μήκος κάθε βελόνας ℓ . Θεωρούμε ότι ρίχνουμε τυχαία βελόνες μέσα στο χώρο.

A) Βρείτε τη πιθανότητα, P , η βελόνα να διασταυρώνει μια γραμμή (την ένωση) μεταξύ δύο πλακών για κάθε περίπτωση.

B) Δείξτε ότι αν υποθέσουμε ότι το μήκος κάθε βελόνας είναι μικρότερο του πάχους των πλακών, δηλαδή $\ell < t$, τότε η ζητούμενη πιθανότητα είναι:

$$P = \frac{2\ell}{\pi t}.$$

[Υπόδειξη: Ορίστε δύο ασυσχέτιστες τ.μ. (α) την απόσταση του κέντρου της βελόνας από την κοντινότερη γραμμή, X , και (β) τη γωνία μεταξύ της βελόνας και των γραμμών, θ , (παράλληλη γραμμή που διέρχεται από την αρχή της βελόνας). Κατόπιν υπολογίστε την πιθανότητα ως ολοκλήρωμα σε όλες τις πιθανές τιμές των X, θ .

Άσκηση 7.2. Αλγόριθμος Box – Muller

Υλοποιήστε τον αλγόριθμο Box – Muller όπως παρουσιάστηκε παραπάνω. Μελετήστε την κατανομή των τυχαίων αριθμών που προκύπτει.

Άσκηση 7.3. Γεννήτρια Τυχαίων Αριθμών

Στόχος της άσκησης αυτής είναι η εξέταση της αποδοτικότητας γεννητριών τυχαίων αριθμών. Για τα παρακάτω προγράμματα μπορείτε να χρησιμοποιήσετε οποιαδήποτε γλώσσα προγραμματισμού προτιμάτε (π.χ. MATLAB, C++, Fortran90). A) Θεωρήστε τον συμβατικό αλγόριθμο δημιουργίας ακολουθίας τυχαίων αριθμών (congruential generator), $X = [X_i] (i = 1, 2, \dots, n)$:

$$Y_i = D(x) = (aY_{i-1} + b) \mod (M), \quad X_i = \frac{Y_i}{M}$$

όπου a, b, M είναι σταθερές (φυσικοί αριθμοί). Υπολογίστε:

- (1) Αν, για δεδομένο n , η ακολουθία X υπακούει την ομοιόμορφη κατανομή στο $[0, 1]$. Υπολογίστε την πιθανότητα κάνοντας το ιστόγραμμα της X .

- (2) Μελετήστε αν υπάρχει συσχέτιση μεταξύ διαδοχικών τυχαίων αριθμών κάνοντας το διάγραμμα X_{2k-1} , vs. X_{2k} .

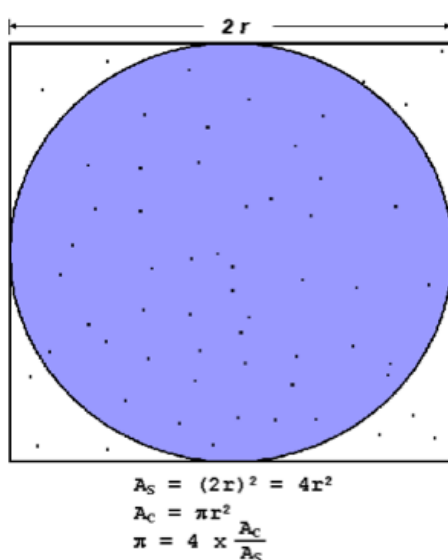
Θεωρήστε διαφορετικές τιμές για τις σταθερές (π.χ. $a = 453$, $b = 10$, $M = 213$) και διαφορετικές τιμές του n .

Β) Όπως έχουμε αναφέρει υπάρχουν καλύτεροι αλγόριθμοι δημιουργίας τυχαίων αριθμών. Θεωρείστε την προεπιλεγμένη γεννήτρια τυχαίων αριθμών της γλώσσας που χρησιμοποιείται (π.χ. MATLAB: συνάρτηση rand, Mersenne Twister algorithm). Περιγράψτε τον παραπάνω αλγόριθμο Mersenne Twister (<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/emt.html>).

Γ) Επαναλάβετε τα παραπάνω βήματα για την προεπιλεγμένη γεννήτρια τυχαίων αριθμών της γλώσσας που χρησιμοποιείται (π.χ. MATLAB: συνάρτηση rand, Mersenne Twister algorithm).

Άσκηση 7.4. Υπολογισμός του Αριθμού π – «Πείραμα της Βροχής»

Θεωρήστε τον αλγόριθμο υπολογισμού του αριθμού π που συζητήσαμε στην τάξη και ο οποίος βασίζεται στον υπολογισμό του εμβαδόν ενός κύκλου και του τετραγώνου με το οποίο τον περικλείουμε (raindrop experiment).



Σχήμα 7.8: Υπολογισμός του Αριθμού π – «Πείραμα της Βροχής»

Φτιάξτε ένα αλγόριθμο υπολογισμού του π χρησιμοποιώντας μια κατάλληλη γεννήτρια τυχαίων αριθμών. Έστω n ο αριθμός των τυχαίων σημείων μέσα στο τετράγωνο. Βρείτε και γράψτε σε μια αναφορά τα ακόλουθα:

- Περιγράψτε λεπτομερώς τον αλγόριθμο που χρησιμοποιείτε.
- Υπολογίστε τον αριθμό π για $n = 1000, 10000, 1000000$. Για καλύτερη ακρίβεια τρέξτε το πρόγραμμα 10 φορές για κάθε n και υπολογίστε τη μέση τιμή του π . Φτιάξτε ένα διάγραμμα με όλες τις τιμές (εκτιμήσεις) του π .
- Υπολογίστε το σφάλμα των μετρήσεων χρησιμοποιώντας την ακριβή τιμή του αριθμού π ($\pi = 3.141592653589793$). Κάντε το διάγραμμα του σφάλματος της μέτρησης ως προς τον αριθμό των τυχαίων σημείων n . Εκτιμήστε πόσο μεγάλο πρέπει να είναι το n για ακρίβεια υπολογισμού του π ίση με: 3, 5, 7 σημαντικών ψηφίων.

Άσκηση 7.5. Αλγόριθμος Metropolis

Στόχος της άσκησης αυτής είναι η μελέτη αλγορίθμων Monte Carlo Μαρκοβιανών Αλυσίδων (MCMC)

τύπου Metropolis τυχαίου περιπάτου (random walk). Έστω τυχαία μεταβλητή (τ.μ.) x , η Μαρκοβιανή αλυσίδα της οποίας δίνεται από τον κανόνα μετάβασης:

$$y_i = x^{(t)} + A\epsilon_t$$

όπου $x(t)$ είναι η τιμή της τ.μ. στην επανάληψη t και y_t η προτεινόμενη τιμή στην επόμενη επανάληψη. A είναι μια σταθερά και ϵ_t μια τυχαία μεταβλητή η οποία έρχεται μέσα από μια συμμετρική κατανομή $f(\cdot)$.

