

منشورات جامعة دمشق

كلية العلوم

الفيزياء الحاسوبية

الدكتور

مصطفى صائم الدهر

مدرس في قسم الفيزياء

مديرية الكتب والمطبوعات الجامعية

1429هـ-2008م

لطلاب السنة الثالثة

قسم الفيزياء



الفيزياء الحاسوبية



منشورات جامعة دمشق
كلية العلوم

الفيزياء الحاسوبية

الدكتور

مصطفى صائم الدهر
مدرس في قسم الفيزياء

١٤٢٩-١٤٣٠ هـ
٢٠٠٨-٢٠٠٩ م

جامعة دمشق





منشورات جامعة دمشق
كلية العلوم

الفيزياء الحاسوبية

الدكتور

مصطفى صائم الدهر

مدرس في قسم الفيزياء

١٤٢٩-١٤٣٠هـ
٢٠٠٨-٢٠٠٩م

السنة الثالثة فيزياء



الفهرس

11.....	مقدمة
---------	-------

الباب الأول

الجزء النظري

17.....	1- الفصل الأول: حل المعادلات غير الخطية.....
17.....	1: مقدمة.....
18.....	2: طريقة المنصف.....
20.....	3: طريقة القاطع.....
22.....	4 : طريقة نيوتن رافسون.....
25.....	5: طريقة التكرار المباشر.....
29.....	6: طريقة مولر.....
33.....	7: حل جمل المعادلات غير الخطية.....
34.....	8: تطبيقات من الفيزياء.....
40.....	9: مسائل و تطبيقات.....

47	2- الفصل الثاني: طرق الإستقراء و التقريب
47	1 : طريقة لاغرانج
49	2 : المنحنيات التكميلية
52	3 : طريقة أصغر المربعات
62	4 : مسائل و تطبيقات
67	3- الفصل الثالث: التفاضل و التكامل العدديان
67	1 : التفاضل العددي
69	2 : التكامل العددي
71	3 : التكاملات المتعددة الأبعاد
73	4 : طريقة مونتي كارلو
74	5 : تطبيقات من الفيزياء
76	6: مسائل و تطبيقات
81	4- الفصل الرابع: حل المعادلات التفاضلية
81	1 : المعادلات التفاضلية العادية
89	2 : مسائل القيم الخاصة
94	3 : معادلة شرودنغر التابعة للزمن
95	4 : طريقة هارثري فوك
97	5 : المعادلات التفاضلية الجزئية
106	6 : مسائل و تطبيقات

111.....	5- الفصل الخامس: تحويلات فورييه و تطبيقاتها.
112.....	1 : سلسلة فورييه.
116.....	2: تحويلات فورييه.
120.....	3: خواص تحويلات فورييه.
129.....	4: الالتفاف و الترابط.
138.....	5: تحويل فورييه المتقطع.
140.....	6: تحويل فورييه السريع.
142.....	7: تابع غرين.
149.....	6- الفصل السادس : تطبيقات من الفيزياء الإحصائية.
150.....	1: بعض النماذج و الكمونات.
154.....	2: طرق المحاكاة.
155.....	2-1: طريقة مونتي كارلو.
165.....	2-2: طريقة التحريك الجزيئي.

الباب الثاني

الجزء العملي

173.....	1- الفصل الأول: مقدمة في الفورتران.
173.....	1: مقدمة.
174.....	2: بعض التعاريف.

178.....	3: كيفية كتابة العمليات الحسابية.
179.....	4 : كيفية كتابة برامج الفورتران
181.....	5: العمليات المنطقية في الفورتران.
182.....	6: التوابع الرياضية في الفورتران.
182.....	7: علاقات التحكم و الحلقات
186.....	8: كيفية كتابة المصفوفات في الفورتران.
188.....	9: حلقات Do
191.....	10: البرامج الجزئية.
195.....	11: ملاحظات حول كتابة البرامج.
202.....	12: تمارين
205.....	2- الفصل الثاني: تطبيقات على المعادلات غير الخطية.
205.....	1: طريقة المنصف.
208.....	2: طريقة القاطع.
209.....	3 : طريقة نيوتن رافسون.
212.....	4: تطبيقات من الفيزياء.
217.....	3- الفصل الثالث: تطبيقات على طرق الاستقراء و التقريب.
217.....	1 : المنحنيات التكميلية.
220.....	2 : طريقة أصغر المربعات.

221.....	4- الفصل الرابع: تطبيقات في التكامل العددي.
221.....	1 : التفاضل العددي.
222.....	2: التكامل العددي.
222.....	3 : طريقة مونتي كارلو.
226.....	4: تطبيقات.
231.....	5- الفصل الخامس: تطبيقات في حل المعادلات التفاضلية عددياً.
231.....	1 : حل معادلة شرودنجر باستخدام خوارزمية نيمروف.
233.....	2: القيم الخاصة لمعادلة الموجة.
235.....	3: معادلة بواسون.
239.....	4: معادلة الموجة.

الباب الثالث

تطبيقات باستخدام برنامج MathCad

245.....	الفصل الأول: مقدمة في استخدام Mathcad في حل المسائل الفيزيائية.
245.....	1: مقدمة في استخدام Mathcad.
245.....	2: كيفية استخدام Mathcad.
246.....	3: التوابع و الخوارزميات الرياضية في Mathcad.
251.....	4: تطبيقات.
256.....	5: حل المعادلات التفاضلية.
257.....	6: اجراء العمليات الحسابية رمزيا.
258.....	7: الرسم البياني.

262.....8: مسائل و تمارين

267.....الفصل الثاني: تطبيقات من الفيزياء الإحصائية

267.....1: توزيع السرعة لماكسويل بولتزمان

272.....2: الجزيئات المتعددة الذرات

279.....الفصل الثالث: تطبيقات في فيزياء الجسم الصلب

279.....1 : السعة الحرارية للأجسام الصلبة

284.....2 : المغناطيسية المسايرة

289.....الفصل الرابع: تطبيقات في ميكانيك الكم

289.....1: جسيمة في بئر كمومي لا نهائي

291.....2: هزاز توافق في بعد واحد

294.....2: نموذج بور لذرة الهيدروجين

295.....4: حل معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين

301.....ملاحق

349.....قائمة المراجع

مقدمة

مع بدء استخدام الحواسيب في الخمسينيات من لقرن العشرين أصبح من الممكن التفكير بتطبيق طرق عديدة في حل مسائل واقعية في الفيزياء و مع التطور السريع للحواسيب تم تطوير الكثير من البرامج التي توظف خوارزميات عديدة في حل مسائل معقدة في مختلف فروع الفيزياء إذ في كثير من الأحيان لا يمكن الحصول على حل تحليلي لمسألة ما في الفيزياء بل في معظم الحالات تكون الحلول التحليلية المتوفرة تقريبات للحالات الواقعية، مثلاً حساب الحقل أو الكمون الناتج عن سلك لا نهائي أو مستوٍ لا نهائي (بينما في الواقع لا يوجد أي شيء لا نهائي). أو إذا أردنا حساب تأثير حقل الثقالة في منطقة قريبة من سطح الأرض بحيث يجب أن نأخذ بعين الاعتبار عدم تجانس كثافة الأرض أو انتشار الحرارة في جسم ذي شكل غير منتظم في كل الحالات السابقة، يجب أن يتم حل المسألة بطرق عديدة. الطرق العددية الضرورية لحل مسائل الفيزياء تشمل على سبيل المثال إجراء تكاملات ذات حدود معينة أو حل مجموعة من المعادلات الجبرية أو التفاضلية مع وجود شروط حدية ما. كما أن تطور الحواسيب خلال العقود الخمسة الماضية ساهم في صياغة طرق جديدة في حل مسائل فيزيائية معينة هذه الطرق لم تكن ممكنة على الإطلاق دون الحواسيب مثل الطرق العددية المستخدمة في حساب بنية وخواص المواد انطلاقاً من ميكانيك الكم أو الطرق العددية المستخدمة في الفيزياء الإحصائية كطريقتي مونت كارلو Monte Carlo والتحرك الجزيئي

Molecular Dynamics، كما أن التقنيات التجريبية الحديثة والتي تعطي كميات هائلة من القياسات الرقمية أدت إلى الاعتماد بشكل كبير على طرق عددية في تحليل هذه النتائج مثل طرق الاستقراء (المنحنيات التكعيبية - أصغر المربعات) أو طرق تحويل المعطيات التجريبية إلى صيغ أكثر ملاءمة مثل تحويلات فورييه. الأسباب السابقة مجتمعة أدت إلى تطور الفيزياء الحاسوبية كجزء هام في الفيزياء داعم لكل من الفرعين التقليديين النظري و التجريبي حيث تنجز الحسابات بالاعتماد على النظريات الفيزيائية إذ لا يوجد حالياً فرع في الفيزياء لا يوظف تقنيات الفيزياء الحاسوبية لاختبارها أو لتطبيقها على مسائل محددة بما فيها الفروع النظرية مثل نظرية النسبية العامة أو نظرية الأوتار الفائقة إضافة إلى استخدام هذه التقنيات في تحليل أو بناء النماذج التي تعتمد على القياسات التجريبية.

هذا الكتاب نتيجة محاضرات أُلقيت في جامعة دمشق على طلاب السنة الثالثة فيزياء على مدى خمس سنوات حيث يكون الطالب قد استكمل دراسة المقررات الأساسية في الفيزياء، الكهرباء و المغناطيسية و الميكانيك بفرعيه التقليدي و الكمومي و الثرموديناميك الإحصائي مما يمكنهم من إجراء بعض التطبيقات المتنوعة في الفيزياء. يتألف مقرر الفيزياء الحاسوبية من جزأين نظري و عملي، و هذان الجزآن مرتبطان مع بعضهما بشكل وثيق إذ يتم في الجزء العملي تطبيق الخوارزميات النظرية الواردة في الجزء النظري.

يتألف الكتاب من باين نظري و عملي و يضم الجزء النظري ستة فصول حيث نبدأ من حلول المعادلات غير الخطية لما لها من أهمية في التطبيقات العددية المختلفة و من ثم نتقل إلى حساب التفاضل و التكامل العددين و من ثم إلى طرق الاستقراء و حل المعادلات التفاضلية العادية و بعض مسائل القيم الخاصة و الشروط الحدية، و الفصل

الخامس مخصص لتحويلات فورية و تطبيقاتها مما لها من أهمية في الفيزياء النظرية و التطبيقية و قد تضمن هذا الفصل أيضا جزءاً عن توابع غرين لأهميتها في الفيزياء و الفصل السادس و الأخير يستعرض بعض النماذج و طرق المحاكاة مثل طريقتي مونت كارلو و التحريك الجزيئي و تطبيقاته في الفيزياء الإحصائية.

أما الباب الثاني فيضم الجزء العملي و هو بدوره ينقسم إلى جزأين الجزء الأول يتضمن تطبيقات تعتمد على الجزء النظري من الكتاب والتي تستخدم لغة البرمجة ال Fortran. و في الجزء الثاني

استخدام برمجيات رياضية جاهزة مثل Mathcad . الهدف من المختبر هو تدريب الطالب على استخدام الطرق العددية التطبيقية في حل بعض المسائل الفيزيائية، الطرق العددية المستخدمة هي الطرق الأساسية و البسيطة التي تستخدم بشكل كبير في كثير من المسائل التطبيقية مثل التكاملات أو التفاضلات العددية و حل المعادلات غير الخطية و التفاضلية و كذلك بعض طرق التقريب و الاستقراء و التي تفيد في التعامل مع البيانات العددية سواء كانت ناتجة عن التجربة أم الحسابات النظرية. سنركز في معظم الأمثلة ضمن المختبر على أمثلة من الموضوعات الفيزيائية المختلفة، الفيزياء الكمومية و الميكانيك و الفيزياء الإحصائية و فيزياء الحالة الصلبة.

كتاب العملي مقسم إلى قسمين، القسم الأول يستعرض لغة البرمجة الفورتران مع بعض الأمثلة البرمجية والتي يجب على الطالب أن يجربها أولاً قبل العمل على بعض التطبيقات الفيزيائية و يحتوي هذا الجزء على تطبيقات على التكاملات و طرق التقريب و الاستقراء و حل المعادلات غير الخطية و المعادلات التفاضلية.

والقسم الثاني يحتوي على تطبيقات فيزيائية باستخدام برنامج Mathcad وهذه التطبيقات تضم تطبيقات عامة تشمل الطرق العددية التي تمت تغطيتها سابقاً ثم

تطبيقات من الفيزياء الإحصائية و تطبيقات من فيزياء الحالة الصلبة و تطبيقات من ميكانيك الكم.

و بذلك يكون الطالب قد تدرب على استخدام برامج مكتوبة بلغة الفورتران و كذلك استخدام أحد البرامج التجارية الجاهزة و السهل الاستخدام نسبيا.

يقوم الطالب في مختبر الفيزياء الحاسوبية بكتابة تقارير تتضمن البرامج التي قام بتشغيلها في كل جلسة عملي و تسجيل النتائج التي حصل عليها، في الأسبوعين الأولين سيقوم الطلاب بالعمل على تشغيل برامج الفورتران الموجودة في الفصل الأول و التدرب على استخدام معالج الفورتران المستخدم Visual Fortran و Microsoft visual studio في الأسابيع الأربعة التالية سيقوم الطلاب بتشغيل التطبيقات الموجودة في الفصول اللاحقة من كتاب العملي و في النصف الثاني من المختبر سيقوم الطلاب بتشغيل التطبيقات باستخدام Mathcad. و يكون الجزء العملي موازاً للمحاضرات النظرية بحيث يتدرب الطالب في المختبر على ما قد تم تغطيته في المحاضرات النظرية.



الباب الأول
الجزء النظري



الفصل الأول

إيجاد جذور

المعادلات غير الخطية

Nonlinear equations

1- مقدمة:

كثير من المسائل الفيزيائية تقود في النهاية إلى صياغة المسألة المعطاة على شكل معادلة جبرية أو متسامية - أسية أو مثلثية - أو على شكل معادلات تفاضلية وبعض هذه المعادلات التفاضلية، و خصوصا في المسائل ذات القيم الحدية Boundary Conditions تؤول المسألة إلى حل معادلة جبرية أو متسامية أيضا. في هذا الفصل سنتحدث عن حل المعادلات غير الخطية عدديا و سنستعرض بعض الأمثلة و التطبيقات الفيزيائية.

المعادلات الجبرية من الدرجة الثانية يمكن حلها بسهولة بطريقة جبرية (طريقة المميز characteristic) والتي يحفظها عن ظهر قلب طلاب مرحلة التعليم الأساسي وتوجد كذلك علاقات لحل المعادلات الجبرية من الدرجة الثالثة والرابعة ولكنها أكثر تعقيدا من حالة المعادلات من الدرجة الثانية، أما بالنسبة للمعادلات من الدرجة الخامسة أو أعلى فقد تم البرهان رياضيا على أن بعضها لها حل جبري و البعض الآخر ليس لها حل جبري، و الأسهل أن نعتمد الطرق العددية حصرا وكذلك بالنسبة

للمعادلات التي تحتوي على توابع مثلثية أو أسية أو لوغاريتمية يجب اعتماد طرق عددية في معظم الحالات.

الطرق العددية المتبعة بشكل عام تبدأ بتخمين أولي للحل Guess (يفضل أن يكون قريباً من الحل) وتعويضه في المعادلة وتكرار خطوات حسابية معينة (بحسب الطريقة المتبعة) حتى تتقارب الحسابات في النهاية إلى الجذر المطلوب لهذه المعادلة.

أي يمكن صياغة المسألة التي لدينا بالشكل التالي :

لدينا معادلة من الشكل :

$$f(x) = 0 \quad (1)$$

نريد إيجاد جذور هذه المعادلة أي نريد إيجاد a بحيث $f(a) = 0$.

مثال عن تابع $f(x)$:

$$f(x) = e^x + \ln(x) + 17 \cosh[x^{11} + 22] + x^9 - 3$$

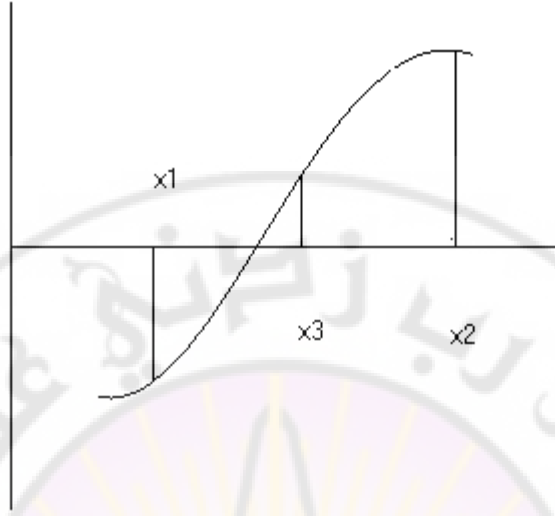
$$f(x) = 3x + \sin(x) - e^x$$

سنستعرض فيما يلي بعض الطرق المنهجية في إيجاد جذور المعادلات:

2- طريقة المنصف : bisection method

نبدأ من نقطتين x_1, x_2 بحيث يكون الجذر المطلوب (أحد جذور المعادلة) محصوراً بينهما ونحسب منتصف هذا المجال x_3 ونكرر العملية بتنصيف المجال x_2, x_3 أي إيجاد النقطة x_4 ولكن يجب أن نتحقق دائماً من أن الجذر المنشود لا يزال محصوراً ضمن المجال الذي نحدده في كل مرة وذلك إذا تحقق الشرط أن قيمة $f(x)$ عند كل من النقطتين اللتين تحددان المجال ذات إشارة متعاكسة (انظر

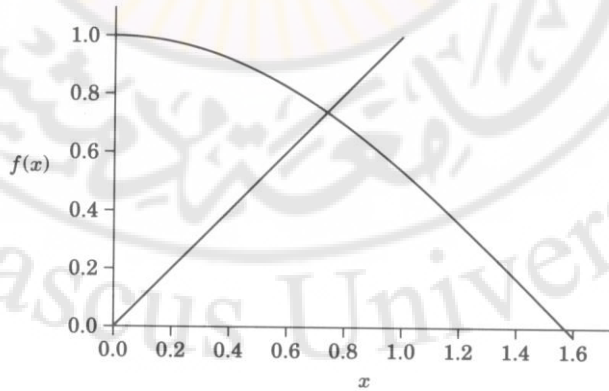
الشكل 1). نكرر هذه الخطوات حتى نحصل على الجذر بالدقة المطلوبة والتي تحدد ضمن البرنامج مثلاً الفرق بين الجذر الأخير و الجذر الذي أوجدناه في الخطوة السابقة أقل من 10^{-5} .