Η Μαρκοβιανή αλυσίδα, που σχετίζεται με την κατανομή f , είναι τυχαίος περίπατος στη μεταβλητή ϵ και στην μεταβλητή x . Δημιουργήστε γενικό αλγόριθμο Metropolis MC της μορφής:

- Δεδομένου $x(t)$ δημιουργήστε $y_t \sim f(|y - x(t)|)$.

•

$$x^{(t+1)} = \begin{cases} y_t, & \text{με πιθανότητα } \rho(x^{(t)}, y_t) = \min \left\{ 1, \frac{f(y_t)}{f(x^{(t)})} \right\} \\ x^{(t)}, & \text{αλλιώς.} \end{cases}$$

Χρησιμοποιήστε σαν $f(\cdot)$:

- (α) Ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $[-\delta, \delta]$,
- (β) Κανονική κατανομή $N(0, 1)$ στο διάστημα $[-\delta, \delta]$.
- (γ) Εκθετική κατανομή $\text{Exp}()$, στο διάστημα $[-\delta, \delta]$, αφού πρώτα την κανονικοποιήσετε.

Σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις δ είναι μια σταθερά.

1) Περιγράψτε τον αλγόριθμο Metropolis. Βρείτε την πιθανότητα αποδοχής συναρτήσει της σταθεράς A .

2) Τρέξτε τον αλγόριθμο για διαφορετικές τιμές των σταθερών δ και A : π.χ. $(\delta = 0.5, A = 4)$, $(\delta = 1.0, A = 4)$, $(\delta = 0.5, A = 2)$, $(\delta = 0.5, A = 10)$, για τις τρεις διαφορετικές κατανομές. Υπολογίστε σε κάθε περίπτωση την κατανομή πιθανότητας της (τ.μ.) x σε μορφή ιστογράμματος.

3) Τρέξτε τον αλγόριθμο για διαφορετικές τιμές του μεγέθους της αλυσίδας (αριθμός των επαναλήψεων) n , π.χ. $n = 1000, 10000, 100000$. Υπολογίστε σε κάθε περίπτωση την κατανομή πιθανότητας της (τ.μ.) x σε μορφή ιστογράμματος.

4) Υπολογίστε τη μέση τιμή και τη διακύμανση για κάθε μια από τις παραπάνω περιπτώσεις των ερωτημάτων (2) και (3). Εξετάστε επίσης τη σύγκλιση της μέσης τιμής κάνοντας διαγράμματα μέσης τιμής, $\mu(i)$, συνάρτηση της επανάληψης i , $i = 1, 2, \dots, n$.

7.6.2 Εργασίες

Εργασία 7.1. Ταχύτητα Σύγκλισης MCMC Αλγορίθμων

Μια βασική παράμετρος σε κάθε MC αλγόριθμο είναι η ταχύτητα σύγκλισης, δηλαδή το πόσο «γρήγορα» δειγματοληπτεί από τη σωστή κατανομή. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό στους αλγορίθμους τύπου MCMC όπως Metropolis – Hastings. Μελετήστε θεωρητικά την ταχύτητα σύγκλισης των αλγορίθμων MCMC. Κατόπιν εξετάστε τις θεωρητικές προβλέψεις εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο σε ένα τυπικό παράδειγμα.

Βιβλιογραφία: (Robert, 2004; Liu, 2001).

Εργασία 7.2. Μοντέλο Lennard – Jones

Ένα κατάλληλο μοντέλο για την περιγραφή μοριακών συστημάτων, πιο ακριβές από το μοντέλο σκληρών σφαιρών, είναι το μοντέλο Lennard – Jones (LJ) (Δες Κεφάλαιο 2). Αναπτύξτε αλγόριθμο Metropolis

Monte Carlo για τη μελέτη N μορίων / σωματιδίων μέσα σε ένα κουτί τα οποία αλληλεπιδρούν με δυναμικό LJ. Μελετήστε τη συμπεριφορά των σωματιδίων και υπολογίστε την ενέργεια του συστήματος συναρτήσει του αριθμού των κινήσεων Monte Carlo.

Βιβλιογραφία: (Landau & Binder, 2009).

Εργασία 7.3. Μοντέλο Ising

Ένα κατάλληλο μοντέλο για την περιγραφή στερεών συστημάτων είναι τα μοντέλα πλέγματος τύπου Ising. Αναπτύξτε αλγόριθμο Metropolis Monte Carlo για τη μελέτη N μορίων / σωματιδίων τα οποία αλληλεπιδρούν με δυναμικό Ising.

Βιβλιογραφία: (Landau & Binder, 2009).

Εργασία 7.4. Δειγματοληψία Gibbs

Μια επέκταση των αλγορίθμων MCMC τύπου Metropolis – Hastings δίνεται μέσω τροποποιημένης δειγματοληψίας Gibbs (Gibbs Sampler ή Multi-stage Gibbs sampler). Αναπτύξτε αλγόριθμο δειγματοληψίας Gibbs Monte Carlo και δείτε τις διαφορές του σε σχέση με τον τυπικό αλγόριθμο Metropolis – Hastings.

Βιβλιογραφία: (Robert, 2004).

7.6.3 Αλγόριθμοι / Κώδικες

Κώδικας MATLAB για τη δημιουργία τυχαίων αριθμών

```
% =====
% ----- Random Number Generators (RNGs)-----
%
% This is an m-file that examines basic Random Number Generators (RNGs)
% The following cases are considered:
%
% (a) Uniform distribution in (0,1) using the Congruential Generator
% (b) Uniform distribution in (0,1) using the Mersenne Twister algorithm
% (c) Normal distribution in (0,1) using the default algorithm in Matlab
% (a) Uniform distribution in (a,b).
%
% =====

% Clears history and command window
close all; clear all;

% number of points (random numbers) to be created
n = 1000;
n = 100000;

% ----- Uniform in [0,1] -----
% -- Congruential Generator
%1o set parametwn
a=1229;
b=1;
y0=3;
M=2^11;
%2o set parametrwn
% a=65539;
```

```

% b=0;
% y0=1;
% M=2^31;

y=zeros(n,1);

for i=1:n
y(i)=mod(a*y0+b,M);
y0=y(i);
end
% x omoiomorfh sto [0 1]
x=y/M;

% plots
%--tyxaioi arithmoi
figure(1)
hold on;
title('Values of X')
plot(x,'.-g')
xlabel('Iterations');
ylabel('Random numbers');
hold off;
%--istogramma pithanothta
figure(2)
hist(x,100);
title('Histogram of X')
ylabel('Frequency')
xlabel('Numbers')
%-- sysxetish
figure(3)
plot(y(1:end-2),y(2:end-1),'.b');
title('Sysxetish metaxy 2 diadoxikwn arithmwn ths Y')
xlabel('x_{2k}');
ylabel('x_{2k-1}');

% -- Mersenne Twister (defalut, "rand" function, in Matlab)
y = rand(1,n);
figure(4);
hist(y,100);
title('"n" Random Numbers: Uniform');
%-- sysxetish
figure(5)
plot(y(1:end-2),y(2:end-1),'.b');
title('Sysxetish metaxy 2 diadoxikwn arithmwn ths Y')
xlabel('x_{2k}');
ylabel('x_{2k-1}');

% ----- Normal [0,1] -----
y1 = randn(1,n);

```

```
figure(6);
hist(y1,200);
title('n" Random Numbers: Normal');

% ----- Uniform in [a, b] -----
% The following code demonstrates a method for generating
% random numbers between (a) and (b).
% The round function is used to round the number to the closest
% whole number.
a = 0;
b = 20;
y2 = round(a + (b-a) * rand(1,n));
figure(7);
hist(y2);
title('n" Random Numbers: Normal between "a" and "b"');
```

Κώδικας MATLAB για το «Πείραμα της Βροχής»

```
% =====
% ----- Raindrop Experiment - Computation of Number pi -----
%
% This is an m-file that performs the raindrop experiment in order to
% compute the number pi.
%
% =====

% Clears history and command window
close all; clear all;

% number of points to be created
m=10000;
% m=10;
% creation of
x=rand(1,m);
y=rand(size(x));
%x(5)=0.5;
%y(5)=0;
theta=linspace(0,2*pi);
xc=0.5*cos(theta)+0.5;
yc=0.5*sin(theta)+0.5;
in = inpolygon(x,y,xc,yc);
s=sum(in);
P=4*s/m;

plot(xc,yc,x(in),y(in),'.b',x(~in),y(~in),'.r')
%h=title(['pi approximation = ',num2str(P)]);
xlabel(['m = ',num2str(m)])
axis equal
```

```
disp([P,abs(P-pi)])
disp(['m = ',num2str(m)])
```

Πρότυπο (template) κώδικα MATLAB ανάπτυξης Αλγορίθμου Metropolis

```
% =====
% ----- Metropolis Monte Carlo -----
%
% This is an m-file that can be used as a template to develop Metropolis
% Monte Carlo algorithm for a system.
%
% =====

% Clears history and command window
close all; clear all;

% Parameters, Initialization of variables
n = ...;
delta = ...;
mu = ...;
sigma = ...;
x = zeros(1,n);
x(1)= ...;

% Main loop
for i=2:n

% Step 1: create proposal from a transition rule
epsilon = ...;
y = ...;

% Step 2: calculate  $r = \min[1, \pi(y)/\pi(x)]$ 
r = ...;
r = min(r,1);

% Step 3: accept or reject proposal
u = rand(1);
if u <= r % accept y
    x(i) = ...;
else % reject y
    x(i) = ...;
end
end

% Plot data
figure(1)
hist(x);
xlabel('this is a test: change label');
ylabel('this is a test: change label');
```

Βιβλιογραφία

- Gardiner, C. (2009). *Stochastic methods: A handbook for the natural and social sciences*. New York: Springer.
- Landau, D. P., & Binder, K. (2009). *A guide to monte carlo simulations in statistical physics*. New York, Cambridge: Cambridge University Press.
- Liu, J. (2001). *Monte carlo strategies in scientific computing*. New York: Springer.
- Robert, C. (2004). *Monte carlo statistical methods*. New York: Springer.

Παράρτημα Α΄

Βασικά μαθηματικά εργαλεία

Σύνοψη

Παρατίθενται μια επανάληψη σε βασικές γνώσεις που αφορούν βασικά μαθηματικά εργαλεία, για την αντιμετώπιση προβλημάτων που παρουσιάζονται στο σύγγραμμα, και πιο συγκεκριμένα τα εξής: (α) Διανύσματα, (β) Γραμμική άλγεβρα, (γ) Διαφορικές εξισώσεις, και (δ) Πιθανότητες.

Προαπαιτούμενη γνώση

- Αναλυτική Γεωμετρία: διανύσματα.
- Γραμμική άλγεβρα: πίνακες.
- Απειροστικός λογισμός: παράγωγος συνάρτησης.
- Σύνολα.

Α'.1 Διανύσματα

Α'.1.1 Εσωτερικό γινόμενο

Θεωρούμε δύο διανύσματα $\mathbf{a} = a_1\hat{\mathbf{i}} + a_2\hat{\mathbf{j}} + a_3\hat{\mathbf{k}}$ και $\mathbf{b} = b_1\hat{\mathbf{i}} + b_2\hat{\mathbf{j}} + b_3\hat{\mathbf{k}}$.

Ορισμός. Το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων \mathbf{a}, \mathbf{b} ορίζεται ως

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos \theta \quad (\text{Α'.1})$$

όπου θ η γωνία μεταξύ των διανυσμάτων. Το εσωτερικό γινόμενο λέγεται και βαθμωτό γινόμενο. \square

Το εσωτερικό γινόμενο μπορεί να υπολογιστεί αν γνωρίζουμε τις συνιστώσες των διανυσμάτων ως

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z. \quad (\text{Α'.2})$$

Έχουμε τις ιδιότητες:

- $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$
- $(c\mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} = c(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}), \quad c \in \mathbb{R}$
- $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}$

Παρατήρηση Α'.1. Το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων \mathbf{a}, \mathbf{b} είναι ίσο με μηδέν όταν αυτά είναι κάθετα μεταξύ τους είτε όταν ένα διάνυσμα είναι ίσο με το μηδενικό διάνυσμα.