الشكل (1) طريقة المنصف

انظر الفصل الأول من الجزء العملي program11.

ينصح دائماً برسم التابع قبل البدء بالحساب العددي إذ يساعد الرسم على إعطاء فكرة أولية عن مكان الجذر، مثلاً في المثال في الشكل (2) أن الجذر محصور في المجال $(0,1)$. الجذر في هذه الحالة هو تقاطع الخط $y = x$ مع المنحنى $y = \cos x$.



الشكل (2) تقاطع التابعين x و $\cos(x)$

يمكن تطبيق نفس فكرة طريقة المنصف ولكن باتباع طريقة مختلفة في البرمجة و بالبدء من نقطة واحدة عوضاً عن اثنتين إذ من الممكن أننا لا نعرف الموضع التقريبي للجذر ونريد للحاسب أن يبحث عنه. نبدأ من نقطة أولى x_0 و نحسب $f(x_0)$ نضيف مقداراً صغيراً محدداً ل x_0 مثلاً Δ و نحسب $f(x_0 + \Delta)$ الناتجة و نكرر العملية حتى نحصل على $f(x)$ من إشارة مخالفة للتي سبقتها أي وجدنا جذراً محصوراً ضمن هذا المجال، عندئذ نعود أدراجنا و ننقص المقدار $\Delta/2$ من x و إذا ما تغيرت إشارة $f(x)$ الجديدة نكرر العملية عدة مرات حتى تتقارب النتيجة إلى الدقة المطلوبة.

انظر الفصل الأول من الجزء العملي program12.

3- طريقة القاطع: Secant method

طريقة المنصف سهلة التطبيق وكذلك من السهل أيضاً حساب الخطأ في استخدامها ولكن يمكن اتباع طرق تتقارب بسرعة أكبر إلى الجذر المنشود. يمكن تقريب كل التوابع بخط مستقيم وذلك على مجال صغير ولنبدأ من تخمين أولي واحد x_0 قريب من الجذر المطلوب (يمكن الحصول عليه من الرسم البياني أو من تطبيق طريقة المنصف لبضع مرات).

لنختار الآن نقطة ثانية x_1 تكون قريبة من النقطة x_0 ومن الجذر (الذي لا نعرفه تماماً بعد) نرسم خطاً يمر عبر النقطتين، هذا الخط سيتقاطع مع المحور x لنقل في نقطة x_2 هذه النقطة ستكون قريبة من الجذر r ويمكن أن نستنتج من تشابه المثلثات في الشكل (3):

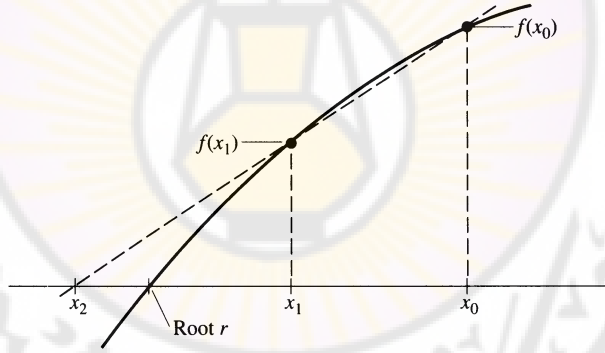
$$\frac{(x_0 - x_2)}{f(x_0)} = \frac{(x_0 - x_1)}{f(x_0) - f(x_1)} \quad (3)$$

ومن العلاقة الأخيرة نستطيع كتابة :

$$(4) x_2 = x_0 - f(x_0) \cdot \frac{(x_0 - x_1)}{f(x_0) - f(x_1)}$$

بما أن التابع غير خطي فإن x_2 ستكون أقرب إلى الجذر من النقطتين السابقتين. يمكن الاستمرار بتكرار نفس الخطوات حتى الحصول على النتيجة بالدقة المطلوبة وذلك باستخدام آخر نقطتين محسوبيتين في كل مرة وبالنسبة للخطوة الأولى يجب التحقق من أن النقطة x_1 أقرب إلى الجذر من النقطة x_0 وذلك بالتأكد من أن قيمة $f(x_1)$ هي الأصغر أو يجب عكس النقطتين المختارتين (تسمية x_0 بـ x_1). و بشكل عام يمكن كتابة العلاقة التكرارية لطريقة القاطع بالشكل:

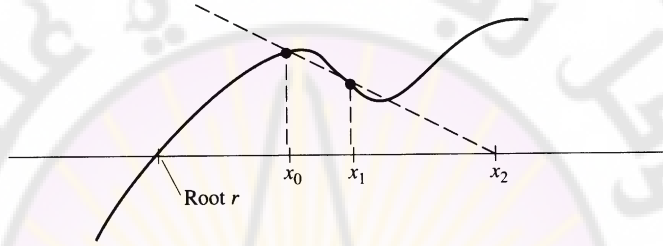
$$(4) x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \frac{(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$



الشكل (3) طريقة القاطع

في بعض الحالات عندما يكون التابع غير خطي بشكل كبير قرب الجذر، انظر الشكل (4)، (مثلا التابع ذو تقعر كبير) فيمكن للخطوات المكررة أن تبتعد كثيرا عن الجذر لا حظ أن نقطة تقاطع القاطع مع المحور تبتعد عن الجذر. يمكن للتخلص من هذه المشكلة اختيار النقطتين في البداية بحيث يقع الجذر بينهما (مثل طريقة المنصف) والتأكد في كل خطوة من أن الجذر لا يزال يقع بين النقطتين المعتمدتين في تلك الخطوة

و لكن الفرق بين هذه الطريقة وطريقة المنصف هو أننا نأخذ نقطة تقاطع القاطع مع المحور x عوضا عن المنتصف. الطريقة الأخيرة تسمى طريقة الموقع الخاطئ False position (أو من اللاتينية regula falsi) وهي مشابهة لطريقة المنصف ولكن عوضا عن اختيار النقطة الجديدة منتصف المجال نختار نقطة تقاطع الخط الذي يصل النقطتين x_1 و x_2 والمحور x .

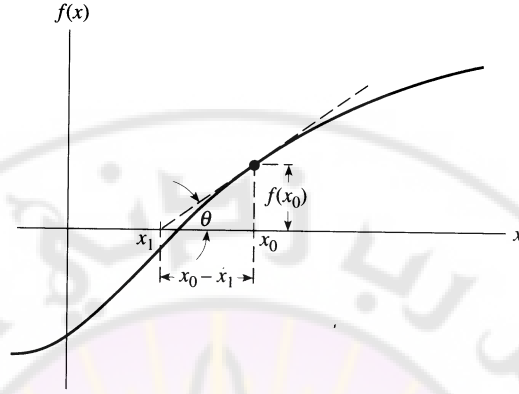


الشكل (4) مثال عن حالة تتباعد فيها الحسابات عن الجذر r

انظر الفصل الأول من الجزء العملي program13.

4- طريقة نيوتن-رافسون: Netwon-Raphson method

من أشهر الطرق المتبعة هي طريقة نيوتن رافسون وهذه الطريقة تعتمد بشكل مشابه على تقريب التابع (المعادلة المعطاة) بشكل خطي ولكنها تجري هذا التقريب باستخدام المماس لهذا التابع (عوضا عن القاطع المار من نقطتين كما رأينا سابقا). نبدأ من نقطة (تخمين) واحدة x_0 غير بعيدة عن الجذر نرسم المماس في تلك النقطة ونأخذ تقاطع هذا المماس مع المحور x و لتكن النقطة x_1 عوضا عن النقطة x_0 ونكرر العملية حتى نحصل على قيم متتالية قريبة جدا من بعضها البعض أو نحصل على قيمة قريبة جدا من صفر للتابع انظر الشكل (5).



الشكل (5) طريقة نيوتن-رافسون

من الشكل نستطيع الكتابة:

$$\tan(\theta) = f'(x_0) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1}$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

أو بشكل عام:

$$(6) x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

تستخدم طريقة نيوتن-رافسون بشكل واسع لأنها تقتارب إلى الجذر بسرعة كبيرة وتتصف هذه الطريقة بما يلي:

- 1- تقتارب هذه الطريقة إلى الجذر بشكل تربيعي سريع.
- 2- يمكن أن تقع بعض المشاكل إذا كان مشتق التابع معدوماً.
- 3- في كل خطوة يجب حساب قيمة التابع $f(x)$ و مشتق التابع.
- 4- تصلح طريقة نيوتن-رافسون لحساب جذور المعادلات الجبرية و المتسامية.

5- تصلح طريقة نيوتن-رافسون أيضا لحساب الجذور العقدية (لكثيرات حدود ذات أمثال عقدية) ولكن في هذه الحالة يجب أن نبدأ باختيار عدد عقدي في البداية.

مثال: التابع

$$f(x) = 3x + \sin(x) - e^x$$

ومشتقه يعطى بالعلاقة:

$$f'(x) = 3 + \cos(x) - e^x$$

إذا بدأنا من النقطة 0.0 :

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 0.0 - \frac{-1.0}{3.0} = 0.33333;$$

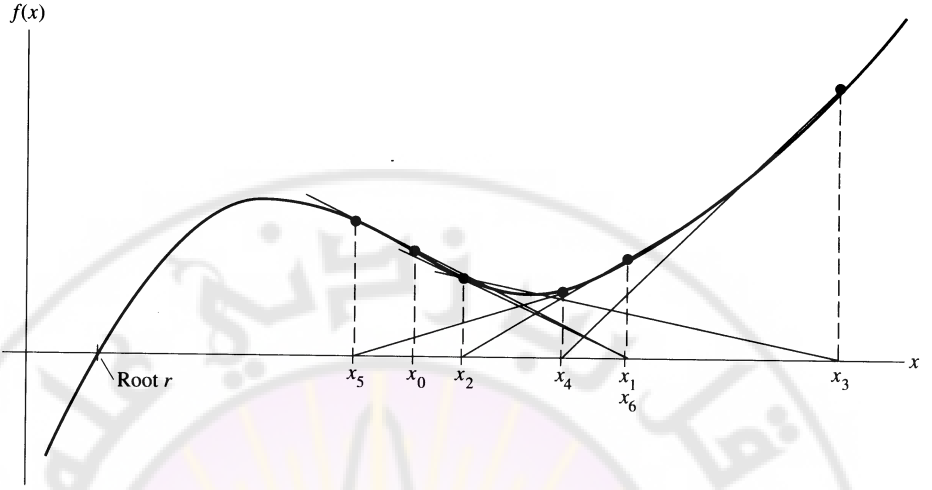
$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 0.33333 - \frac{-0.068418}{2.54934} = 0.36017;$$

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} = 0.36017 - \frac{-6.279 \times 10^{-4}}{2.50226} = 0.3604217$$

هذا الحل دقيق حتى سبع خانات بعد الفاصلة وحصلنا عليه بعد الخطوة الثالثة فقط!!

ملاحظة:

في بعض الحالات طريقة نيوتن-رافسون لا تتقارب إذ نقع في حلقة مفرغة ونكرر نفس الخطوات مرارا انظر الشكل (6). في مثل هذه الحالات يستحسن أن نجعل الحاسوب computer يطبع على الشاشة تفاصيل العمليات الحسابية (النقطة المعتبرة في كل خطوة مثلا وقيم التابع ومشتقاته) مما ينبهنا في حال وقوع مثل هذه المشكلة.



الشكل (6) مثال عن حالة لا تتقارب فيها الحسابات

انظر الفصل الأول من الجزء العملي program14 و program15.

5- طريقة التكرار المباشر: fixed point iteration

و تسمى أيضا طريقة النقطة الثابتة، للحصول على جذر لمعادلة من الشكل

$$f(x)=0 \quad (7)$$

نعيد كتابة المعادلة السابقة على شكل آخر:

$$x=g(x) \quad (8)$$

عادة يمكن كتابة المعادلة المدروسة على الشكل السابق بأكثر من طريقة. ضمن شروط

معينة ستذكر لاحقا تتقارب علاقة التكرار التالية

$$x_{n+1}=g(x_n) \quad ; n=0,1,2,3,\dots \quad (9)$$

إلى أحد جذور المعادلة r بحيث يتحقق لدينا

$$r=g(r) \quad (10)$$

مثال:

لدينا التابع

$$f(x) = x^2 - 2x - 3$$

واضح في هذه الحالة أن الجذور هي $(-1, 3)$

لنكتب المعادلة السابقة بالشكل من:

$$x = g_1(x) = \sqrt{2x + 3}$$

إذا بدأنا تطبيق معادلة التكرار ابتداء القيمة 4 :

$$x_0 = 4$$

$$x_1 = \sqrt{11} = 3.31662$$

$$x_2 = \sqrt{9.63325} = 3.10375$$

$$x_3 = \sqrt{9.20750} = 3.03439$$

$$x_4 = \sqrt{9.06877} = 3.01144$$

أي معادلة التكرار تتقارب إلى أحد جذور المعادلة الأصلية.

كما يمكن كتابة المعادلة بالشكل:

$$x = g_2(x) = \frac{3}{x - 2}$$

بالبدء من 4 أيضاً نجد:

$$x_0 = 4$$

$$x_1 = 1.5$$

$$x_2 = -6$$

$$x_3 = -0.375$$

$$x_4 = 1.203159$$

$$x_5 = -0.91355$$

$$x_6 = -1.02762$$

$$x_7 = -0.0990876$$

$$x_8 = -1.00305$$

أي حصلنا على الجذر الثاني للمعادلة بعد التكرار ثماني مرات.

كما يمكن كتابة المعادلة الأصلية بالشكل:

$$x = g_3(x) = \frac{x^2 - 3}{2}$$

وبتطبيق نفس الخطوات ابتداء من 4:

$$x_0 = 4$$

$$x_1 = 6.5$$

$$x_2 = 19.625$$

$$x_4 = 191.070$$

واضح أن الخطوات تباعد عن أحد جذري المعادلة وفي هذه الحالة تتباعد هذه الطريقة ولا تعطي أي جذر.

نظرية:

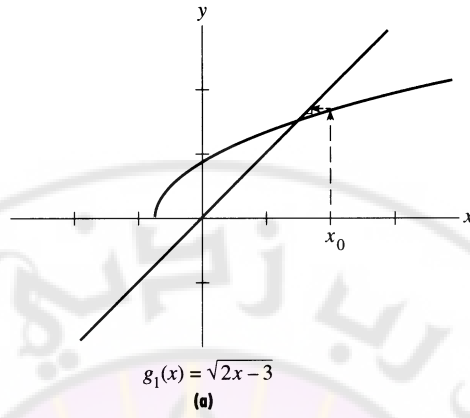
" إذا كان لدينا تابع $g(x)$ ومشتقه $g'(x)$ مستمرين في مجال يحتوي على جذر r للمعادلة $x = g(x)$ و كان $|g'(x)| < 1$ (الميل) من أجل كل نقطة من المجال فإن المعادلة :

$$(11) x_{n+1} = g(x_n)$$

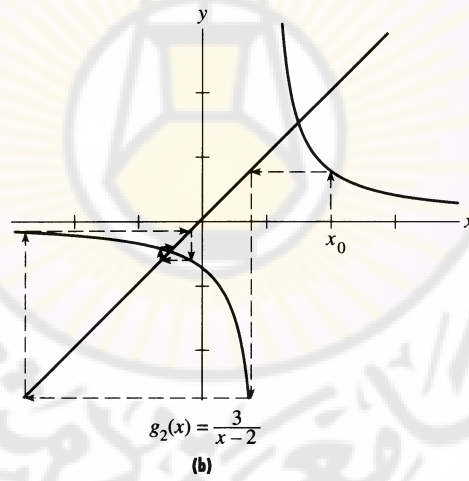
سوف تتقارب إلى الجذر r .

هذا الشرط هو شرط كافٍ فقط.

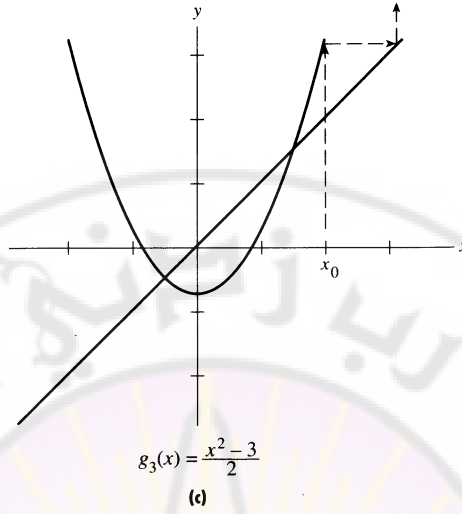
انظر الأشكال (7) و (8) و (9). حيث تتقارب عملية التكرار إلى الجذر المطلوب في المثال السابق من أجل $g_1(x)$ و $g_2(x)$ و تتباعد من أجل الاختيار $g_3(x)$ كما هو واضح في الشكل (9).



الشكل (7) تقارب طريقة التكرار المباشر



الشكل (8) تقارب طريقة التكرار المباشر



الشكل (9) تباعد طريقة التكرار المباشر

6- طريقة مولر : Muller Method

في كل الطرق التي استعرضناها حتى الآن يتم تقريب المنحن الذي نريد إيجاد نقاط تقاطعه مع المحور x (أي الجذور) و ذلك على مجال معين بالقرب من جذر المعادلة بخط مستقيم قاطع أو مماس، و لكن غالبا ما تكون المنحنيات التي نتعامل معها ذات انحناءات يصعب تقريبها بدقة باستخدام مستقيمات. طريقة مولر تستخدم عوضا عن المستقيم منحني من الدرجة الثانية حيث يمر هذا المنحني بثلاث نقاط قريبة من الجذر المطلوب، و يمكن تبسيط العملية إذا ما جعلنا المحور يمر بنقطة المنتصف كما في الشكل (10)، و تعطى العلاقات التكرارية في طريقة مولر بالشكل:

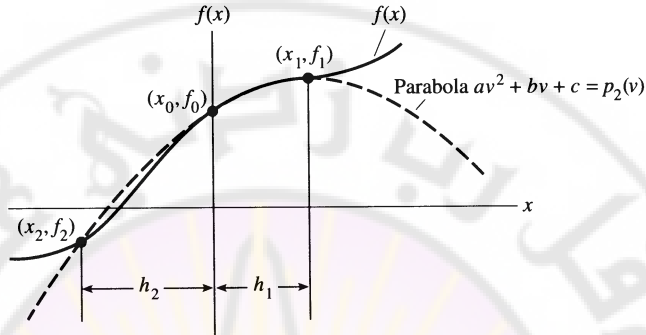
$$root = x_0 - \frac{2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}} \quad (12)$$

حيث نختار إشارة الموجب أو السالب في المقام بحيث نجعل المقام أكبر ما يمكن أي إذا كانت b سالبة نختار إشارة السالب.

و حيث :

$$b = \frac{f_1 - f_o - ah_1^2}{h_1} \quad , \quad a = \frac{f_1 - f_o(1 + \gamma) + f_2}{\gamma h_1^2 (1 + \gamma)}$$

$$c = f_o \frac{h_1}{h_2} = \gamma \quad \text{و} \quad (13)$$



الشكل (10) طريقة مولر

طريقة مولر يمكن تطبيقها لإيجاد الجذور العقدية مثل طريقة نيوتن رافسون و تتميز بأنها تتقارب بسرعة إلى جذور المعادلة.

مثال:

أوجد الجذر بين $[0, 1]$ للمعادلة: $f(x) = 3x + \sin(x) - e^x$

لدينا: $x_o = 0.5, \quad f(x_o) = 0.330704, \quad h_1 = 0.5$

$x_1 = 1, \quad f(x_1) = 1.123189, \quad h_2 = 0.5$

$x_2 = 0.0, \quad f(x_2) = -1, \quad \gamma = 1$

$$a = \frac{(1.0)(1.123189) - 0.330704(2.0) + (-1)}{1.0(0.5)^2(2.0)} = -1.07644$$

$$b = \frac{1.123189 - 0.330704 - (-1.07644)(0.5)^2}{0.5} = 2.12319$$

$$c = 0.330704$$

و نحصل على:

$$root = 0.5 - \frac{2(0.330704)}{2.12319 + \sqrt{(2.12319)^2 - 4(-1.07644)(0.330704)}} = 0.354914$$

و من أجل التكرار الثاني لدينا:

لدينا:

$$x_o = 0.354914, \quad f(x_o) = -0.0138066, \quad h_1 = 0.145086$$

$$x_1 = 0.5, \quad f(x_1) = 0.330704, \quad h_2 = 0.354914$$

$$x_2 = 0.0, \quad f(x_2) = -1, \quad \gamma = 2.44623$$

$$a = -0.808314$$

$$b = 2.49180$$

$$c = 0.360465$$

و نجد أن:

$$root = 0.360465$$

و بعد التكرار الثالث نحصل على $root = 0.3604217$ و التي تطابق النتيجة التي حصلنا عليها من طريقة نيوتن.

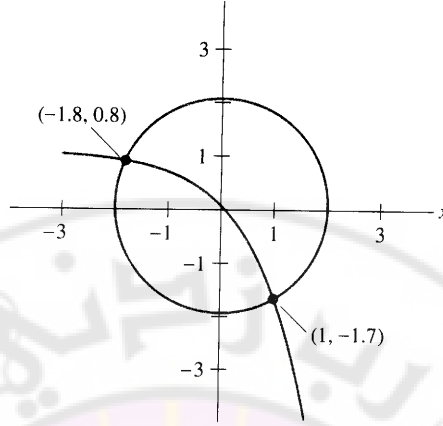
7- حل جملة معادلات غير الخطية:

حل جملة من المعادلات غير الخطية أكثر صعوبة من حل جملة المعادلات الخطية إذ من الممكن أن تكون الجذور عقدية. لنأخذ المعادلتين :

$$x^2 + y^2 = 4$$

$$e^x + y = 1$$

إذا رسمنا هذين التابعين نرى أن جذري المعادلتين هما نقطتا تقاطع الدائرة مع التابع $y = 1 - e^x$ كما في الشكل (11):



الشكل (11) حلول جملة المعادلتين غير الخطيتين

وهما $(-1.8, 0.8)$ و $(1, -1.7)$

يمكن إعادة كتابة المعادلتين على الشكل:

$$4 - x^2 - y^2 = 0$$

$$1 - e^x - y = 0$$

بحل المعادلة الثانية من أجل y نحصل على:

$$y = 1 - e^x$$

نعوض في المعادلة الأولى:

$$4 - x^2 - (1 - e^x)^2 = 0$$

$$3 - x^2 + 2e^x - e^{2x} = 0$$

يمكن حل هذه المعادلة باستخدام إحدى الطرق المذكورة سابقاً.

يمكن بشكل عام اتباع طريقة أكثر منهجية لإيجاد جذور جملة من المعادلات:

ليكن لدينا المعادلتين:

$$f(x, y) = 0$$

$$g(x, y) = 0$$

(14)

و ليكن لدينا الجذر: $x = r$ و $y = s$.

يمكن أن نستخدم سلسلة تايلور للنشر حول النقطة (x_i, y_i) القريبة من الجذر و ذلك بدلالة $(r - x_i)(s - y_i)$:

$$f(r, s) = 0 = f(x_i, y_i) + f_x(x_i, y_i)(r - x_i) + f_y(x_i, y_i)(s - y_i) + \dots$$

$$g(r, s) = 0 = g(x_i, y_i) + g_x(x_i, y_i)(r - x_i) + g_y(x_i, y_i)(s - y_i) + \dots$$

حيث f_x المشتق الجزئي بالنسبة لـ x ، و بأخذ الحدود الأولى من السلسلة، نحصل على:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_i, y_i) \\ g(x_i, y_i) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_x(x_i, y_i) & f_y(x_i, y_i) \\ g_x(x_i, y_i) & g_y(x_i, y_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r - x_i \\ s - y_i \end{bmatrix}.$$

نعيد كتابة المعادلتين الأخيرتين:

$$\begin{bmatrix} f_x(x_i, y_i) & f_y(x_i, y_i) \\ g_x(x_i, y_i) & g_y(x_i, y_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_i \\ \Delta y_i \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} f(x_i, y_i) \\ g(x_i, y_i) \end{bmatrix},$$

بحل جملة المعادلتين السابقتين بطريقة غوص نحصل على:

$$\begin{bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Delta x_i \\ \Delta y_i \end{bmatrix},$$

أي نحصل على قيمة أدق للجذر، و نكرر العملية عدة مرات حتى نحصل على الدقة المطلوبة.

لنطبق هذه الطريقة على المسألة السابقة:

$$f(x, y) = 4 - x^2 - y^2 = 0$$

$$g(x, y) = 1 - e^x - y = 0$$

تأخذ المشتقات الجزئية الشكل:

$$g_x = -e^x \quad f_x = -2x$$

$$g_y = -1 \quad f_y = -2y$$

نريد حل المعادلتين:

$$\begin{bmatrix} -2 & 3.4 \\ -2.7183 & -1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_0 \\ \Delta y_0 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 0.1100 \\ -0.0183 \end{bmatrix},$$

نحصل على:

$$\Delta x_o = 0.0043 \Rightarrow x_1 = 1.0043$$

$$\Delta y_o = -0.0298 \Rightarrow y_1 = -1.7298$$

بتكرار العملية نحصل على:

$$y_2 = -1.729637 \quad \text{و} \quad x_2 = 1.004169$$

دقة قيمة التابع عند (x_1, x_2) هي من مرتبة 10^{-7} .

يمكن تعميم الطريقة السابقة على الشكل:

$$\begin{bmatrix} f_{1x} & f_{1y} & f_{1z} & \cdots \\ f_{2x} & f_{2y} & f_{2z} & \cdots \\ f_{3x} & f_{3y} & f_{3z} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{nx} & f_{ny} & f_{nz} & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_i \\ \Delta y_i \\ \Delta z_i \\ \vdots \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

و بحل المعادلات السابقة نعرف النقاط الجديدة:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i, \quad y_{i+1} = y_i + \Delta y_i, \quad z_{i+1} = z_i + \Delta z_i, \dots \quad (20)$$

نكرر العملية بحسب الدقة المطلوبة.

تكمن صعوبة هذه الطريقة في إيجاد المشتقات الجزئية، و لكن يمكن تقريب قيمة هذه المشتقات بعلاقات كما سنرى في الفصل الثالث.

8- تطبيقات من الفيزياء:

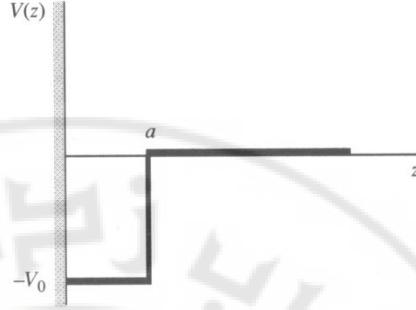
نعلم من ميكانيك الكم أن السويات الطاقية من أجل جسيمة في بئر كموني لا

نهائي تعطى بالعلاقة:

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (21)$$

و لكن ماذا لو كان البئر الكموني منتهياً؟

1- ليكن لدينا إلكترون حر يتحرك في بئر كموني من الشكل:



الشكل (12) بئر كموني منته

$$V(z) = \begin{cases} -V_o & 0 \leq z \leq a \\ \infty & z < 0 \\ 0 & z > a \end{cases}$$

$$a = 10 \text{ \AA}$$

$$V_o = 10 \text{ eV}$$

حيث

لدينا الحالات:

$$z < 0 \quad (1) \quad \psi = 0$$

$$0 \leq z \leq a \quad (2) \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} - V_o\psi = E\psi$$

$$z > a \quad (3) \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} = E\psi$$

من (2) نجد :

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{-2m}{\hbar^2} (E - V_o) \psi$$

حل هذه المعادلة من الشكل:

$$\psi(z) = A_1 \sin(k_1 z) + B_1 \cos(k_1 z)$$

$$k_1 = \sqrt{2m(E - V_o)/\hbar^2}$$

حيث

و بالمثل من (3):

$$\psi = A_2 e^{k_2 z} + B_2 e^{-k_2 z}$$

$$k_2 = \sqrt{-2mE / \hbar^2}$$

يجب أن تتحقق الشروط:

$$\psi(z \rightarrow \infty) = 0 \quad \text{و} \quad \psi(z \rightarrow -\infty) = 0$$

$$A_2 = 0$$

أي يجب أن يكون:

و يجب أن يكون ψ و ψ' مستمرين عند $z = 0$ أي يجب أن يكون: $B_1 = 0$.
عند $z = a$ لدينا:

$$A_1 \sin(k_1 a) + B_1 \cos(k_1 a) = B_2 e^{-k_2 a}$$

$$A_1 \sin(k_1 a) = B_2 e^{-k_2 a}$$

و كذلك من أجل ψ' :

$$A_1 k_1 \cos(k_1 a) = -B_2 k_2 e^{-k_2 a}$$

أو بالتقسيم:

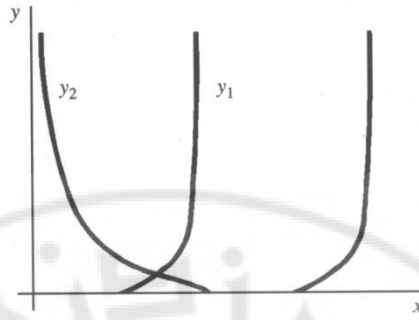
$$k_1 \cot(k_1 a) = -k_2$$

و لكن:

$$k_2 = \sqrt{\frac{-2m}{\hbar^2} E} \quad \text{و} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_o)}$$

بالتعويض نجد:

$$-\cot x = \frac{\sqrt{2mV_o a^2 / \hbar^2 - x^2}}{x} \quad (5)$$



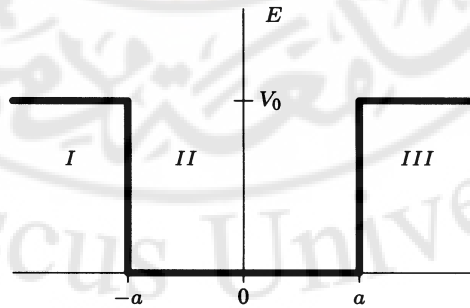
الشكل (13)

إذا رسمنا التابع الأخير نجد أن الجذر يقع ضمن المجال [2,3] استخدم program 1 لحساب جذر المعادلة (5) وذلك باستبدال التابع $f(x) = \cos x - x$ في البرنامج السابق بـ:

$$f(x) = \tan(x) + \frac{x}{\sqrt{10.4985965 - x^2}}$$

- احسب المقدار $(E + V_o)$
- غير قيم a و V_o كرر نفس الحساب.
- لماذا لم نستخدم العلاقة (5) تماماً كما هي و لكن أخذنا مقلوبها؟

II- بئر كموني:



الشكل (14) بئر كموني

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar}(V_o - E)\psi = 0$$

حلول معادلة شرودنجر في هذه الحالة:

$$\psi_I = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \beta = \sqrt{2m(V_o - E)/\hbar}$$

$$\psi_{II} = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x, \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_{III} = Fe^{-\beta x}$$

بتطبيق الشروط الحدية، التابع الموجي و مشتقه مستمران عند الحدود، نحصل من أجل الحد $x = -a$ على:

$$-A \sin \alpha a + B \cos \alpha a = Ce^{-\beta a}$$

$$\alpha A \cos \alpha a + \alpha B \sin \alpha a = \beta Ce^{-\beta a}$$

و

و من أجل الحد $x = a$ على:

$$A \sin \alpha a + B \cos \alpha a = Fe^{-\beta a}$$

$$\alpha A \cos \alpha a - \alpha B \sin \alpha a = -\beta Fe^{-\beta a}$$

و

يمكن أن نميز بين حالتين بالنسبة للحل زوجية و فردية:

$$A = 0, B \neq 0, C = F: \alpha \tan(\alpha a) = \beta$$

حالات زوجية:

$$A \neq 0, B = 0, C = -F: \alpha \cot(\alpha a) = -\beta$$

حالت فردية

أي تؤول مسألة حساب التوابع الموجية و السويات الطاقة إلى مسألة إيجاد جذور معادلات غير خطية و التي يمكن معالجتها عدديا بإحدى الطرق التي رأيناها في هذا الفصل.

III- عند حساب القيمة العظمى للطاقة الناتجة عن إشعاع الجسم الأسود نحصل على المعادلة التالية:

$$f(x)=e^x(5-x)-5$$

$$x = \frac{hc}{k\lambda_{\max}T} \quad \text{حيث}$$

1- استخدم طريقة نيوتن رافسون في إيجاد جذر هذه المعادلة بدقة رقمين بعد الفاصلة. عدل البرنامج السابق و استخدمه في حساباتك.

2- احسب قيمة الثابت في قانون الإزاحة لفين Wein Displacement law)
($\lambda_{\max}T = \text{const.}$

$$k=1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/}^\circ\text{K, } c=3 \cdot 10^8 \text{ m/sec, } h=6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J.sec.}$$

مسائل و تطبيقات

1- ليكن لدينا جملة المعادلتين:

$$x'' + x + 2y' + y = f(t)$$

$$x'' - x + y = g(t)$$

و لدينا الشروط الابتدائية: $x(0) = x'(0) = y(0) = 0$

عند حل جملة هاتين المعادلتين بطريقة تحويل لابلاس، نحصل على علاقة من الشكل:

$$(s^2 + 1)(s) - (2s + 1)(s^2 - 1) = -s^3 - s^2 + 3s + 1$$

نريد حساب s حتى نستخدمها في تحويل لابلاس العكسي و الحصول على حل جملة المعادلتين.

2- تعطى علاقة الانضغاطية compressibility للغازات الحقيقية على الشكل:

$$z = \frac{1 + y + y^2 - y^3}{(1 - y)^3}$$

حيث $y = \frac{b}{4v}$ ، b حد التصحيح من كمون فاندرفالس Vanderwaals ،

و v الحجم المولي.

إذا كانت $z = 0.892$ ، ماهي قيمة y .

3- في إحدى الدراسات على الطاقة الشمسية، نستخدم مجموعة من المرايا المستوية

و نركز الضوء على مجمع مركزي. اقترح فان هول Van Hall (1976) علاقة

تصف معامل التجميع الهندسي C على الشكل التالي:

$$C = \frac{\pi(h/\cos A)^2 F}{0.5\pi.D^2(1+\sin A-0.5\cos A)}$$

حيث A هي الزاوية المحيطية للحقل و F هي نسبة تغطية الحقل بالمرايا و D قطر المجمع و h ارتفاع المجمع.