Α'.1.2 Εξωτερικό γινόμενο διανυσμάτων

Ορισμός. Το εξωτερικό γινόμενο μεταξύ δύο διανυσμάτων \mathbf{a}, \mathbf{b} συμβολίζεται ως

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$$

και ορίζεται ως διάνυσμα με διεύθυνση κάθετη στα \mathbf{a} και \mathbf{b} έτσι ώστε τα $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{a} \times \mathbf{b})$ να σχηματίζουν ένα δεξιόστροφο σύστημα. Το μέτρο του είναι $|\mathbf{a} \times \mathbf{b}| = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \sin \theta$, όπου θ η γωνία μεταξύ των \mathbf{a} και \mathbf{b} . \square

Χρησιμοποιώντας τις συνιστώσες των διανυσμάτων το εξωτερικό γινόμενο δίνεται ως

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_y b_z - a_z b_y)\hat{\mathbf{i}} + (a_z b_x - a_x b_z)\hat{\mathbf{j}} + (a_x b_y - a_y b_x)\hat{\mathbf{k}}. \quad (\text{Α'.3})$$

Παρατήρηση Α'.2. Το εξωτερικό γινόμενο διανυσμάτων δίνεται με τη μορφή ορίζουσας ως

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{i}} & \hat{\mathbf{j}} & \hat{\mathbf{k}} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix}. \quad (\text{Α'.4})$$

Από τις ιδιότητες των οριζουσών συνάγονται οι ιδιότητες του εξωτερικού γινομένου:

- $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = -\mathbf{b} \times \mathbf{a}$
- $\mathbf{a} \times \mathbf{a} = \mathbf{0}$
- $\mathbf{a} \times (\beta\mathbf{b} + \gamma\mathbf{c}) = \beta(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) + \gamma(\mathbf{a} \times \mathbf{c}), \quad \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}.$

Παρατήρηση Α'.3. Το εξωτερικό γινόμενο δεν έχει τη μεταθετική ιδιότητα.

Παράδειγμα Α'.1. (Τριπλό γινόμενο ή μικτό γινόμενο) Ας θεωρήσουμε τον συνδυασμό των διανυσμάτων $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$:

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}).$$

Παρατηρούμε ότι $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ είναι διάνυσμα, και άρα έχουμε το (βαθμωτό) εσωτερικό γινόμενο των δύο διανυσμάτων \mathbf{a} και $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$, ώστε το αποτέλεσμα είναι πραγματικός αριθμός. Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) &= (a_1 \hat{\mathbf{i}} + a_2 \hat{\mathbf{j}} + a_3 \hat{\mathbf{k}}) \cdot \left(\hat{\mathbf{i}} \begin{vmatrix} b_2 & b_3 \\ c_2 & c_3 \end{vmatrix} - \hat{\mathbf{j}} \begin{vmatrix} b_1 & b_3 \\ c_1 & c_3 \end{vmatrix} + \hat{\mathbf{k}} \begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ c_1 & c_2 \end{vmatrix} \right) = \\ &= a_1 \begin{vmatrix} b_2 & b_3 \\ c_2 & c_3 \end{vmatrix} - a_2 \begin{vmatrix} b_1 & b_3 \\ c_1 & c_3 \end{vmatrix} + a_3 \begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ c_1 & c_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

□

Παράδειγμα Α'.2. Σώμα μάζας m κινείται γύρω από ένα κέντρο O με ταχύτητα \mathbf{v} . Αν $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ είναι η ορμή του, η στροφορμή του ορίζεται ως

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v}.$$

Για παράδειγμα, αν η κίνηση είναι κυκλική το μέτρο της στροφορμής είναι $l = mvr$. Ο ρυθμός μεταβολής της στροφορμής είναι

$$\frac{d\mathbf{l}}{dt} = \frac{d}{dt}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{v} \times (m\mathbf{v}) + \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{r} \times \mathbf{F},$$

όπου \mathbf{F} είναι η δύναμη και το $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$ λέγεται ροπή της δύναμης.

□

Σύντομο πρόβλημα Α'.1. Αν τα διανύσματα $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ικανοποιούν την ισότητα $\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c} = 0$, να δείξετε ότι

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \mathbf{b} \times \mathbf{c}.$$

Α'.2 Γραμμική Άλγεβρα – Ιδιοτιμές και Ιδιοδιανύσματα Πινάκων

Παρακάτω δίνουμε μια συνοπτική παρουσίαση βασικών εννοιών της γραμμικής άλγεβρας (Strang, 2001).

Α'.2.1 Το πρόβλημα των ιδιοτιμών

Θεωρούμε πίνακα \mathbf{A} ο οποίος είναι $n \times n$. Θα μελετήσουμε την εξίσωση

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}, \quad \lambda \in \mathbb{R} \tag{Α'.5}$$

η οποία γράφεται επίσης

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = 0, \tag{Α'.6}$$

και είναι ισοδύναμη με ένα σύστημα ομογενών εξισώσεων. Αν $\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) \neq 0$ τότε το σύστημα έχει μοναδική λύση $\mathbf{x} = 0$.

Παρατήρηση Α'.4. Το σύστημα (Α'.6) έχει μη-μηδενικές λύσεις αν και μόνο αν $|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}| = 0$. Η εξίσωση $|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}| = 0$ λέγεται **χαρακτηριστική εξίσωση** για τον \mathbf{A} .

Ορισμός. Οι αριθμοί λ λέγονται **ιδιοτιμές** του πίνακα.

□

Παράδειγμα Α'.3. Βρείτε τις ιδιοτιμές του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -3 & 0 \end{bmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές λ ικανοποιούν την

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 4 - \lambda & 1 \\ -3 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (4 - \lambda)(-\lambda) + 3 = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 4\lambda + 3 = 0 \Rightarrow \lambda = 1, \text{ και } 3.$$

□

Α'.2.2 Ιδιοδιανύσματα

Για κάθε ιδιοτιμή λ_k έχουμε μία εξίσωση

$$A\mathbf{v}_k = \lambda_k \mathbf{v}_k. \quad (A'.7)$$

Ορισμός. Τα \mathbf{v}_k τα οποία αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές λ_k λέγονται **ιδιοδιανύσματα** του πίνακα. □

Παράδειγμα Α'.4. Βρείτε τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα του προηγούμενου παραδείγματος.

Επίλυση.

$$(A - \lambda I)\mathbf{x} = 0 \Rightarrow \begin{cases} (4 - \lambda)x_1 + x_2 & = 0 \\ -3x_1 - \lambda x_2 & = 0 \end{cases}$$

Πρέπει να λύσουμε το σύστημα που προκύπτει για κάθε ιδιοτιμή λ .

Έστω $\lambda = 1$:

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 & = 0 \\ -3x_1 - x_2 & = 0 \end{cases} \Rightarrow 3x_1 + x_2 = 0 \Rightarrow x_2 = -3x_1.$$

Έστω $\lambda = 3$:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 & = 0 \\ -3x_1 - 3x_2 & = 0 \end{cases} \Rightarrow x_1 + x_2 = 0 \Rightarrow x_2 = -x_1.$$

Τα δύο ιδιοδιανύσματα είναι

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

□

Στο παράδειγμα παρατηρούμε ότι:

- Το σύστημα εξισώσεων για τα ιδιοδιανύσματα έχει άπειρες λύσεις.
- Ως ιδιοδιανύσματα, για κάθε ιδιοτιμή, μπορούμε να πάρουμε οποιοδήποτε από τα παράλληλα διανύσματα που προκύπτουν.
- Τα δύο ιδιοδιανύσματα για τις δύο διαφορετικές ιδιοτιμές δεν είναι παράλληλα (είναι γραμμικά ανεξάρτητα).