أوجد A : إذا كان $h = 300$ و $C = 1200$ و $F = 0.8$ و $D = 14$.

4- اقترح لي و دافي Lee and Dafee (1976) علاقة تجريبية تربط معامل الاحتكاك من أجل جريان جسيمات ليفية معلقة مع fibrous particles مع عدد رينولد Reynolds على الشكل:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = \left(\frac{1}{k}\right) \ln(RE \cdot \sqrt{f}) + \left(14 - \frac{5.6}{k}\right)$$

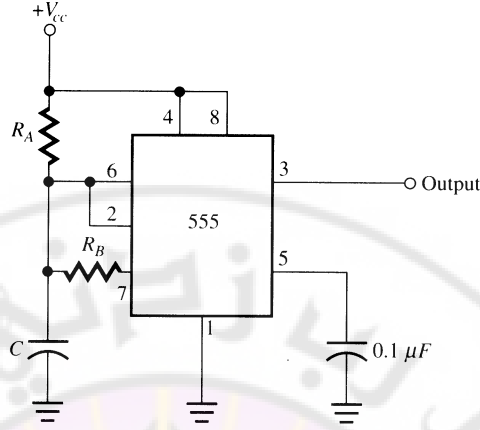
حيث f هو معامل الاحتكاك، و RE عدد رينولد و k وسيط يتعلق بتركيز الجسيمات المعلقة. من أجل $k = 0.28$ و $RE = 3750$ ماهي قيمة f .

5- نستطيع تحديد درجة الحرارة من أجل مادة تحتوي على منبع حراري بداخلها من العلاقة:

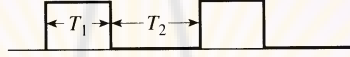
$$e^{-(1/2)t} \cosh^{-1}(e^{(1/2)t}) = \sqrt{\frac{1}{2}} L$$

إذا كانت $L = 0.088$ أوجد درجة الحرارة t .

6- ليكن لدينا دائرة المؤقت 555 المبينة بالشكل:



و التي تعطي الخرج output التالي:



حيث:

$$T_1 + T_2 = \frac{1}{f}$$

حيث f هي التردد. و نعرف دورة العمل على الشكل: $\frac{T_1}{T_1 + T_2} \times 100\%$

يمكن أن نبرهن أن:

$$T_1 = R_A C \ln(2)$$

$$T_2 = \frac{R_A \cdot R_B \cdot C}{R_A + R_B} \times \ln \left| \frac{R_A - R_B}{2R_A - R_B} \right|$$

إذا كانت $R_A = 8670$ و $C = 0.01 \times 10^{-6}$ و $T_2 = 1.4 \times 10^{-4}$

1- أوجد T_1 و f و أوجد دورة العمل.

2- أوجد R_B .

3- اختر قيمة معينة لـ f و لدورة العمل و احسب: T_1 و T_2 .

7- عند حل المعادلات التفاضلية من أجل مسائل القيم الحدّية بطريقة تحويل فورييه
تؤول المسألة إلى حل معادلات متسامية ، مثل حل المعادلة:

$$y'' + \lambda y = 0$$

مع الشروط الحدّية: $y(0) = 0$ و $y(1) = y'(1)$

يتطلب حل المعادلة : $\tan z = z$. أوجد ثلاث قيم لـ z غير $z = 0$.

8- توابع ليجاندر Legendre هي أحد أنواع التوابع الخاصة التي تظهر كثيرا في
حل المسائل الفيزيائية و الهندسية كمسائل انتقال الحرارة و مسائل
الألكتروديناميك حيث تؤول هذه المسائل إلى إيجاد جذور هذه التوابع الخاصة.
أوجد جذور تابع ليجاندر من الدرجة السادسة:

$$P_6 = \frac{1}{48}(693x^6 - 945x^4 + 315x^2 - 15)$$

ملاحظة: كل جذور توابع ليجاندر أصغر من الواحد و بالنسبة للتوابع من
مرتبة زوجية تكون الجذور متناظرة بالنسبة للصفر.

9- نوع آخر من التوابع الخاصة هي كثيرات حدود لاغاري Lagaree و التي
تنتج عن حل معادلة شرودنجر من أجل ذرة الهدروجين. أوجد جذور توابع
لاغاري التالية:

$$L_3(x) = x^3 - 9x^2 + 18x - 6$$

$$L_4(x) = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$$

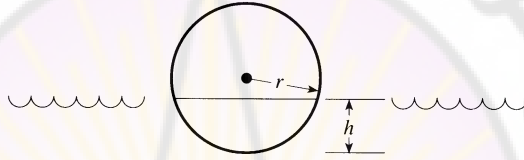
10- نوع آخر من التوابع الخاصة ذات التطبيقات الفيزيائية الهندسية هي
كثيرات حدود تشبثشيف Chebychev . أوجد جذور التابع التالي:

$$T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1 = 0$$

جميع جذور توابع تشيبيتشيف ذات طولية أصغر من الواحد.

11- كرة كثافتها d و نصف قطرها r أي أن وزنها $\frac{4}{3}\pi r^3 d$. أوجد

العمق h الذي تغطس إليه كرة كثافتها 0.6 كنسبة إلى نصف القطر (انظر الشكل في الأسفل). علماً بأن حجم جزء من كرة هو $\frac{1}{3}\pi(3rh^2 - h^3)$.



12- يقال أن طريقة مولر تتقارب بمعدل تقارب 1.85. استخدم برنامجاً لتطبيق طريقة مولر و تحقق من ذلك تجريبياً. هل يبقى ذلك صحيحاً في حالة وجود أكثر من جذر واحد؟

13- في مسألة البئر الكموني في الفقرة 6. أوجد أخفض حل زوجي و أخفض حل فردي من أجل $a = 3 \text{ \AA}$ و $m = m_e$ و $V_0 = 10 \text{ eV}$. ارسم الكمون و التوابع الموجية المقابلة لهذه القيم الخاصة.

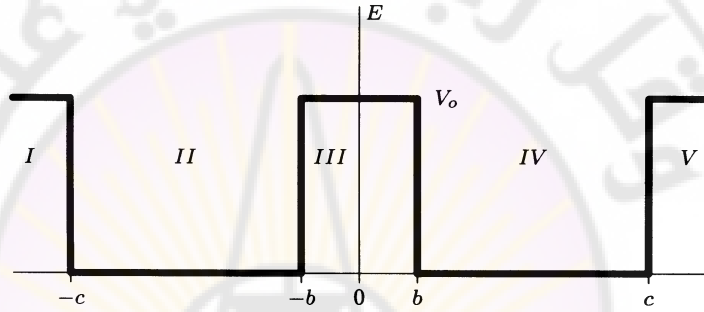
14- ادرس تابعة القيم الخاصة (الطاقات) في المسألة السابقة بدلالة عمق البئر الكموني V_0 مع ثبات a ($a = 3 \text{ \AA}$) و بدلالة a مع ثبات V_0 ($V_0 = 10 \text{ eV}$). ارسم النتائج بشكل مناسب.

15- ليكن لدينا البئر الكموني المضاعف المبين في الشكل، حيث

$a = 3 \text{ \AA}$ و $m = m_e$ و $V_0 = 10 \text{ eV}$ من أجل كل بئر. إذا كان البئر

بعيداً عن بعضهما بعضاً فإن كل بئر سيمتلك طاقة قريبة من حالة البئر

الواحد في المسألة 13. ادرس تابعة هذه الطاقات بدلالة البعد بين البئرين.





الفصل الثاني

طرق الاستقراء الداخلي والتقريب

و تطبيقاتها في الفيزياء

Interpolation and approximation

في كثير من الأحيان لا نعرف شكل التابع الذي نتعامل معه ولكن لدينا قيمة محددة لهذا التابع ضمن مجال ما و نريد من خلالها استقراء قيمة التابع في نقاط أخرى داخل أو خارج مجموعة النقاط الأصلية. نصادف مثل هذه الحالات عند إجراء قياسات تجريبية عند نقاط معينة ومحدودة أو على فترة زمنية ونريد بعد ذلك استنتاج السلوك العام للجملّة المدروسة.

1- طريقة لاغرانج Lagrange Method:

يمكن استخدام سلسلة تايلور لتقريب تابع في نقطة معينة x وذلك إذا كنا نعرف التابع وجميع مشتقاته في تلك النقطة. طريقة لاغرانج تمكننا من تقريب قيمة تابع في نقطة ما x دون الحاجة لمعرفة مشتقات التابع في تلك النقطة، ولكن يجب أن نعرف قيمة هذا التابع في أكثر من نقطة.

من سلسلة تايلور نستطيع كتابة التابع $f(x)$ بالشكل:

$$\begin{aligned} f(x_1) &= f(x) + (x_1 - x)f'(x) + \dots, \\ f(x_2) &= f(x) + (x_2 - x)f'(x) + \dots \end{aligned} \quad (1)$$

نريد التخلص من الحدود ذات المشتقات العليا وإبقاء الحدين الأولين فقط:

$$\begin{aligned} f(x_1) &= P(x) + (x_1 - x)P'(x) \\ f(x_2) &= P(x) + (x_2 - x)P'(x) \end{aligned} \quad (2)$$

وبحل المعادلتين (1) و (2) نجد أن :

$$(3) P(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} f(x_1) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(x_2)$$

وهي معادلة خط مستقيم يمر بالنقطتين $[x_1, f(x_1)]$ و $[x_2, f(x_2)]$ يمكن تعميم الطريقة السابقة بأخذ مشتقات أعلى من سلسلة تايلور ولكن يجب معرفة عدد أكبر من النقاط $[x, f(x)]$ وبشكل عام يمكن أن نكتب :

$$(4) P(x) = \sum_{j=1}^n l_{j,n}(x) f(x_j)$$

$$l_{j,n}(x_i) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

يمكن كتابة العلاقة الأخيرة بشكل مختصر باستخدام المؤثر دلتا كرونكر:

$$l_{j,n}(x_i) = \delta_{i,j} \quad (5)$$

يسمى هذا التقريب تقريب لاغرانج أو تابع استقراء لاغرانج. Lagrange interpolation.

بالإضافة إلى أهميتها النظرية استخدمت هذه الطريقة تاريخيا كثيرا في إعداد الجداول الرياضية التي تعطي التوابع الخاصة (لاغرانج, لاغاري, ليجاندر, بيسل, ...) أما الآن فلا ينصح باستخدامها لأسباب سنذكرها لاحقا.

طريقة لاغرانج لا تتطلب معرفة مشتقات التابع (مجموعة النقاط) التي نريد تقريبها بطريقة لاغرانج ولكن في بعض الحالات لدينا هذه المعلومات، من أجل تابع بيسل Bessel مثلا نعلم أن:

$$J'_0(x) = -J_1(x) \quad (6)$$

و

$$J'_n(x) = \frac{J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x)}{2} \quad (7)$$

أي لدينا معلومات عن التابع ومشتقاته. في هذه الحالة يمكن تقريب التابع باستخدام منحنى الاستقراء التالي:

$$P(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d \quad (8)$$

يمكن تحديد الأمثال a, b, c, d من شرط تساوي $P(x)$ و $f(x)$ عند النقاط x_1 و x_2 وكذلك مشتقاتهما. يمكن تعميم الحالة السابقة على الشكل التالي : إذا كان لدينا تابع ما نعرف قيمه في n نقطة ونعرف مشتقاته في r نقطة فيمكن أن ننشئ كثير حدود من المرتبة $(n+r-1)$ في الحالة العامة نعرف التابع ومشتقاته في n نقطة ونستطيع الكتابة:

$$P(x) = \sum_{j=1}^n h_{j,n}(x) f(x_j) + \sum_{j=1}^n \bar{h}_{j,n}(x) f'(x_j) \quad (9)$$

حيث

$$h_{j,n}(x) = [1 - 2(x - x_j)l'_{j,n}(x_j)]l_{j,n}^2(x)$$

$$\bar{h}_{j,n}(x) = (x - x_j)l_{j,n}^2(x)$$

و

تسمى الطريقة السابقة طريقة استقراء هرميت Hermite.

2- المنحنيات التكعيبية (Cubic Splines):

إذا توفرت لنا المشتقات لتابع ما (يمكن أن تكون على شكل مجموعة من القيم العددية) فمن الممكن استخدام طريقة هرميت، ولكن في معظم الحالات لا نعلم هذه المشتقات. بالطبع طريقة لاغرانج مناسبة ولكن $P'(x)$ في طريقة لاغرانج هو تابع غير

مستمر مما يسبب بعض المشاكل. نرغب أن نقرب التابع بتابع مستمر وذوي مشتقات مستمرة

نستطيع إنشاء هذا التابع على الشكل:

$$P(x) = a_j(x-x_j)^3 + b_j(x-x_j)^2 + c_j(x-x_j) + d_j \quad (10)$$

نشرط على هذا التقريب أن يكون مطابقاً تماماً للتابع الأصلي (نذكر أننا نتحدث عن مجموعة من النقاط دائماً) عند $x = x_j$ حيث x_j هي نقاط التابع الذي نريد تقريبه أي:

$$P(x_j) = f(x_j) = d_j$$

وكذلك يجب أن يكون التقريب مطابقاً للتابع الأصلي في النقاط x_{j+1} أي

$$P_{j+1} = a_j h_j^3 + b_j h_j^2 + c_j h_j + d_j \quad (11)$$

حيث اعتبرنا

$$P_j = P(x_j)$$

و

$$h_j = x_{j+1} - x_j$$

مشتقات هذا التابع تأخذ الشكل:

$$P'(x) = 3a_j(x-x_j)^2 + 2b_j(x-x_j) + c_j \quad (12)$$

$$P''(x) = 6a_j(x-x_j) + 2b_j \quad (13)$$

عند $x = x_j$ يأخذ المشتق الثاني الشكل:

$$P_j'' = 2b_j$$

$$b_j = \frac{P_j''}{2} \quad (14)$$

و عند النقطة $x = x_{j+1}$ لدينا:

$$P_{j+1}'' = 6a_j h_j + 2b_j$$

وبالتالي

$$a_j = \frac{1}{6} \frac{P_{j+1}'' - P_j''}{h_j} \quad (15)$$

ومن المعادلة (11)

$$c_j = \frac{P_{j+1} - P_j}{h_j} - \frac{h_j P_{j+1}'' + 2h_j P_j''}{6} \quad (16)$$

أي نستطيع معرفة جميع أمثال كثير الحدود بدلالة المشتق من الدرجة الثانية P_j'' ونستطيع الكتابة:

$$P(x) = P_j + \left[\frac{P_{j+1} - P_j}{h_j} - \frac{h_j P_{j+1}''}{6} - \frac{h_j P_j''}{3} \right] (x - x_j) + \frac{P_j''}{2} (x - x_j)^2 + \frac{P_{j+1}'' - P_j''}{6h_j} (x - x_j)^3, \quad x_j \leq x \leq x_{j+1} \quad (17)$$

ويعطى المشتق الأول بالعلاقة:

$$P'(x) = \frac{P_{j+1} - P_j}{h_j} - \frac{h_j P_{j+1}''}{6} - \frac{h_j P_j''}{3} + P_j'' (x - x_j) + \frac{P_{j+1}'' - P_j''}{2h_j} (x - x_j)^2, \quad x_j \leq x \leq x_{j+1} \quad (18)$$

كما يمكن إعادة كتابة المشتق الأول بدلالة P_{j-1} أي أخذ المجال السابق

$$P'(x) = \frac{P_j - P_{j-1}}{h_{j-1}} - \frac{h_{j-1} P_j''}{6} - \frac{h_{j-1} P_{j-1}''}{3} + P_{j-1}'' (x - x_{j-1}) + \frac{P_j'' - P_{j-1}''}{2h_{j-1}} (x - x_{j-1})^2, \quad x_{j-1} \leq x \leq x_j \quad (19)$$

عند $x = x_j$ العلاقتان الأخيرتان يجب أن تكونا متساويتين ونستطيع بعد ترتيب المساواة أن نكتب:

$$h_{j-1} P_{j-1}'' + (2h_j + 2h_{j-1}) P_j'' + h_j P_{j+1}'' = 6 \left(\frac{P_{j+1} - P_j}{h_j} - \frac{P_j - P_{j-1}}{h_{j-1}} \right), \quad j = 2, \dots, n-1 \quad (20)$$

أي لدينا مجموعة من $n-2$ معادلة ولكن لدينا n مجهولاً نحتاج لمعادلتين إضافيتين لحساب جميع المجاهيل P_j . نستطيع أن نحصل على هاتين المعادلتين الإضافيتين من تحديد المشتق عند نقطتي البداية والنهاية وبحل جملة المعادلات نحصل على قيم P_j وهي القيم التي نحتاجها لتحديد كثير الحدود $P(x)$.

يمكن كتابة جملة المعادلات بالشكل المصفوفي حيث تأخذ شكل مصفوفة ثلاثية الأقطار ويتم حل المعادلات بالطرق التي رأيناها في مقرر التحليل العددي ومن الأفضل عند كتابة برنامج لإنشاء منحني تكعيبي يمر في عدد n من النقاط أن نضمّن البرنامج طريقة لحل هذه الجملة من المعادلات

يكتب البرنامج عادة على شكل برنامجين جزئيين الأول يحسب P_j و الثاني يقوم بإنشاء التابع $P(x)$ وفق العلاقات السابقة.

انظر الفصل الثاني من الجزء العملي program16.

3- طريقة أصغر المربعات (Least Square Method):

حتى الآن تحدثنا عن تمرير منحني من نقاط معطاة ولكن ماذا لو كانت النقاط منتشرة بعض الشيء ولا تقع تماماً على خط واحد كما هي الحالة في كثير من النتائج التجريبية شكل (1) لنأخذ كمثال كرة تسقط سقوطاً حراً ولدينا النتائج في الجدول (1). نريد إيجاد أفضل خط يمر بين النقاط التجريبية والذي يعبر عن الحركة المدروسة. لنأخذ تابعاً من الشكل:

$$(21) V(t) = a + bt$$

يعطى انحراف القيمة المحسوبة من العلاقة السابقة عن القيم التجريبية بالعلاقة:

$$(22) S = \sum_{i=1}^N (V(t_i) - V_i)^2$$

حيث N عدد النقاط التجريبية.

العلاقة السابقة تعطي الخطأ في الحسابات باستخدام العلاقة (21) حتى يكون هذا الخطأ أصغرياً يجب أن يكون لدينا:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=1}^N 2(a + bt_i - V_i) = 0$$

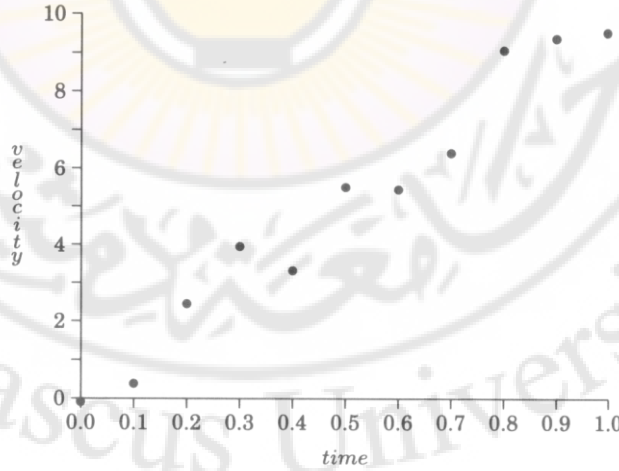
$$\frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=1}^N 2(a + bt_i - V_i)t_i = 0$$

أي حتى يكون الخطأ أصغرياً يجب أن نستخدم قيم a و b التي نحصل عليها من حل المعادلتين السابقتين والتي يمكن إعادة كتابتهما بالشكل :

$$(23) aN + b \sum_{i=1}^N t_i = \sum_{i=1}^N V_i$$

$$(24) a \sum_{i=1}^N t_i + b \sum_{i=1}^N t_i^2 = \sum_{i=1}^N V_i t_i$$

بحل المعادلتين السابقتين نحصل على قيم a و b .



الشكل (1) مثال عن نقاط تجريبية تعطي السرعة بدلالة الزمن

تمرين: احسب قيم a و b باستخدام القيم التجريبية من الجدول التالي:

الجدول (1) نقاط تجريبية تعطي السرعة بدلالة الزمن

time "t"	velocity "v"
0.0	-0.10290
0.1	0.37364
0.2	2.43748
0.3	3.93836
0.4	3.31230
0.5	5.49472
0.6	5.43325
0.7	6.39321
0.8	9.06048
0.9	9.36416
1.0	9.52066

عادة المسألة التي نحتاج حلها هي أكثر تعقيدا من المثال السابق و قد نحتاج لحل جملة كبيرة من المعادلات وليس معادلتين فقط ونستطيع أن نستخدم في ذلك أحد الطرق المعروفة في حل جمل المعادلات مثل طريقة غوص أو باستخدام المصفوفات.

في المثال السابق استخدمنا تابعا خطيا، يمكن أن نعمم الحالة السابقة باستخدام كثير حدود من المرتبة m على الشكل التالي :

$$(25) p(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_mx^m$$

ويكون الخطأ الناتج عن استخدام العلاقة (25) :

$$(26) S = \sum_{i=1}^N (p(x_i) - y_i)^2$$

وبنفس الطريقة يجب على مشتقات التابع $p(x)$ بالنسبة للأمثال c_0, c_1, \dots, c_m أن تكون معدومة حتى نحصل على خطأ أصغري. وبحل جملة من $m+1$ معادلة نحصل على قيم الأمثال المطلوبة:

$$\begin{aligned} c_0 N + c_1 \sum x_j + c_2 \sum x_j^2 + \dots + c_m \sum x_j^m - \sum y_j &= 0 \\ c_0 \sum x_j + c_1 \sum x_j^2 + c_2 \sum x_j^3 + \dots + c_m \sum x_j^{m+1} - \sum x_j y_j &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

⋮

$$c_0 \sum x_j^m + c_1 \sum x_j^{m+1} + c_2 \sum x_j^{m+2} + \dots + c_m \sum x_j^{m+m} - \sum x_j^m y_j = 0$$

يمكن استخدام طرق التحليل العددي لإيجاد حل جملة المعادلات السابقة مثلاً طريقة غوص أو مقلوب المصفوفة أو غيرها و بالتالي الحصول على كثير الحدود الذي يمثل النقاط بأفضل ما يمكن.

مثال:

لدينا القيم العددية المعطاة في الجدول التالي، و نريد أن نمرر كثير حدود من المرتبة الثانية في هذه النقاط.

الجدول (2) قيم y بدلالة x و بعض مجاميع المربعات المستخدمة في تطبيق طريقة أصغر المربعات

x_i	0.0	0.1	0.1	0.3	0.4	0.5	0.7	0.7	0.8	0.9	1.1
	5	1	5	1	6	2	0	4	2	8	7
y_i	0.9	0.8	0.8	0.7	0.5	0.5	0.3	0.3	0.3	0.2	0.1
	56	90	32	17	71	39	78	70	06	42	04
$\sum x_i = 6.01$						$N = 11$					
$\sum x_i^2 = 4.6545$						$\sum Y_i = 5.905$					
$\sum x_i^3 = 4.1150$						$\sum x_i Y_i = 2.1839$					
$\sum x_i^4 = 3.9161$						$\sum x_i^2 Y_i = 1.3357$					

بكتابة المعادلات المناسبة نحصل على:

$$a_0 N + a_1 \sum x_j + a_2 \sum x_j^2 - \sum y_j = 0$$

$$(28) a_0 \sum x_j + a_1 \sum x_j^2 + a_2 \sum x_j^3 - \sum x_j y_j = 0$$

$$a_0 \sum x_j + a_1 \sum x_j^2 + a_2 \sum x_j^3 + a_3 \sum x_j^4 - \sum x_j^2 y_j = 0$$

بعد حساب الحدود اللازمة ، (انظر الجدول 2) نكتب المعادلات:

$$11.a_0 + 6.01.a_1 + 4.6545.a_2 = 5.905$$

$$6.01.a_0 + 4.6545.a_1 + 4.1150.a_2 = 2.1839$$

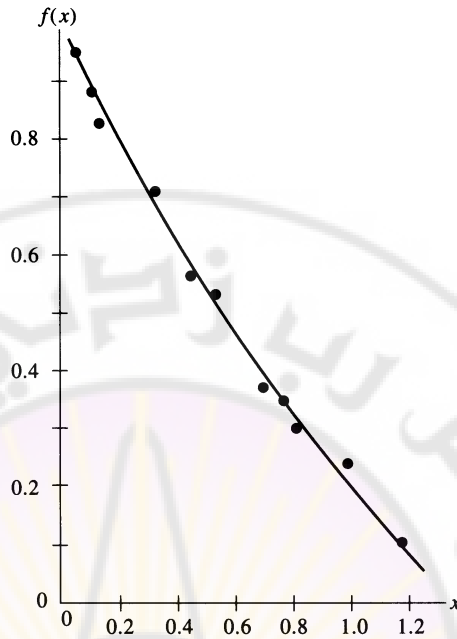
$$4.6545.a_0 + 4.1150.a_1 + 3.9161.a_2 = 1.3357$$

و بعد حل المعادلات نحصل على: $a_0 = 0.998, a_1 = -1.018, a_2 = 0.225$

و التي تعطي المعادلة الناتجة عن طريقة أصغر المربعات على الشكل:

$$y = 0.998 - 1.018x + 0.225x^2$$

والشكل يعطي الرسم البياني للمعادلة السابقة و يبين النقاط التجريبية.



الشكل (2) رسم يبين النقاط التجريبية و الخط الذي حصلنا عليه من أصغر المربعات

و لكن السؤال الذي يطرح نفسه أي مرتبة يجب أن نأخذ؟
 أي نريد إنقاص الانحراف عن النقاط التجريبية حتى نصل إلى حد مقبول، الطريق إلى ذلك هي باستخدام الإحصاء إذ يجب أن يكون التشتت variance مقبولاً:

$$\sigma^2 = \frac{\sum e_i^2}{N - n - 1} .$$

بحساب الانحرافات من أجل مراتب كثيرات حدود من 1-7 (النتائج معطاة في الجدول)
 نجد أن أخذ المرتبة الثانية كافٍ من أجل المثال السابق.

الجدول (3) مقارنة بين دقة طرق أصغر المربعات المستخدمة

الدرجة	المعادلة	σ^2	$\sum e^2$
1	$y = 0.952 - 0.760x$	0.001 0	0.009 2
2	$y = 0.998 - 1.018x + 0.22x^2$	0.000 2	0.001 8
3	$y = 1.004 - 1.079x + 0.351x^2 - 0.069x^3$	0.000 3	0.001 8
4	$y = 0.998 - 0.838x - 0.522x^2 + 1.040x^3 - 0.454x^4$	0.000 1	0.001 6
5	$y = 1.031 - 1.704x + 4.278x^2 - 9.477x^3 + 9.394x^4 - 3.290x^5$	0.000 1	0.000 7
6	$y = 1.038 - 1.910x + 4.694x^2 - 15.078x^3 + 18.277x^4 - 9.835x^5 + 1.836x^6$	0.000 2	0.000 7
7	$y = 1.032 - 1.742x + 4.694x^2 - 11.898x^3 + 16.645x^4 - 14.346x^5 + 8.141x^6 - 2.293x^7$	0.000 2	0.000 7

و لكن ماذا لو أردنا أن نمرر منحني أكثر تعقيدا من الحالة الخطية أو كثيرات الحدود التي ذكرناها حتى الآن، مثلا كمنحنيات من الشكل:

$$y = a.x^b$$

أو:

$$y = a.e^{bx}$$

نستطيع أن نتبع نفس الأسلوب السابق و كتابة جملة من التفاضلات الجزئية و لكن هذه المرة سنتعامل مع جملة من المعادلات غير الخطية مما يجعل المسألة أكثر صعوبة. و لكن في بعض الحالات يمكن أن نحول الصيغ غير الخطية إلى صيغ خطية، مثلا من أجل المعادلتين السابقتين يمكننا أن نكتب:

$$\ln y = \ln a + b \ln x \quad \text{بالنسبة للمعادلة الأولى و} \quad \ln y = \ln a + bx \quad \text{بالنسبة للمعادلة الثانية}$$

و عندها نتعامل مع التابع الجديد $z = \ln y$ بدلالة المتحول $(\ln x)$ أو أي x أعدنا المسألة إلى الشكل الخطي المؤلف هذه المعالجة شبيهة باستخدام الورق اللوغاريتمي أو نصف اللوغاريتمي المستخدمة في مخابر الفيزياء العملية.

لنأخذ مثالا عن حالة أكثر تعقيدا من الأمثلة السابقة:

مثال:

في إحدى تجارب الاختبار في صناعة الطائرات تم اختبار جناح أحد النماذج في النفق الهوائي، و حصلنا على النتائج التالية:

جدول (4) قيم تجريبية

$R/C:$	0.73, 0.78, 0.81, 0.86, 0.875, 0.89, 0.95, 1.02, 1.03, 1.055, 1.135, 1.14, 1.245, 1.32, 1.385, 1.43, 1.445, 1.535, 1.57, 1.63, 1.755;
$V_0/V_\infty:$	0.0788, 0.0788, 0.064, 0.0788, 0.0681, 0.0703, 0.0703, 0.0681, 0.0681, 0.079, 0.0575, 0.0681, 0.0575, 0.0511, 0.0575, 0.049, 0.0532, 0.0511, 0.049, 0.0532, 0.0426;

حيث R نصف قطر الدوامات الهوائية المتشكلة، و C معامل متعلق بالشكل الهندسي للجناح، و V_0 السرعة المماسية للدوامات الهوائية و V_∞ سرعة الطائرة بالنسبة للوسط. نريد أن نمرر منحني من الشكل:

$$g(x) = \frac{A}{x} (1 - e^{-\lambda x^2}),$$

في النقاط التجريبية بحوزتنا.

الحل:

نكتب علاقات أصغر المربعات اللازمة:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i=1}^{21} (Y_i - g(x_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^{21} \left(Y_i - \frac{A}{x_i} (1 - e^{-\lambda x_i^2}) \right)^2. \end{aligned}$$

ونأخذ المشتق الجزئي بالنسبة لـ A و λ و نساويه بالصفر:

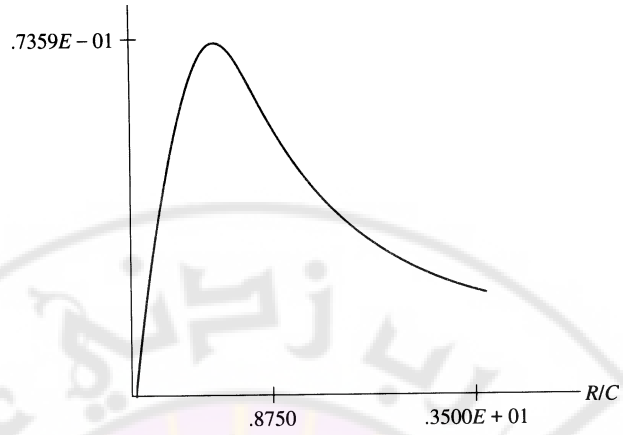
$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{21} \left(\frac{1}{x_i} \right) (1 - e^{-\lambda x_i^2}) \left(Y_i - \frac{A}{x_i} (1 - e^{-\lambda x_i^2}) \right) &= 0, \\ \sum_{i=1}^{21} x_i (e^{-\lambda x_i^2}) \left(Y_i - \frac{A}{x_i} (1 - e^{-\lambda x_i^2}) \right) &= 0. \end{aligned}$$

بحل جملة المعادلتين غير الخطيتين الناتجتين نحصل على:

$$g(x) = \frac{0.07618}{x} (1 - e^{-2.30574x^2}).$$

من أجل هذه القيم لـ A و λ تكون قيمة $S = 0.000016$. الشكل البياني التالي يبين

V_θ / V_∞ بدلالة R/C .



الشكل (3) المنحني الناتج استخجام النقاط في الجدول (4)

انظر الفصل الأول من الجزء العملي program17.

مسائل و تطبيقات

1- في إحدى تجارب قياس شدة الإضاءة لمعدن التنغستين، حصلنا على علاقة من الشكل:

$$e(T) = 0.02424 \left(\frac{T}{303.16} \right)^{1.27591}$$

تمثل النقاط التجريبية تماما بدقة ثلاث خانات بعد الفاصلة، أنشئ منحنى استقرار تكعيبي و قارن الدقة التي يمكن أن تحصل عليها من أجل استقرار القيم في منتصف المجالات المعطاة في الجدول التالي:

T ° K	300	400	500	600	700	800	900	1000	1100
E	0.02 4	0.03 5	0.04 6	0.05 8	0.06 7	0.08 3	0.09 7	0.11 1	0.12 5
T ° K	1200	1300	1400	1500	1600	1700	1800	1900	2000
E	0.14 0	0.15 5	0.17 0	0.18 6	0.20 2	0.21 9	0.23 5	0.25 2	0.26 9

2- في إحدى دراسات البلمرة المحرزة بالإشعاع radiation induced polymerization، يستخدم منبع لأشعة غاما و وفق جرعات محددة. و لكن تختلف الجرعات من مكان لآخر داخل الجهاز و وفق الجدول التالي:

البعد عن المركز	0	0.5	1	1.5	2.0
الجرعة $\times 10^5$ rads/hr	1.90	2.39	2.71	2.98	3.20
			3.0	3.5	4.0
			3.20	2.98	2.74

نحتاج إلى قيمة جرعة الإشعاع المقابلة للبعد 2.5 و لكنها غير موجودة في الجدول. استخدم إحدى طرق الاستقراء لإيجاد هذه القيمة.

3- في تجارب قياس الانتشار diffusion الذرات في مركبات النحاس حصلنا على النتائج التالية:

N	0.052 1	0.102 8	0.203 6	0.494 6	0.986 3	1.973 9	2.44 3	5.0 6
D x 10^6 cm ² /s ec	1.65	2.10	2.27	2.76	3.12	3.06	2.92	2.0 7

نريد القيم التي تقابل قيم (N=0,1,2,3,4,5) .

4- عند حل المعادلة التفاضلية لانتشار الحرارة عددياً، نحصل على درجة الحرارة $u(x, y)$ و ذلك في عقد الشبكة فقط (الشبكة التي تم تقسيم المنطقة المدروسة وفقها، راجع طرق حل المعادلات التفاضلية).

$x \backslash y$	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
0.0	0.0	5.00	10.00	15.00	20.00	25.00
0.5	5.00	7.51	10.05	12.70	15.67	20.00
1.0	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
1.5	15.00	12.51	9.95	7.32	4.33	0.0
2.0	20.00	15.00	10.00	5.00	0.00	-5.00

استخدم القيم المعطاة في الجدول لحساب درجة الحرارة عند النقاط: (0.7,1.2) و (1.6,2.4) و (0.65,0.82).