Λήμμα. Όταν έχουμε n διακριτές ιδιοτιμές τότε έχουμε n αντίστοιχα γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα.

Παράδειγμα Α'.5. (Πολλαπλές ιδιοτιμές) Βρείτε ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

Επίλυση. Χαρακτηριστική εξίσωση

$$|A - \lambda I| = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} 3 - \lambda & 2 & 4 \\ 2 & -\lambda & 2 \\ 4 & 2 & 3 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (\lambda + 1)^2(\lambda - 8) = 0.$$

Οι τρεις ιδιοτιμές $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ είναι (μία διπλή και μία απλή):

$$\lambda_1 = \lambda_2 = -1, \quad \lambda_3 = 8.$$

Τα ιδιοδιανύσματα για $\lambda = \lambda_1, \lambda_2$ προκύπτουν από το σύστημα $A - \lambda I = 0$. Ο πίνακας $A - \lambda I$ γίνεται τριγωνικός, π.χ., με τη μέθοδο απαλοιφής Gauss:

$$A - \lambda I = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 4 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Λύσεις του συστήματος $x_1 = -(1/2)x_2 - x_3$. Αν θέσουμε $x_2 = \kappa, x_3 = \mu$ τότε έχουμε ιδιοδιανύσματα

$$\begin{bmatrix} -\kappa/2 - \mu \\ \kappa \\ \mu \end{bmatrix} = \kappa \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \kappa, \mu \in \mathbb{R}.$$

Στη διπλή ιδιοτιμή αντιστοιχούν δύο γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα

$$v_1 = \kappa \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \mu \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Το ιδιοδιάνυσμα για $\lambda = \lambda_3$ προκύπτει από το σύστημα $A - \lambda I = 0$ για το οποίο

$$A - \lambda I = \begin{bmatrix} -5 & 2 & 4 \\ 2 & -8 & 2 \\ 4 & 2 & -5 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Λύσεις του συστήματος $x_1 = x_3, x_2 = (1/2)x_3$. Αν θέσουμε $x_3 = \nu$ τότε έχουμε ιδιοδιάνυσμα

$$v_3 = \nu \begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \nu \in \mathbb{R}.$$

□

Σύντομο πρόβλημα Α'.2. (α) Βρείτε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

(β) Δείξτε ότι τα ιδιοδιανύσματα είναι ορθογώνια μεταξύ τους. (γ) Γράψτε τον πίνακα των ιδιοδιανυσμάτων X , τον X^{-1} και τον D και δείξτε (με υπολογισμό) ότι $X^{-1}AX = D$.

Α'.2.3 Ιδιότητες ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων

- Αν ιδιοδιάνυσμα x αντιστοιχεί σε ιδιοτιμή λ τότε κάθε διάνυσμα $y = \kappa x$, $\kappa \in \mathbb{R}$ επίσης αντιστοιχεί στην ίδια ιδιοτιμή λ :

$$Ax = \lambda x \Rightarrow Ay = A(\kappa x) = \kappa(Ax) = \kappa(\lambda x) = \lambda y. \quad (A'.8)$$

- Το άθροισμα των ιδιοτιμών πίνακα A ισούται με το άθροισμα των στοιχείων της διαγωνίου του (δηλαδή του ίχνους του πίνακα $\text{Tr}A$).
- Το γινόμενο των ιδιοτιμών πίνακα ισούται με την ορίζουσά του $\det A$.
- Οι ιδιοτιμές ενός άνω ή κάτω τριγωνικού πίνακα είναι τα στοιχεία της διαγωνίου του.
- Αν ο A είναι συμμετρικός ($A = A^T$) τότε τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι ορθογώνια. Αυτά που αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή είτε είναι ορθογώνια είναι μπορούμε να τα κάνουμε ορθογώνια.

Α'.2.4 Διαγωνιοποίηση πινάκων

Έστω A πίνακας $n \times n$ με ιδιοτιμές λ_k και ιδιοδιανύσματα x_k . Φτιάχνουμε τον πίνακα με στήλες τα ιδιοδιανύσματα

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nn} \end{bmatrix} \quad (A'.9)$$

Ισχύει

$$AX = (Ax_1 \ Ax_2 \ \dots \ Ax_n) = (\lambda_1 x_1 \ \lambda_2 x_2 \ \dots \ \lambda_n x_n) = XD \quad (A'.10)$$

όπου έχουμε τον διαγώνιο πίνακα

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}. \quad (A'.11)$$

Αν υπάρχει ο αντίστροφος του X τότε πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με X^{-1} :

$$D = X^{-1}AX, \quad (A'.12)$$

ώστε ο A έρχεται σε διαγώνια μορφή.

Παράδειγμα Α'.6. Να εξεταστεί αν είναι διαγωνιοποιήσιμος ο πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -3 & 0 \end{bmatrix}.$$

Επίλυση. Έχουμε δει ότι οι ιδιοτιμές είναι $\lambda = 1, 3$ και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα

$$\begin{bmatrix} 1 \\ -3 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Ο A διαγωνιοποιείται από τον

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -3 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{με αντίστροφο} \quad X^{-1} = \begin{bmatrix} -1/2 & -1/2 \\ 3/2 & 1/2 \end{bmatrix}.$$

Είναι

$$X^{-1}AX = \begin{bmatrix} -1/2 & -1/2 \\ 3/2 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -3 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

□

Παράδειγμα Α'.7. Να εξεταστεί αν είναι διαγωνιοποιήσιμος ο

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Επίλυση. Χαρακτηριστική εξίσωση

$$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 \\ -1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0 \Rightarrow (\lambda - 1)^2 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = 1.$$

Ιδιοδιανύσματα

$$\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = -x_1 \quad \text{ιδιοδιάνυσμα} \quad \kappa \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Υπάρχει μόνο ένα ιδιοδιάνυσμα, άρα ο \mathbf{A} δεν διαγωνιοποιείται.