5- في إحدى القياسات الفلكية على أحد النجوم حصلنا على النتائج التالية :

Phase	-110	-80	-40	-10
Magnitude	7.98	8.95	10.71	11.70
	30	80	110	
	10.01	8.23	7.86	

Phase	-100	-60	-20
Magnitude	8.37	9.40	11.39
	20	60	100
	10.84	8.53	7.89

1- باستخدام المنحنى التكميبي (cspline) وبلاستفادة من الجدول الأول تحقق من القيم المعطاة في الجدول الثاني.

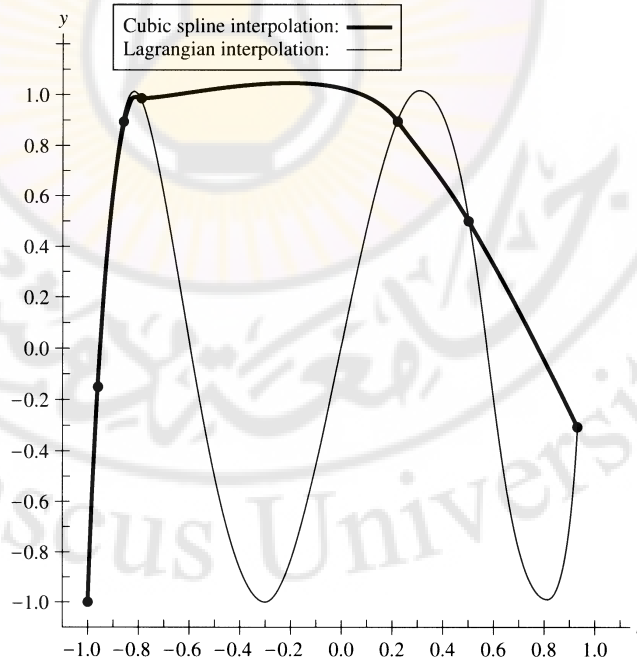
2- أوجد القيم الموافقة لأي ثلاث نقاط تختارها والتي تختلف عن النقاط المعطاة في الجدولين السابقين.

6- في إحدى التجارب حصلنا على النتائج التالية:

t	-1	-0.96	-0.86	-0.79
y	-1	-0.151	0.894	0.986
		0.22	0.5	0.930
		0.895	0.5	-0.306

1- ارسم النقاط و مرر خطاً عبرها.

2- استخدم برنامج المنحني التكعيبي لحساب عدد كافٍ من النقاط حتى تستطيع رسم المنحني بدقة. قارن النتيجة مع الشكل.





الفصل الثالث

التفاضل والتكامل العدديان

Numerical Differentiation and Integration

1- التفاضل العددي:

هناك عدة طرق لإجراء التفاضل عددياً، إذ يمكن أخذ تعريف المشتق مباشرة:

$$(1) f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$(2) f'_h(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

عندما $h \rightarrow 0$ ، تقترب $f'_h(x)$ من قيمة $f'(x)$. نريد علاقة تعطينا التفاضل دون الحاجة لأخذ النهاية $h \rightarrow 0$. من سلسلة تايلور نستطيع أن نكتب:

$$(3) f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \dots$$

$$(4) f'(x) = \frac{1}{h} \left[f(x+h) - f(x) - \frac{h^2}{2!} f''(x) - \dots \right]$$

العلاقة السابقة ليست علاقة تقريبية طبعاً، ولكن لا نريد أن نأخذ جميع المشتقات الموجودة في سلسلة تايلور وبأخذ الحدين الأولين فقط نجد:

$$(5) f'_h(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

الخطأ في العلاقة الأخيرة من رتبة

$$(6) E(h) = \frac{h}{2} f''(x) + \dots$$

أي يمكن القول أن الخطأ من الرتبة $O(h)$. ويمكن إعادة كتابة العلاقة السابقة بالشكل :

$$(7) f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$

المعادلة السابقة تأخذ الفرق باتجاه متزايد ، يمكن إعادة كتابة العلاقة بأخذ فروقات متناقصة على الشكل :

$$(8) f'(x) = \frac{f(x-h) - f(x)}{h} + O(h)$$

ويكون الخطأ أيضا من الرتبة $O(h)$. لنحاول الحصول على علاقات أدق من العلاقات السابقة لإجراء التفاضل ، لنأخذ سلسلتي تايلور التاليتين :

$$(9) f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots$$

$$(10) f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots$$

بالطرح نجد :

$$(11) f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

ويكون الخطأ في استخدام هذه العلاقة من الشكل :

$$(12) E(h) = -\frac{h^2}{3!} f'''(x) - \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(x) - \dots$$

الخطأ في هذه الحالة من رتبة $O(h^2)$ أي إذا كانت h (0.01) فإن الخطأ من رتبة (0.0001) .

يمكن بطريقة مشابهة حساب المشتقات من رتب أعلى ، مثلا بجمع (9) و (10) نحصل على :

$$(13) f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

ويكون الخطأ في استخدام هذه العلاقة من الشكل:

$$(14) E(h) = -\frac{h^2}{12!} f^{(4)}(x) - \frac{h^4}{36} f^{(6)}(x) - \dots$$

يمكن استخدام طرق مشابهة للحصول على علاقات تعطي مشتقات من رتب أعلى ونستطيع زيادة دقة الحساب بزيادة الحدود التي تأخذ من سلسلة تايلور.

انظر الفصل الثالث من الجزء العملي 18 program.

2- التكامل العددي:

التكامل لتابع ما هو المساحة المحصورة بين هذا التابع و المحور X ، يمكن تقريب

التكامل بشكل عام على أنه مجموع من الشكل :

$$(15) I = \sum_{i=0}^N W_i f_i$$

حيث $f(x_i) = f_i$ ويجب أن تتحقق الشروط

$$(16) \int_{x_0}^{x_1} dx = W_0 + W_1 = x_1 - x_0$$

$$(17) \int_{x_0}^{x_1} x dx = W_0 x_0 + W_1 x_1 = \frac{x_1^2 - x_0^2}{2}$$

بحل المعادلتين السابقتين نجد :

$$(18) W_0 = W_1 = \frac{x_1 - x_0}{2}$$

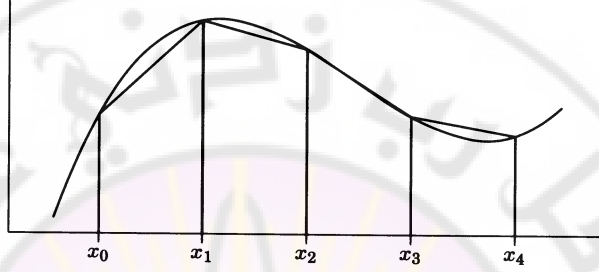
وبشكل عام يمكن الكتابة:

$$(19) \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f_0 + f_1)$$

حيث $h = x_1 - x_0$ ، وتعميم الحالة السابقة إلى N نقطة نستطيع أن نكتب :

$$(20) \int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + \cdots + \frac{1}{2}f_N\right)$$

تسمى العلاقة السابقة علاقة شبه المنحرف.



الشكل 1 تقريب المساحة تحت منحن بأشباه منحرف

بأخذ ثلاث نقاط (x_0, x_1, x_2) وبشكل مشابه للمعالجة السابقة نستطيع أن نكتب:

$$(21) \int_{x_0}^{x_2} dx = W_0 + W_1 + W_2 = x_2 - x_0$$

$$(22) \int_{x_0}^{x_2} x dx = W_0 x_0 + W_1 x_1 + W_2 x_2 = \frac{x_2^2 - x_0^2}{2}$$

$$(23) \int_{x_0}^{x_2} x^2 dx = W_0 x_0^2 + W_1 x_1^2 + W_2 x_2^2 = \frac{x_2^3 - x_0^3}{3}$$

ونستطيع الكتابة بعد حل المعادلات من أجل قيم الأوزان W :

$$(24) \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

وبتعميم الحالة السابقة من أجل N نقطة:

$$(25) \int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \cdots + f_N) + O(h^2)$$

تسمى العلاقة السابقة علاقة سيمبسون Simpson ويكون الخطأ في استخدام علاقة سيمبسون من رتبة $(1/N^2)$ بينما الخطأ في علاقة شبه المنحرف من رتبة $(1/N)$.
بالمثل إذا أخذنا أربع نقاط نحصل على العلاقة المسماة علاقة سيمبسون $(3/8)$:

$$(26) \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) + O(h^5)$$

وإذا أخذنا خمس نقاط نحصل علاقة بول Boole.

$$(27) \int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) + O(h^6)$$

انظر الفصل الثالث من الجزء العملي program19.

انظر الفصل الثالث من الجزء العملي program20.

3- التكاملات المتعددة الأبعاد:

يمكن في مثل هذه الحالات إجراء التكامل من أجل بعد ما أولاً ثم إجراء

التكامل على الأبعاد المتبقية على التوالي، مثلاً في حالة بعدين؛

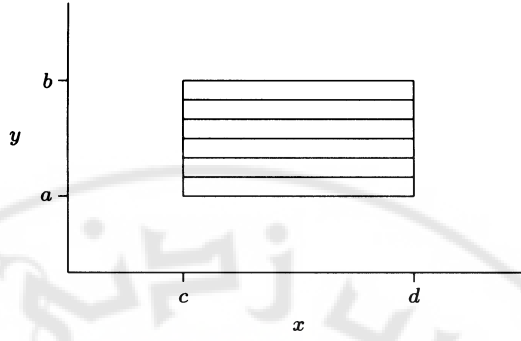
$$(28) I = \int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy$$

بإجراء التكامل على x أولاً، يصبح التكامل ثنائي البعد على الشكل:

$$(29) I = \int_c^d F(y) dy$$

حيث:

$$(30) F(y) = \int_a^b f(x, y) dx$$



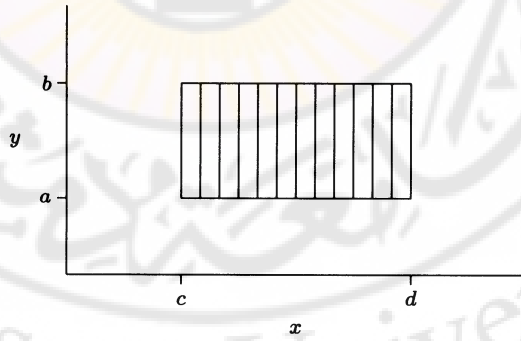
الشكل 2 تكامل ثنائي البعد بأخذ x أولاً

أو بإجراء التكامل على y أولاً:

$$(31) I = \int_a^b G(x) dx$$

حيث

$$(32) G(y) = \int_c^d f(x, y) dy$$



الشكل 3 تكامل ثنائي البعد بأخذ y أولاً

ملاحظات حول إجراء التكاملات عددياً:

1- إذا كنت تعرف علاقة تحليلية لإيجاد تكامل ما فالأفضل دائماً استخدامها لأن العلاقات العددية تقريبية بينما العلاقات التحليلية تعطي إجابة تامة Exact دون أي تقريب.

2- بعض التكاملات تتباعد أو تعطي عدم تعيين لا يمكن إزالته وبالتالي لا يمكن إجراؤها حتى عددياً.

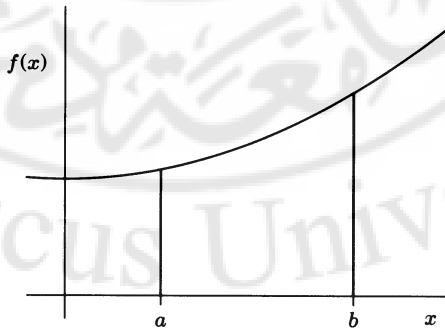
3- يمكن إزالة بعض حالات عدم التعيين بتغيير المتحول أو بالنشر.

4- طريقة تكامل مونت كارلو Monte Carlo Method:

حتى الآن كانت الطرق التي استعرضناها في إجراء التكامل العددي تعتمد تقريب مساحة التكامل بقطاعات (بحسب الطريقة المستخدمة شبه المنحرف أو غيرها) أو على تقريب التابع المكامل ولكن توجد طرق تتبع منهجاً مختلفاً تماماً في حساب التكاملات من هذه الطرق طريقة مونت كارلو وتتبع المنهجية التالية:

بما أن التكامل هو المساحة المحصورة بين المنحني الممثل للتابع والمحور x (انظر الشكل 3) فإننا نستطيع تعريف القيمة الوسطية للتابع على الشكل:

$$(33) (b-a) \langle f(x) \rangle = \int_a^b f(x) dx$$



الشكل 4. تكامل التابع $f(x)$ على المجال $[a, b]$

أي إذا كان لدينا طريقة لمعرفة القيمة الوسطية للتابع $f(x)$ فإنه بالإمكان حساب قيمة التكامل، وهنا يأتي دور طريقة مونت كارلو، لتكن لدينا مجموعة من النقاط العشوائية x_i والواقعة ضمن حدود التكامل (a,b) نستطيع حساب قيم التابع $f(x_i)$ الموافقة لهذه النقاط العشوائية، نستطيع كتابة القيمة الوسطية للتابع $f(x)$ ومن أجل عدد N من النقاط العشوائية على الشكل:

$$(34) \langle f(x) \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

من أجل N عدد كبير يكون لدينا:

$$(35) \langle f(x) \rangle_N = \langle f(x) \rangle$$

ويمكن أن نعطي قيمة التكامل بطريقة مونت كارلو بالشكل:

$$(36) \int_a^b f(x) dx = (b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

عادة يمكن توليد النقاط العشوائية باستدعاء برنامج جزئي للقيام بذلك أو استخدام تعليمات خاصة بذلك في لغات برمجية مختلفة.
انظر الفصل الثالث من الجزء العملي program21.

تطبيقات من الفيزياء:

١- يعطى دور النواس بشكل عام بالعلاقة:

$$T = 4 \sqrt{\frac{l}{g}} K \left(\sin \frac{\theta_o}{2} \right)$$

حيث :

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \xi}}$$

يسمى هذا النوع من التكاملات بالتكاملات الإهليلجية Elliptical integrations. التكامل الأخير يأخذ القيم كما في الجدول التالي:

$\sin^{-1} k$	$K(k)$
0°	1.57079
10°	1.58284
20°	1.62002
30°	1.68575
40°	1.78676
50°	1.93558
60°	2.15655
70°	2.50455
80°	3.15338
90°	∞

- استخدم أحد برامج التكاملات للتحقق من الجدول السابق.
- أوجد دور النواس من أجل إزاحة $\theta_0 > 60^\circ$ و قارن النتيجة مع الجواب المحسوب باعتماد التقريب الهارموني.

مسائل و تطبيقات

1- أجر مقارنة بين طريقة سيمبسون و طريقة شبه المنحرف مستخدما البرامج المعطاة في هذا الفصل. اختر تابعاً تكامله معروف تحليليا و تابعاً دورياً و تابعاً ذا تغيرات كبيرة.

2- احسب التكامل $\int_0^{\pi} \sin x dx$ باستخدام طرق التقريب للتابع المكامل المذكورة في الفصل، و استخدم مجالات $N=4,8,16,32,\dots,1024$. قارن الدقة في الطرق المختلفة.

3- احسب التكامل

$$I = \int_0^{\infty} \frac{dx}{1+x^2}$$

بدقة 8 خانات . يمكن تقسيم المجال إلى مجالين 0-1 و $1-\infty$.

4- استخدم التحويل:

$$x \rightarrow \frac{y}{1-y}$$

لتحويل التكامل:

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x dx}{(1+x)^4}$$

ثم احسب قيمة هذا التكامل.

5- احسب قيمة التكامل:

$$I = \int_0^2 \frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}}$$

و ذلك بعد إزالة عدم التعيين.

6- احسب التكامل التالي:

$$\iint e^{-xy} . dx . dy$$

و ذلك بدقة 8 خانات. $0 \leq x \leq 2$ و $0 \leq y \leq 1$.

7- ليكن لدينا منطقة مربعة في المستوى xy بحيث يكون:

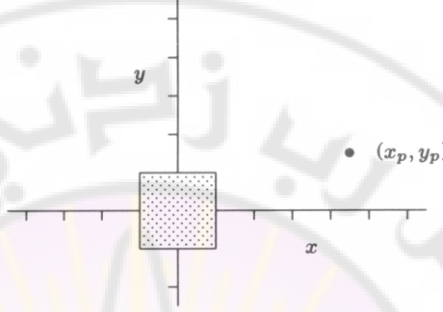
$$-1 \leq x \leq 1$$

$$-1 \leq y \leq 1$$

و تحتوي على توزيع منتظم للشحنات ρ كما هو مبين في الشكل. نحصل على الكمون الكهربائي الساكن في نقطة (x_p, y_p) الناتج عن هذا التوزيع للشحنات:

$$\Phi(x_p, y_p) = \frac{\rho}{4\pi\epsilon_0} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{dx . dy}{\sqrt{(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2}}$$

احسب الكمون $\Phi(x_p, y_p)$ و ضع النتائج في جدول. خذ القيم $x, y = 2, 4, \dots, 20$.
 . من أجل التبسيط خذ $\frac{\rho}{4\pi\epsilon_0} = 1$. ارسم خطوط تساوي الكمون.



8- كرر المسألة السابقة من أجل توزيع منتظم للشحنات ρ على حجم:

$$-1 \leq x \leq 1$$

$$-1 \leq y \leq 1$$

$$-1 \leq z \leq 1$$

9- نعلم من مادة الضوء الفيزيائي أن الضوء "ينعرج حول الأجسام"، من

أبسط حالات الإنعراج، الإنعراج حول حد مستقيم (مثل سكين) في هذه الحالة تختلف شدة الضوء عندما نبتعد عن الحد تبعا للعلاقة:

$$I = 0.5 I_0 \{ [C(v) + 0.5]^2 + [S(v) + 0.5]^2 \}$$

حيث I_0 شدة الضوء الوارد و v مقدار متعلق بالمسافة، $C(v)$ و $S(v)$ هي

تكاملات فريزل Fresnel (راجع الضوء الفيزيائي):

$$C(v) = \int_0^v \cos(\pi w / 2) dw$$

$$S(v) = \int_0^v \sin(\pi w / 2) dw$$

احسب تكاملات فريزل عدديا وارسم تابعة I/I_0 بدلالة v .

10- انفلاتية الغاز f (Fugacity) هو مصطلح يعبر عن العمل المتوفر أو الممكن من التحولات المتساوية درجة الحرارة Isothermal process . في حالة الغاز المثالي f تساوي إلى ضغط الغاز P ولكن في حالة غاز حقيقي تعطى بالعلاقة:

$$\ln \frac{f}{P} = \int_0^P \frac{C-1}{P} .dp$$

حيث C (عامل الإنضغاط) تقاس تجريبيا. يعطي الجدول التالي قيم C من أجل ضغوط مختلفة. افترض أن قيم C تتغير بشكل خطي بين القيم المعطاة في الجدول و تأخذ C قيمة 1.0 عندما يأخذ P القيمة 0.

P (atm)	C	F
1	0.9940	
10	0.9370	
20	0.8683	
40	0.7043	
60	0.4515	
80	0.3429	
120	0.4259	

160	0.5252	
250	0.7468	
400	1.0980	

11- التوتر المتولد في قضيب مستطيل عند فتله يمكن أن يحسب إذا علمنا قيم عزم الفتل U الذي يحقق المعادلة التفاضلية المناسبة. و حتى نحسب U من الضروري حساب تكامل من الشكل $\iint U.dxdy$ على كامل المنطقة المستطيلة. استفد من القيم المعطاة في الجدول و احسب التوتر. لا حظ أنه يمكن الاستفادة من تناظر القيم المعطاة في الجدول لتبسيط التكامل.

$y \backslash x$	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2
0.0	0	0	0	0	0	0	0
0.2	0	2.043	3.048	3.354	3.048	2.043	0
0.4	0	3.123	4.794	5.319	4.794	3.123	0
0.6	0	3.657	5.686	6.335	5.686	3.657	0
0.8	0	3.818	5.960	6.647	5.960	3.818	0
1.0	0	3.657	5.686	6.336	5.686	3.657	0
1.2	0	3.123	4.794	5.319	4.794	3.123	0
1.4	0	2.043	3.048	3.354	3.048	2.043	0
1.6	0	0	0	0	0	0	0

الفصل الرابع

حل المعادلات التفاضلية

مسائل القيم الحدية والقيم الخاصة

Boundry value and eigenvalue problems

1-المعادلات التفاضلية العادية:

تصاغ الكثير من المسائل الفيزيائية على شكل معادلات تفاضلية و بالتالي فإن حل المعادلات التفاضلية عددياً هو من التطبيقات الشائعة جداً في المسائل الفيزيائية و الهندسية. الصيغة العامة لمعادلة تفاضلية من المرتبة الأولى (أو جملة من المعادلات المقترنة coupled) هو:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (1)$$

يمكن كتابة المعادلات التفاضلية من مرتبة أعلى بنفس الصيغة و ذلك بتعريف تابع مساعد، مثلاً الهزاز التوافقي أحادي البعد ذو الكتلة m و يخضع لقوة $F(z)$ يوصف بالمعادلة من المرتبة الثانية:

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = F(z) \quad (2)$$

إذا عرفنا الإندفاع momentum بالشكل:

$$p(t) = m \frac{dz}{dt}$$

نحصل بالتالي من معادلات هاميلتون Hamilton equations على معادلتين مقترنتين من المرتبة الأولى:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{p}{m} \quad \frac{dp}{dt} = F(z) \quad \text{و} \quad (3)$$

و التي تأخذ نفس الشكل المعطى في المعادلة (1). سنناقش بالتالي المعادلات من المرتبة الأولى فقط و التي تكون من الشكل (1) حيث $y(x)$ هو تابع لمتحول وحيد و نستطيع بسهولة التعميم لعدة متحولات.

سندرس مسائل القيم الابتدائية أولاً، أي يكون لدينا قيمة معينة للتابع معروفة من أجل نقطة ما مثلاً نعرف الإندفاع و إحداثي الموضع في لحظة ما و نريد حسابهما في لحظة لاحقة.

1-1 طريقة أولر: Euler Method

لدينا $y(x=0) = y_0$ و نريد معرفة الحل العام $y(x)$. عادة نريد معرفة هذا التابع عند نقطة معينة (مثلاً $x=1$). الطريقة العامة هي تقسيم المجال من القيمة الابتدائية إلى القيمة التي نريد حساب قيمة التابع عندها ($[0,1]$ من أجل مثالنا) إلى عدد كبير N ، من المجالات المتساوية ذات الطول $h=1/N$ و نستخدم علاقة تكرارية التي تعطي y_n بدلالة y_{n-1}, y_{n-2}, \dots حيث y_n هو تقريب لـ $y_n(x=nh)$. يتيح مثل هذه العلاقة التكرارية تكامل المعادلة التفاضلية خطوة بخطوة على المجال المطلوب. أحد أبسط الطرق هي طريقة أولر، حيث نقرب الطرف الأيسر من المعادلة (1) من تعريف التفاضل (راجع الفصل 3).

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} + O(h) = f(x_n, y_n) \quad (4)$$

أي نستطيع كتابة y_{n+1} بدلالة y_n :

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n) + O(h^2) \quad (5)$$

الخطأ في استخدام هذه العلاقة من مرتبة $O(h)$ و يتناقص بشكل خطي مع تناقص المقدار h . أي حتى نقلل الخطأ بمقدار النصف نحتاج أن نأخذ المجال $h/2$ و بالتالي القيام بضعف الخطوات و القيام في كل خطوة بحساب قيمة التابع f . مثال: لدينا المعادلة التفاضلية:

$$\frac{dy}{dx} = -x \cdot y; \quad y(0) = 1, \quad (6)$$

و التي تملك الحل التحليلي:

$$y = e^{-x^2/2}$$

ينفذ البرنامج التالي الطريقة المذكورة من أجل المعادلة (6) حيث يطلب قيمة h و يكامل المعادلة على المجال [1,3] و يطبع النتيجة و الخطأ في الحساب.

```

C-----
C      Program
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
      FUNC(X,Y)=-X*Y
20 PRINT*, 'ENTER STEP SIZE (.LE. 0 TO STOP)'
  READ*,H
  IF (H.LE.0.) STOP
  NSTEP=3./H
  Y=1.0
  DO 10 IX=0,NSTEP-1
    X=IX*H
    Y=Y+H*FUNC(X,Y)
    DIEF=EXP(-0.5*(X+H)**2)-Y
    PRINT *,IX,X+H,Y,DIEF
10 CONTINUE
  GOTO 20
  END

```

و تكون الأخطاء الناتجة في هذه الحالة:

$$y(1) = e^{-1/2} = 0.606531, \quad y(3) = e^{-9/2} = 0.011109$$

على الرغم من أن طريقة أولر مقبولة نسبياً إلا أننا نرغب في طرق أكثر دقة و التي تساعد على أخذ h أكبر و بالتالي إنجاز العمل باستخدام خطوات أقل و حسابات أقل. أحد هذه الطرق يمكن اشتقاقها من سلسلة تايلور:

$$y_{n+1} = y(x_n + h) = y_n + hy'_n + \frac{1}{2}h^2 y''_n + O(h^3) \quad (7)$$

و لكن لدينا:

$$y'_n = f(x_n, y_n)$$

و:

$$y''_n = \frac{df}{dx}(x_n, y_n) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f \quad (8)$$

و بالتعويض في العلاقة (7) نحصل على:

$$y_{n+1} = y_n + hf + \frac{1}{2}h^2 \left[\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right] + O(h^3) \quad (9)$$

حيث نقوم بحساب f و مشتقاته عند النقطة (x_n, y_n) ، هذه العلاقة لها خطأ من المرتبة $O(h^3)$ و هي مفيدة جداً في حالة معرفة التابع f تحليلياً و عندما يكون بسيطاً بحيث يمكن أخذ مشتقه بسهولة و كما يمكن زيادة الدقة بالاحتفاظ بمحدود أكبر من سلسلة تايلور ولكن العمليات الجبرية تصبح أكثر تعقيداً.

2-1 الطرق المتعددة الخطوات:

هناك أسلوب آخر لتحقيق دقة أكبر هو استخدام علاقات تكرارية تربط y_{n+1} مع نقاط غير y_n مثل y_{n-1}, y_{n-2} ، و حتى نحصل على مثل هذه العلاقات نستطيع أن نكامل العلاقة (1) حيث نحصل على:

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \quad (10)$$

نحن لا نعلم قيم f على كامل المجال ولكن يمكن أن نستخدم التقريب الخطي لاستقراء القيم المطلوبة من أجل المجال المطلوب:

$$f \approx \frac{(x-x_{n-1})}{h} f_n - \frac{(x-x_n)}{h} f_{n-1} + O(h^2) \quad (11)$$

حيث f_i هو $f(x_i, y_i)$.

بتعويض (11) في (10) و إجراء التكامل على x نحصل على ما يعرف بعلاقة Adams-Bashforth:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{3}{2} f_n - \frac{1}{2} f_{n-1} \right) + O(h^3) \quad (12)$$

و هناك طرق مشابهة و لكن أكثر دقة يمكن الحصول عليها من استخدام كثير حدود من درجة أعلى في عملية الاستقراء. على سبيل المثال إذا استخدمنا كثير حدود تكعيبي يمرر من النقاط $f_n, f_{n-1}, f_{n-2}, f_{n-3}$ نحصل على علاقة Adams-Bashforth ذات الخطوات الأربعة four step.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55 f_n - 59 f_n + 37 f_{n-2} - 9 f_{n-3}) + O(h^5) \quad (13)$$

لاحظ أننا نحتاج لمعرفة قيمة f من أجل عدد من النقاط في البداية و لا تكفي نقطة واحدة و لذلك نحتاج لحساب هذه النقاط من طريقة أخرى مثل طريقة تايلور أولاً.

- طريقة رنج-كوتا : Runge-Kutta method

يمكن أن نقرب التكامل في العلاقة (11) باستخدام سلسلة تايلور و ذلك بالنشر من أجل نقطة تقع في منتصف المجال الذي نختاره لإجراء التكامل:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1/2}, y_{n+1/2}) + O(h^3) \quad (14)$$

و يمكن تعريف k على الشكل:

$$k = hf(x_n, y_n) \quad (15)$$

و نستطيع بالتالي الحصول على العلاقة التكرارية:

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k\right) + O(h^3) \quad (16)$$

يمكن استخدام الكثير من الطرق لحساب التكامل كما رأينا في الفصل السابق، مثلاً باستخدام طريقة سيمبسون نحصل على علاقة من الشكل:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}[f(x_n, y_n) + 4f(x_{n+1/2}, y_{n+1/2}) + f(x_{n+1}, y_{n+1})] + O(h^5) \quad (17)$$

و بتعريف المتحولات k_1, k_2, k_3 من أجل تقريب قيم التابع f على الشكل:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \end{aligned} \quad (18)$$

$$k_3 = hf(x_n + h, y_n - k_1 + 2k_2)$$

و نحصل على علاقة من الشكل:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}[k_1 + 4k_2 + k_3] + O(h^4) \quad (19)$$

و بشكل مشابه يمكن صياغة طريقة رنج - كوتا من المرتبة الرابعة على الشكل:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \end{aligned} \quad (20)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

و نحصل على علاقة تكرار بدقة من مرتبة $O(h^5)$.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] + O(h^5) \quad (21)$$

- رنج - كوتا فـهـلـبـرـغ : Runge -Kutta -Fehlberg

تشبه طريق رنج - كوتا في الصياغة حيث نعرف:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_n, y_n) \\
 k_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{4}, y_n + \frac{h}{4}k_1\right) \\
 k_3 &= f\left(x_n + \frac{3h}{8}, y_n + \frac{3h}{32}k_1 + \frac{9h}{32}k_2\right) \\
 k_4 &= f\left(x_n + \frac{12h}{13}, y_n + \frac{1932h}{2197}k_1 - \frac{7200h}{2197}k_2 + \frac{7296h}{2197}k_3\right) \\
 k_5 &= f\left(x_n + h, y_n + \frac{439h}{216}k_1 - 8hk_2 + \frac{3680h}{513}k_3 - \frac{845h}{4140}k_4\right) \\
 k_6 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n - \frac{8h}{27}k_1 - 2hk_2 - \frac{3544h}{2565}k_3 - \frac{1859h}{4104}k_4 - \frac{11h}{40}k_5\right)
 \end{aligned} \quad (22)$$

باستخدام هذه التقريبات يعطى التقريب من الدرجة الرابعة بالعلاقة:

$$\hat{y} = y_n + h\left(\frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4104}k_4 - \frac{1}{5}k_5\right) \quad (23)$$

و يعطى التقريب من الدرجة الخامسة بالعلاقة:

$$y = y_n + h\left(\frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6\right) \quad (24)$$

و الخطأ من مرتبة:

$$E = \frac{k_1}{360} - \frac{128k_3}{4275} - \frac{2197k_4}{75240} + \frac{k_5}{50} + \frac{2k_6}{55}$$

مثال:

لدينا المعادلة :

$$\frac{dy}{dx} = -2x - y; \quad y(0) = -1$$

و لنأخذ المجال $h = 0.1$. باستخدام رنج-كوتا-فـهـلـبـرـغ

$$k_1 = 0.1$$

$$k_2 = 0.0925000$$

$$k_3 = 0.0889609$$

$$k_4 = 0.0735157$$

$$k_5 = 0.0713736$$

$$k_6 = 0.0853872$$

$$\hat{y}_1 = -0.91452212, \quad y_1 = -0.914512251$$

$$E = -0.000000040 \quad \text{و الخطأ :}$$

جدول (1) مقارنة بين الطرق المختلفة في حل المعادلات التفاضلية

Method	Estimate of slope over x-interval	Global error	Local error	Evaluations of $f(x, y)$ per step
Euler	Initial value	$O(h)$	$O(h^2)$	1
Modified Euler	Arithmetic average of initial and final predicted slope	$O(h^2)$	$O(h^3)$	2
Runge-Kutta (fourth-order)	Weighted average of four values	$O(h^4)$	$O(h^5)$	4
Runge-Kutta-Fehlberg	Weighted average of six values	$O(h^5)$	$O(h^6)$	6

2- مسائل القيم الخاصة:

معظم المعادلات التفاضلية في الفيزياء تأخذ شكل معادلة خطية من المرتبة الثانية من

الشكل :

$$(25) \frac{d^2 y}{dx^2} + k^2(x)y = S(x)$$

حيث S هو الجزء غير المتجانس من المعادلة التفاضلية ويسمى منبع Source و k تابع حقيقي.

مثال 1:

معادلة بواسون من الشكل

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho \quad (26)$$

تعطي الكمون الكهربائي Φ الناتج عن توزيع للشحنات $\rho(r)$ ومن أجل توزيع للشحنات متناظر كرويا نستطيع أخذ الجزء المتعلق بالمتحول r فقط. (راجع في مادة التحليل الشعاعي كيفية كتابة المؤثر ∇ في الإحداثيات القطبية الكروية، هنا أخذنا الجزء المتعلق بـ r).

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi}{dr} \right) = -4\pi\rho \quad (27)$$

وبإجراء التعويض :

$$\Phi(r) = r^{-1} \phi(r)$$

تصبح المعادلة السابقة على الشكل:

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} = -4\pi\rho \quad (28)$$

وهي مثل الصيغة (25) مع أخذ

$$k^2 = 0$$

و

$$S = -4\pi\rho$$

إن الكثير من مسائل الإلكتروديناميك ستؤول إلى معادلات من الشكل (25) أو (26).

مثال 2: التابع الموجي لجسيمة ذات كتلة m وطاقة E يمكن أن يعطى بالعلاقة:

$$\psi(r) = r^{-1} R(r) Y_{lm}(r)$$

حيث $Y_{lm}(r)$ هي نوع من التوابع الخاصة المتعلقة بالمتحولين ϕ, θ وتسمى بالتوافقيات الكروية Spherical harmonics.

الجزء القطري (متعلق بـ r) من معادلة شرودنجر يكتب بالشكل:

$$(29) \frac{d^2 R}{dr^2} + k^2(r)R = 0$$

حيث

$$(30) k^2(r) = \frac{2m}{\hbar} \left[E - \frac{l(l+1)}{2mr^2} - V(r) \right]$$

بالمقارنة مع (25) نجد أن :

$$S = 0$$

أو بشكل عام: تعطى معادلة شرودنجر لجسيمة ذات كتلة m وتملك طاقة E ، بالشكل:

$$(31) \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$$

وبإجراء تغيير في المتحول : $\xi = x/a$ تأخذ المعادلة الصيغة:

$$(32) \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \frac{2ma^2 E}{\hbar^2} \psi = 0$$

وهي نفس المعادلة (25) ، حيث $k^2(x) = \frac{2ma^2 E}{\hbar^2}$ و $S=0$.

(راجع الجزء العملي من أجل حل هذه المعادلة).

يمكن حل معادلات من الشكل (25) باستخدام طرق مثل رنج-كوتا Runge-Kotta أو طرق التكامل المباشر ولكن في الفيزياء يكون لدينا شروطاً حدية تكون موضوعة على شكل قيود على المتحول ولذلك يكون حل المعادلة ابتداءً من شروط أولية غير كافٍ في هذه الحالة. وكذلك لدينا مسائل تسمى بمسائل القيم الخاصة مثل حساب السويات الطاقية من معادلة شرودنجر. هذه الطاقات يجب أن تحقق الشروط الحدية ويجب أن تمثل حلولاً فيزيائية مقبولة في نفس الوقت.