□

Παράδειγμα Α'.8. Να εξεταστεί αν είναι διαγωνιοποιήσιμος ο

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Επίλυση. Χαρακτηριστική εξίσωση

$$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = 0 \Rightarrow \lambda^2 + 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = i, \lambda_2 = -i.$$

Για $\lambda = \lambda_1 = i$

$$\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I} = \begin{bmatrix} -i & 1 \\ -1 & -i \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = ix_1, \quad \text{ιδιοδιάνυσμα} \quad \kappa \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \quad \kappa \in \mathbb{R}.$$

Για $\lambda = \lambda_2 = -i$

$$\mathbf{A} - \lambda_2 \mathbf{I} = \begin{bmatrix} i & 1 \\ -1 & i \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -i \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = -ix_1, \quad \text{ιδιοδιάνυσμα} \quad \kappa \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}, \quad \kappa \in \mathbb{R}.$$

Έχουμε δύο γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα, άρα ο \mathbf{A} είναι διαγωνιοποιήσιμος με τον πίνακα

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/2 & -i/2 \\ 1/2 & i/2 \end{bmatrix}$$

και ισχύει

$$\mathbf{X}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1/2 & -i/2 \\ 1/2 & i/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

□

Σύντομο πρόβλημα Α'.3. Βρείτε έναν τύπο για να υπολογίσετε τη δύναμη \mathbf{A}^n τετραγωνικού διαγωνιοποιήσιμου πίνακα \mathbf{A} .

Α'.2.5 Λύσεις συστημάτων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης με σταθερούς συντελεστές

Η γενική μορφή ομογενούς συστήματος n διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξεως με σταθερούς συντελεστές είναι (Αλικάκος & Καλογερόπουλος, 2003):

$$\begin{aligned} y_1' &= a_{11}y_1 + a_{12}y_2 + \dots + a_{1n}y_n \\ y_2' &= a_{21}y_1 + a_{22}y_2 + \dots + a_{2n}y_n \\ &\vdots \\ y_n' &= a_{n1}y_1 + a_{n2}y_2 + \dots + a_{nn}y_n, \end{aligned} \quad (\text{Α'.13})$$

όπου a_{ij} , $i, j = 1, \dots, n$ είναι σταθερές και $y_i = y_i(x)$ είναι οι μεταβλητές. Το σύστημα με τη βοήθεια πινάκων ως

$$\mathbf{Y}' = \mathbf{A}\mathbf{Y}. \quad (\text{Α'.14})$$

όπου

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad (\text{Α'.15})$$

Οι λύσεις είναι της μορφής

$$\mathbf{Y} = \mathbf{a}e^{\lambda x} \quad (\text{Α'.16})$$

όπου \mathbf{a} είναι ένας σταθερός πίνακας στήλη. Έχουμε $\mathbf{Y}' = \lambda \mathbf{a} e^{\lambda x}$ την οποία αντικαθιστούμε στην εξίσωση και παίρνουμε

$$\lambda \mathbf{a} e^{\lambda x} = \mathbf{A} \mathbf{a} e^{\lambda x} \Rightarrow \lambda \mathbf{a} = \mathbf{A} \mathbf{a}. \quad (\text{Α'.17})$$

Η λύση αυτή είναι μη-τετριμμένη (μη-μηδενική) αν $\lambda = \lambda_1, \dots, \lambda_n$ είναι οι ιδιοτιμές και $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ είναι τα ιδιοδιανύσματα του \mathbf{A} .

Παρατήρηση Α'.5. Η γενική λύση του συστήματος είναι ο γραμμικός συνδυασμός των λύσεων που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές. Αν θέσουμε $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1 \ \dots \ \mathbf{x}_n]$ τον πίνακα που έχει στήλες τα ιδιοδιανύσματα τότε η γενική λύση γράφεται ως

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} c_1 e^{\lambda_1 x} \\ \vdots \\ c_n e^{\lambda_n x} \end{bmatrix}. \quad (\text{Α'.18})$$

Παράδειγμα Α'.9. Βρείτε τη γενική λύση του συστήματος

$$\begin{aligned} y_1' &= 3y_1 + y_2 \\ y_2' &= y_1 + 3y_2 \end{aligned}$$

Επίλυση. Πίνακας συστήματος

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{με ιδιοτιμές } \lambda = 2, 4.$$

Τα ιδιοδιανύσματα και οι αντίστοιχες λύσεις είναι

$$\begin{aligned} \lambda_1 = 2, \quad \mathbf{a}_1 &= c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \mathbf{a}_1 e^{2x} \Rightarrow \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} e^{2x} \\ -e^{2x} \end{bmatrix} \\ \lambda_2 = 4, \quad \mathbf{a}_2 &= c_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \mathbf{a}_2 e^{4x} \Rightarrow \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = c_2 \begin{bmatrix} e^{4x} \\ e^{4x} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Η γενική λύση του συστήματος είναι ο γραμμικός συνδυασμός των δύο παραπάνω λύσεων

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 e^{2x} + c_2 e^{4x} \\ -c_1 e^{2x} + c_2 e^{4x} \end{bmatrix}.$$

□

Α'.3 Πιθανότητες

Παρουσιάζουμε εδώ βασικές έννοιες πιθανοτήτων, η γνώση των οποίων είναι απαραίτητη για στοχαστικά μοντέλα. Στόχος είναι η μοντελοποίηση μη-ντετερμινιστικών φαινομένων. Αρχικά θα δώσουμε κάποιους βασικούς ορισμούς (Hoel, Port, & Stone, 2011).

Α'.3.1 Βασικοί Ορισμοί – Ιδιότητες

Ορισμός. Χώρος Δείγματος (sample space), Ω : Το σύνολο όλων των πιθανών αποτελεσμάτων από ένα πείραμα. □

Ορισμός. Γεγονός (event), A με $A \subset \Omega$: ένα σύνολο αποτελεσμάτων, υποσύνολο του Ω . □

Ορισμός. $P(A \cup B \cup \Gamma \dots)$: η πιθανότητα ένα τουλάχιστον, εκ των $, , \Gamma, \dots$, γεγονότων να συμβεί. □

Ορισμός. $P(A \cap B \cap \Gamma \dots)$: η πιθανότητα όλα τα γεγονότα $, , \Gamma, \dots$, να συμβούν. □

Επίσης δίνουμε τα παρακάτω αξιώματα:

- $P(\emptyset) = 0$, η πιθανότητα δηλαδή να συμβεί το κενό σύνολο είναι μηδέν.
- $P(\Omega) = 1$, η πιθανότητα δηλαδή να συμβεί ένα από τα πιθανά αποτελέσματα είναι μονάδα.
- Αν $A \subset \Omega$ τότε $P(A) \geq 0$.
- Για ασυσχέτιστα (uncorrelated) γεγονότα: $P(A_i \cap A_j) = 0$ για κάθε $i \neq j$.
- Για ανεξάρτητα (independent), A, B , γεγονότα: $P(A \cap B) = P(A)P(B)$

Τέλος τονίζουμε και τις παρακάτω ιδιότητες:

- $P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$
- $P(A^C) = 1 - P(A)$, όπου $P(A^C)$ είναι η συμπληρωματική πιθανότητα του γεγονότος.

Ορισμός. Υπό συνθήκη πιθανότητα (conditional probability) ορίζεται ως η πιθανότητα να συμβεί ένα γεγονός δεδομένου ενός άλλου και δίνεται από την

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

□

Α'.3.2 Τυχαίες Μεταβλητές

Εδώ παρουσιάζουμε βασικές έννοιες που αφορούν τυχαίες μεταβλητές.

Ορισμός. Τυχαία Μεταβλητή (random variable): Ως τυχαία μεταβλητή (τ.μ.) ορίζουμε μια αντιστοίχιση (mapping) από το χώρο όλων των πιθανών γεγονότων Ω , στο πραγματικό χώρο \mathbb{R} . □

Παράδειγμα Α'.10. Έστω ότι ρίχνουμε ένα κέρμα 10 φορές. Ο αριθμός των φορών που ήρθε γράμματα (ή κορόνα) είναι μια τυχαία μεταβλητή. \square

Έστω μια τ.μ. X , οι τιμές της οποίας δίνονται ως x .

Ορισμός. Προσθετική συνάρτηση κατανομής (cumulative distribution function, cdf) είναι η συνάρτηση $F(x)$:

$$F(x) = P(X \leq x)$$

\square

Προσέξτε ότι: $F(-\infty) = 0$, και $F(\infty) = 1$.

Ορισμός. Αναμενόμενη Τιμή (expectation value), $E[h(x)]$, μιας συνάρτησης της τ.μ. x , έστω $h(x)$, ορίζεται ως:

(Α) Αν η X είναι συνεχής τ.μ. και η $F(x)$ παραγωγίσιμη μπορεί να οριστεί η συνάρτηση πυκνότητας, $f(x)$, ως: $f(x) = dF(x)/dx$. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε:

$$E[h(x)] = \int h(x) dF(x).$$

(Β) Αν η X είναι διακριτή τ.μ., η οποία μπορεί να πάρει γενικά τιμές $x_i, i = 1, 2, \dots$, η $F(x)$ είναι μια συνάρτηση βήματος (step function) και:

$$E[h(x)] = \sum_i P_i h(x_i).$$

Η αναμενόμενη τιμή, περιγράφεται και ως μέση τιμή της τ.μ. $E(X)$. \square

Θυμηθείτε ότι η διασπορά ορίζεται ως:

$$\text{Var}(X) = E(X^2) - E(X)^2$$

Με βάση τη συνάρτηση κατανομής, ή την αντίστοιχη συνάρτηση πυκνότητας για συνεχείς τ.μ., μπορούμε να περιγράψουμε μια κατανομή.

Παράδειγμα Α'.11. Η κανονική κατανομή, $N(\mu, \sigma^2)$, μιας συνεχούς τ.μ., περιγράφεται από την παρακάτω συνάρτηση πυκνότητας.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\}$$

όπου μ είναι η μέση τιμή και σ η διασπορά της κατανομής. Για $\mu = 0, \sigma = 1$, έχουμε την τυπική κανονική κατανομή. \square

Παράδειγμα Α'.12. Η εκθετική κατανομή, $\text{Exp}(\lambda)$, μιας συνεχούς τ.μ., περιγράφεται από την παρακάτω συνάρτηση πυκνότητας.

$$f(x) = \begin{cases} \lambda \exp(-\lambda x), & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}.$$

Για την εκθετική κατανομή $E(X) = \lambda^{-1}$, και $\text{Var}(X) = \lambda^{-2}$. \square

Παράδειγμα Α'.13. Έστω μια διακριτή τ.μ. η οποία ακολουθεί τη διωνυμική κατανομή (binomial distribution). Παράδειγμα τέτοιας τ.μ. μπορεί να είναι η πιθανότητα να φέρουμε x φορές «γράμματα» σε n ρίψεις μη-αμερόληπτου νομίσματος, το οποίο έχει πιθανότητα θ να τύχουν «γράμματα». Η διωνυμική κατανομή περιγράφεται μέσω της:

$$P(X = x) = \binom{n}{x} \theta^x (1 - \theta)^{n-x} = \frac{n!}{(n-x)!x!}$$

Όπου $x = 0, 1, \dots, n$. Για τη διωνυμική κατανομή $E(X) = n\theta$, και $\text{Var}(X) = n\theta(1 - \theta)$. \square

Τα παραπάνω παραδείγματα αφορούν μια τ.μ. Πολύ συχνά όμως το υπό μελέτη σύστημα περιγράφεται με περισσότερες από μία τ.μ.

Ορισμός. Τυχαίο διάνυσμα (random vector) η τυχαίων μεταβλητών ορίζεται ως ένα διάνυσμα τ.μ. της μορφής $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_n)$. \square

Όπως παραπάνω μπορούμε να ορίσουμε όλες τις ιδιότητες και για το διάνυσμα τ.μ. \mathbf{X} . Παράδειγμα η προσθετική συνάρτηση κατανομής σε n διαστάσεις είναι:

$$F(\mathbf{x}) = P(\cap_{i=1}^n \{X_i \leq x_i\})$$

Αν το \mathbf{X} είναι συνεχές τυχαίο διάνυσμα (ή διάνυσμα τ.μ.) τότε:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1, \partial x_2 \dots \partial x_n}$$

και η αναμενόμενη τιμή

$$E[h(\mathbf{x})] = \int h(\mathbf{x}) dF(\mathbf{x}) = \int h(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) dx_1 dx_2 \dots dx_n$$

Α'3.3 Σύγκλιση Τυχαίων Μεταβλητών

Έστω σειρά τ.μ. X_1, X_2, \dots, X_n και $F(X_1), F(X_2), \dots, F(X_n)$. Όσο αφορά τη σύγκλιση των τ.μ. είναι πολύ σημαντικά τα παρακάτω δύο θεωρήματα – νόμοι.

Νόμος των μεγάλων αριθμών (law of large numbers): Αν x_1, x_2, \dots, x_n , είναι μια σειρά n ανεξάρτητων τιμών μιας τυχαίας μεταβλητής X , με μέση τιμή μ και διασπορά σ^2 , τότε η μέση τιμή του δείγματος \bar{x} συγκλίνει στη μέση τιμή μ :

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} \rightarrow \mu$$

σχεδόν σίγουρα (ισχυρός νόμος των μεγάλων αριθμών) ή με πιθανότητα (ασθενής νόμος των μεγάλων αριθμών).

Κεντρικό οριακό θεώρημα (central limit theorem): Αν x_1, x_2, \dots, x_n , είναι μια σειρά n ανεξάρτητων τιμών μιας τυχαίας μεταβλητής X , με μέση τιμή μ και διασπορά σ^2 και αν ορίσουμε τη μέση τιμή του δείγματος

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}$$

τότε:

$$\frac{\sqrt{n}(\bar{x} - \mu)}{\sigma} \rightarrow (0, 1).$$

Δηλαδή πρακτικά η κατανομή των n τιμών της X , όσο το n αυξάνει «πλησιάζει» όλο και περισσότερο την κανονική κατανομή.

Τα παραπάνω δύο θεωρήματα είναι ιδιαίτερα σημαντικά καθώς μας διασφαλίζουν ότι όσο μεγαλώνει η σειρά ανεξάρτητων τιμών μιας τ.μ. η μέση τιμή του δείγματος πλησιάζει την πραγματική μέση τιμή της τ.μ.

Βιβλιογραφία

- Hoel, P. G., Port, S. C., & Stone, C. J. (2011). *Εισαγωγή στη Θεωρία Πιθανοτήτων*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Strang, G. (2001). *Γραμμική Άλγεβρα και Εφαρμογές*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Αλικάκος, Ν. Δ., & Καλογερόπουλος, Γ. Η. (2003). *Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις*. Αθήνα: Σύγχρονη Εποχή.

Λεξικό Αγγλικών Όρων

| | |
|----------------------------------|---------------------------------|
| Bifurcation diagram | Διάγραμμα διακλαδώσεων. |
| Center | Κέντρο. |
| Congruential generator | Συμβατική γεννήτρια. |
| Cumulative distribution function | Προσθετική συνάρτηση κατανομής. |
| Cyclotron frequency | Συχνότητα κυκλότρου. |
| Difference equations | Εξισώσεις διαφορών. |
| Dimensional analysis | Διαστατική ανάλυση. |
| Equilibrium value | Τιμή ισορροπίας. |
| Expectation value | Αναμενόμενη τιμή. |
| First variation | Πρώτη μεταβολή. |
| Fixed point | Σημείο ισορροπίας. |
| Functional | Συναρτησοειδές. |
| Generalized coordinate | Γενικευμένη συντεταγμένη. |
| Generalized momentum | Γενικευμένη ορμή. |
| Guiding center | Οδηγός κίνησης. |
| Hamiltonian | Χαμιλτονιανή. |
| Harvesting | Συγκομιδή. |
| Initial value problem | Πρόβλημα αρχικών τιμών. |
| Lagrangian | Λαγκρανζιανή. |
| Logistic growth | Λογιστική ανάπτυξη. |
| Logistic model | Λογιστικό μοντέλο. |
| Markovian Chain | Μαρκοβιανή αλυσίδα. |
| Mathematical model | Μαθηματικό Μοντέλο. |
| Mathematical modeling | Μαθηματική Μοντελοποίηση. |
| Mutualism/Symbiosis | Συμβίωση. |
| Node | Κόμβος. |
| Non-linear regression | Μη-γραμμική προσαρμογή. |

| | |
|------------------------------|--------------------------------|
| Numerical simulation | Αριθμητική προσομοίωση. |
| Perturbation methods | Μέθοδοι διαταραχών. |
| Phase diagram | Διάγραμμα φάσεων. |
| Phase space | Χώρος φάσεων. |
| Population models | Πληθυσμιακά μοντέλα. |
| Predator-Prey | Θηρευτής-Θήραμα. |
| Raindrop experiment | Πείραμα σταγόνων βροχής. |
| Random number generator | Γεννήτρια τυχαίων αριθμών. |
| Rationalisation | Αδιαστατοποίηση. |
| Reaction rate | Ρυθμός αντίδρασης. |
| Rejection sampling algorithm | Αλγόριθμος αποδοχής-απόρριψης. |
| Saddle point | Σαγματικό σημείο. |
| Spiral point | Σπειροειδές σημείο ή Εστία. |
| Stochastic processes | Στοχαστικές διεργασίες. |
| Transition matrix/kernel | Πίνακας/Πυρήνας μετάβασης. |
| Vortex | Δίνη. |
| Vorticity | Στροβιλότητα. |

Ευρετήριο

- Euler-Lagrange, εξισώσεις, 30, 31, 33, 34, 36, 37, 43
- Hamilton, αρχή, 30
- Hamilton, αρχή του, 30, 31
- Hamilton, εξισώσεις, 39, 40
- Lennard-Jones, δυναμικό, 26
- Αλγόριθμος Metropolis, 165
- Ανταγωνισμός, 128, 134
- Απλό εκκρεμές, 25, 63
- Αρμονικός ταλαντωτής, 24, 36, 38
- Γενικευμένες δυνάμεις, 35, 36
- Γενικευμένες συντεταγμένες, 29, 31, 33, 36, 37
- Δίνες, 86
- Διάγραμμα φάσεων, 52
- Διαγραμμένοι, 140
- Διακριτά μοντέλα ανταγωνισμού, 138
- Διακριτά μοντέλα θηράματος-θηρευτή, 136
- Διακριτά μοντέλα συμβίωσης, 139
- Δυναμική ενέργεια, 22
- Επιδημιολογικό μοντέλο, 140, 142
- Εστία, 58, 59, 61, 63
- Ευπαθείς, 140
- Θηρευτής-Θήραμα, 128
- Κέντρο, 59, 61, 63
- Κανονική Κατανομή, 161
- Κινητική ενέργεια, 22
- Κυκλοειδής κίνηση, 79
- Κόμβος, 55, 56, 61, 63
- Λαγκρανζιανή, 30, 31, 35, 41, 80, 97
- Λογισμός μεταβολών, 40
- Μαθηματική Μοντελοποίηση, 8
- Μαθηματικό Μοντέλο, 8
- Μαρκοβιανή Αλυσίδα, 163, 164
- Μολυσμένοι, 140
- Μοντέλα Επιδημιών, 139
- Μοντέλα ανταγωνισμού, 134
- Μοντέλα συμβίωσης, 135
- Μοντέλο θηράματος-θηρευτή, 128
- Ντετερμινιστικό χάος, 153
- Οδηγός κίνησης, 76, 83, 89, 90
- Ομοιόμορφη Κατανομή, 157
- Πίνακας Μετάβασης, 164
- Πολικές συντεταγμένες, 19, 25, 29, 30
- Σαγματικό σημείο, 53, 55, 61–63
- Σημεία ισορροπίας, 50, 52, 61, 64
- Σημεία ισορροπίας, ευστάθεια, 61
- Σταγόνων βροχής, πείραμα, 154
- Συμβίωση, 128, 135
- Συχνότητα κυκλότρου, 75
- Τυχαίες Διεργασίες, 153
- Χαμιλτονιανή, 39, 40, 81, 96
- Χώρος φάσεων, 50