سنستعرض الآن بعض الطرق لحل معادلات من الشكل (25).

- خوارزمية نيمروف Numerov Algorithm :

هي طريقة عملية لمكاملة معادلات من الشكل (1)، لنبدأ بكتابة المشتق الثاني

لـ y باستخدام تقريب يعتمد ثلاث نقاط:

$$(33) \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{12} y_n'''' + O(h^6)$$

لاحظ أننا أخذنا جزءاً من الخطأ بإدخال الحد الذي يحتوي المشتق الرابع والخطأ المتبقي من الرتبة الثالثة (راجع المحاضرة الخاصة بالتفاضل العددي).

ومن المعادلة التفاضلية نستطيع كتابة المشتق من الرتبة الرابعة على الشكل:

$$(34) \quad y_n'''' = \frac{d^2}{dx^2} \left(-k^2 y + S \right) \Big|_{x=x_n} \\ = - \frac{(k^2 y)_{n+1} - 2(k^2 y)_n + (k^2 y)_{n-1}}{h^2} + \frac{S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}}{h^2}$$

بالتعويض في (33) وبإجراء بعض الترتيب:

$$(35) \quad \left(1 + \frac{h^2 12}{k_{n+1}^2} \right) y_{n+1} - 2 \left(1 - \frac{5h^2}{12} k_n^2 \right) y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{n-1}^2 \right) = \\ \frac{h^2}{12} (S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}) + O(h^6)$$

بحل هذه المعادلة من أجل y_{n-1} أو y_{n+1} نحصل على علاقة تكرارية لمكاملة باتجاه

متزايد أو باتجاه متناقص، والخطأ في المكاملة يكون من رتبة $O(h^6)$.

تطبيق:

حل معادلة شرودنجر من أجل بئر كموني من الشكل:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{other} \end{cases}$$

حيث $a = 1 \text{ \AA}$

الحل:

البرنامج المرفق في الجزء العملي الفصل الرابع يستخدم خوارزمية نيروف لمعادلة شرودنجر حيث يبدأ البرنامج من القيمة $k = 0.0$ و يحسب قيمة ابتدائية للتابع الموجي و يكامل المعادلة للحصول على k_1 و يضيف مقداراً صغيراً dk لـ k و يكامل مرة أخرى و في كل تكرار يضيف المقدار dk حتى تتغير إشارة التابع الموجي $1/$ عندهانعكس اتجاهها و نضيف مقداراً dk أصغر من المقدار السابق و هكذا حتى تتقارب العملية إلى الدقة المطلوبة (10^{-5} في هذا البرنامج).

استخدم $k = 0.0$ في مدخلات البرنامج و سيعطي البرنامج قيمة k_1 .
- قارن النتيجة التي حصلت عليها من البرنامج مع القيمة المعطاة بالعلاقة:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2.m.a^2}{\hbar^2} \cdot E_1}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2.m.a^2} \cdot n^2$$

- غير قيمة a و احسب k_1 مجدداً.
- ابدأ من قيمة $k > 3.14$ ما هي النتيجة التي تحصل عليها؟

انظر الفصل الرابع من الجزء العملي program22.

- القيم الخاصة لمعادلة الموجة:
ليكن لدينا وتر مشدود ذو توزيع متجانس لكثافة الكتلة. تكتب المعادلة التي تصف هذه الموجة والتي تعطي الشروط الحدية على الشكل:

$$(37) \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} = s^2 \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}$$

$$s^2 = \frac{T}{\rho} \quad \text{حيث:}$$

بفصل المتحولات نستطيع كتابة الجزء المتعلق بالمتحول x على الشكل:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = k^2\phi; \quad \phi(x=0) = \phi(x=1) = 0$$

وهو شبيه بالصيغة (1). حل هذه المعادلة يأخذ الشكل:

$$\phi_n \sim \sin n\pi x; \quad k_n = n\pi$$

إحدى الطرق لإيجاد الحل العددي لهذه المعادلة هو استخدام طريقة تكرارية تبدأ بقيمة تخمينية لـ k ونكامل المعادلة التفاضلية بطريقة مباشرة وباتجاه متزايد كما لو كانت مسألة قيمة ابتدائية، حتى نصل إلى النقطة ($x=1$) ونحسب قيمة $\phi(x=1)$ إذا كان الشرط الحدّي $\phi(x=1)=0$ غير محقق نغير العدد الموجي k بمقدار dk ونكرر التكامل المباشر مرة أخرى حتى تنعكس إشارة التابع $\phi(x)$ عندئذ نعكس جهة تزايد العدد k ونأخذ مجال dk أصغر من قبل وهكذا حتى تتقارب العملية إلى قيمة تحقق الشرط الحدّي.

انظر الفصل الرابع من الجزء العملي program23.

3- معادلة شرودنجر التابعة للزمن:

لدينا معادلة شرودنجر على الشكل:

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\right).H\psi = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) \quad (38)$$

يمكن الكتابة بالنشر:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t + dt) \approx \psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t) + \frac{\partial\psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t)}{\partial t}.dt \quad (39)$$

بتعويض قيمة $\left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)$ من المعادلة (I) في (II) نحصل على:

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t + dt) \approx \psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) H \psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t) dt \quad (40)$$

المعادلة السابقة هي معادلة تكرارية تمكننا من حساب التابع الموجي في لحظة ما إذا ما عرفنا التابع الموجي في لحظة سابقة، أي نستطيع حساب $\psi(r, t + dt)$ من $\psi(r, t)$ و نكرر الحساب من أجل $\psi(r, t + 2dt)$ و هكذا حتى نحسب التابع الموجي في اللحظة الزمنية المطلوبة.

هذه الطرق هي أساس الكثير من الطرق العددية في ميكانيك الكم و لكن تطبيقها يحتاج إلى إجراء حسابات مطولة على الحاسوب و ذلك لأننا نحتاج إلى حساب التابع الموجي في كل خطوة من أجل جميع الجسيمات في الجملة من أجل كل القيم r_N و كذلك يجب أن تكون dt صغيرة بما فيه الكفاية للحصول على نتائج ذات دقة مقبولة.

4- طريقة هارترى فوك في حساب البنى الذرية: Hartree- Fock Method

أثبت تقريب هارترى فوك أو (self consistent field) الحقل ذاتي الأنسجام أنه يعطي نتائج قريبة من التجربة في حساب خواص وبنية الذرات المتعددة الإلكترونات و الأيونات. في هذا التقريب يوصف كل إلكترون باستخدام تابع موجي خاص به (تابع يصف جسيمة واحدة) غير التابع الذي يصف الجملة بكاملها والذي يحقق المعادلة الشبيهة بمعادلة شرودنجر، الكمون الذي يستخدم في هذه المعادلة ينتج عن كل الإلكترونات المتبقية وبالتالي يعتمد على التوابع الموجية لهذه الإلكترونات. تعطي هذه

الطريقة مجموعة من معادلات القيم الخاصة والتي يمكن حلها بالطرق المذكورة في هذا الفصل ويعطي هذا الحل الطاقة الأرضية للذرة المدروسة.

يعطى تابع هاميلتون لـ N إلكترونات تتحرك حول نواة ذات شحنة Z متوضعة في المركز بالعلاقة:

$$(41) H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$$

تعتمد طريقة هارثري فوك على أن التابع الموجي الذي يمثل السوية الأرضية سيعطي قيمة متوقعة أصغرية لتابع هاميلتون:

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

وبحيث يحقق شرط التنظيم:

$$\int |\Psi|^2 d^N x = 1$$

وتأخذ طريقة هارثري فوك بمبدأ الاستبعاد لباولي Pauli exclusion principle عبر استخدام معين سليتر Slater Determinant في إنشاء التابع الموجي للجملية المدروسة.

حالة ذرة تمتلك إلكترونين فقط:

يمكن كتابة التابع الموجي للإلكترون واحد على الشكل :

$$\psi(x) = \frac{1}{(4\pi)^{1/2} r} R(r) \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

وبحيث يتحقق شرط التنظيم

$$(42) \int_0^{\infty} R^2(r) dr = 1$$

يمكن البرهان أن الطاقة تعطى بالعلاقة:

$$(43) E = 2 \times \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left(\frac{dR}{dr} \right)^2 dr + \int_0^\infty \left[-\frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{4} \Phi(r) \right] \rho(r) 4\pi r^2 dr$$

وكثافة الشحنات:

$$\rho(r) = 2 \frac{1}{4\pi r^2} R^2(r); \quad \int_0^\infty \rho(r) 4\pi r^2 dr = 2$$

أي تصبح معادلة بواسون لهذه الجملة على الشكل :

$$(44) \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi}{dr} \right) = -4\pi e^2 \rho$$

ويخضع الجزء القطري R للمعادلة:

$$(45) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2} \Phi(r) - \varepsilon \right] R(r) = 0$$

حل المسألة عددياً:

- 1- نبدأ من تخمين أول للتابع الموجي (مثلاً التابع الموجي لذرة الهيدروجين)
 - 2- نحل المعادلة (44) للحصول على الكمون الناتج عن التابع الموجي الابتدائي ونحسب الطاقة الكلية من العلاقة (43).
 - 3- نحسب التابع الموجي الجديد من المعادلة (45) و نقوم بتنظيم هذا التابع بحسب العلاقة (42).
 - 4- نحسب الكمون الناتج عن التابع الموجي الجديد ونكرر الخطوات 2 و 3 حتى تتقارب قيمة الطاقة إلى القيمة المطلوبة.
- يمكن تعميم الخطوات السابقة من أجل ذرة تحتوي على عدد N من الإلكترونات ولكن المسألة تصبح أكثر تعقيداً وتتطلب وقتاً أطول للحساب. عادة نستخدم وحدات الأنغستروم و الإلكترون فولت في مثل هذه الحسابات.

ونستطيع الحصول على الطاقة وعلى خواص طيفية أو ترموديناميكية للمادة المدروسة كما يمكن تعميم الطريقة لدراسة الجزئيات.

5 - المعادلات التفاضلية الجزئية:

المعادلات التفاضلية الجزئية هامة جدا في الفيزياء إذ تدخل في و صف الكثير من الظواهر الفيزيائية الهامة و تظهر باستمرار في مسائل الميكانيك و الكهرباء و المغنطيسية و جريان السوائل و في ميكانيك الكم، فيما عدا بعض الحالات البسيطة لا يمكن حل هذه المعادلات بالطرق التحليلية التقليدية.

الطريقة لحل هذه المسائل عدديا هي أن نوزع المتحول المدروس (درجة حرارة، كمون كهربائي، ...)

على عقد شبكة تغطي كافة المنطقة المدروسة و بذلك نكون قد حولنا المعادلة التفاضلية إلى مجموعة كبيرة من معادلات الفروقات و التي يمكن معالجتها باستخدام المصفوفات و لكن سيكون لدينا عدداً كبيراً من معادلات الفروقات بحسب عدد العقد التي اخترناها. أحد أشكال المعادلة التفاضلية الجزئية:

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\phi = S(x, y, z) \quad (46)$$

و تقسم المعادلات التفاضلية الجزئية إلى ثلاث أنواع المعادلات المكافئة Parabolic و الناقصية elliptic و الزائدية Hyperbolic.

تحتوي المعادلات المكافئة عموماً على مشتق من المرتبة الأولى من أجل أحد المتحولات و من المرتبة الثانية من أجل باقي المتحولات مثل معادلة الانتشار Diffusion و معادلة شرودنجر التابعة للزمن. المعادلات الناقصية Elliptic تحتوي على مشتق من المرتبة الثانية من أجل كل المتحولات المستقلة و تكون كلها من نفس الإشارة إذا ما جمعت في نفس الطرف من المعادلة مثل معادلة بواسون و معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن. المعادلة

الزائدية Hyperbolic تحتوي على مشتقات من المرتبة الثانية لها أشارات مختلفة مثل معادلة وتر مشدود.

و بشكل عام يمكن رياضيا تعريف المعادلات التفاضلية الجزئية بالشكل:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + C \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + D \left(x, t, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial t} \right) = 0$$

حيث $u(x, t)$ يمكن تعريف المميز على الشكل:

$$B^2 - 4.A.C$$

و تصنف المعادلات التفاضلية بحسب قيمة المميز عند نقطة ما وفق ما يلي:

1- إذا كانت قيمة المميز عند النقطة (x_o, t_o) موجبة،

$$B^2(x_o, t_o) - 4A(x_o, t_o).C(x_o, t_o) > 0$$

تكون المعادلة زائدية Hyperbolic.

2- إذا كانت قيمة المميز عند النقطة (x_o, t_o) معدومة،

$$B^2(x_o, t_o) - 4A(x_o, t_o).C(x_o, t_o) = 0$$

تكون المعادلة مكافئية Parabolic.

3- إذا كانت قيمة المميز عند النقطة (x_o, t_o) سالبة،

$$B^2(x_o, t_o) - 4A(x_o, t_o).C(x_o, t_o) < 0$$

تكون المعادلة ناقصية Elliptic.

المعادلة (46) تمثل معادلة ناقصية حيث يمكن أن تكون ϕ الكمون الكهربائي و $S(x, y, z)$ تتعلق بكثافة الشحنات. نحتاج لحل هذه المعادلة لمعرفة الشروط الحدّية و التي يمكن أن تأخذ أحد شكلين:

1- شروط ديرينجليزية Dirichlet و التي تحدد قيمة التابع ϕ على سطح (أو سطوح

(معين.

2- شروط نيومان Neumann و التي تعطي مشتقات التابع ϕ عند سطوح معينة.

يمكن في بعض الحالات أن تكون الشروط الحدّية هي مجموع خطي للشرطين السابقين حيث نعرف قيم التابع ϕ و مشتقه عند بعض السطوح. مسائل القيم الخاصة التي نتعامل معها يمكن أن تأخذ الشكل:

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\phi + V(x, y, z)\phi = \varepsilon\phi \quad (47)$$

بالإضافة إلى الشروط الحدّية، مثل هذه المسألة يمكن أن تنتج عن معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن حيث ϕ هو التابع الموجي و V يتعلق بالكمون و ε تتعلق بالقيم الخاصة و حل هذه المعادلة يتم بإيجاد القيم الخاصة ε_i و التوابيع الخاصة المقابلة لها ϕ_i و التي تحقق المعادلة (44) و الشروط الحدّية.

أول خطوة للحل هي كتابة المعادلة (46) في طريقة مناسبة للحل العددي، نعرف شبكة من النقاط تغطي المنطقة المراد دراستها من المستوي (x, y) و لنأخذ المسافات بين عقد هذه الشبكة h و لنفترض للسهولة أنه متساوٍ من أجل كل من الاتجاهين أي من أجل واحدة المساحة لدينا $N \times N$ نقطة و بحيث يمكن تسمية كل من النقاط باستخدام الدليلين (i, j) و يمكن أن نكتب التابع ϕ على الشكل: $\phi_{ij} = \phi(x_i, y_j)$ و كذلك بالنسبة لـ S_{ij} ، عندئذ يمكن أن نكتب المعادلة (46) باستخدام تعريف المشتق من المرتبة الثانية باستخدام ثلاث نقاط، على الشكل:

$$-\left[\frac{\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j} - 2\phi_{ij}}{h^2} + \frac{\phi_{ij+1} + \phi_{ij-1} - 2\phi_{ij}}{h^2}\right] = S_{ij} \quad (48)$$

أو باستخدام صيغة مختصرة:

$$-(\delta_i^2 \phi)_{ij} + (\delta_j^2 \phi)_{ij} = h^2 S_{ij} \quad (49)$$

حيث δ_i^2 هو مؤثر يعرف على الشكل:

$$(\delta_i^2 \phi)_{ij} \equiv \phi_{i+1j} + \phi_{i-1j} - 2\phi_{ij} \quad (50)$$

و بالمثل من أجل δ_j^2 .

الصيغة المعتادة للمعادلة المكافئة التي نصادفها في المسائل الفيزيائية هي معادلة الانتشار Diffusion

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (D \cdot \nabla \phi) + S \quad (51)$$

حيث D معامل الانتشار و S المنبع Source، و كذلك معادلة شرودنجر التابعة للزمن:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V\phi \quad (52)$$

حيث V هو تابع الكمون.

في مثل هذه المسائل لدينا قيم ابتدائية و نريد حساب قيم التابع في لحظة زمنية لاحقة و يكون لدينا بعض الشروط الحدية كأن يكون التابع الموجي معدوم عند نقطة معينة. لنعالج مسألة الانتشار في بعد واحد، لنأخذ x ضمن المجال $(0,1)$ و لنفترض وجود شروط ديرخلية و التي تعطي قيمة التابع عند نقاط البداية و النهاية، تكتب المعادلة (51) على الشكل:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + S(x,t) \quad (53)$$

نقرب المشتقات بالنسبة لإحداثي المكان بـ "الفروقات المنتهية" Finite Difference على شبكة من $N+1$ نقطة تفصل بينها مسافات $h=1/N$ ، و نقرب المشتق على الزمن بأبسط علاقة تعطي المشتق من المرتبة الأولى، باستخدام فاصل زمني Δt نستطيع أن نكتب المعادلة (50) على الشكل:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{h^2} (\delta^2 \phi^n)_i + S_i^n \quad (54)$$

حيث $\phi^n \equiv \phi(t_n)$ و $t_n = n \cdot \Delta t$

عند النقاط $i=1$ و $i=N-1$ سيدخل في المعادلة شروط ديرخلية ϕ_0 و ϕ_N .

من المعادلة (54) إذا عرفنا ϕ في لحظة ما نستطيع حساب ϕ في لحظة لاحقة، و نستطيع كتابة المعادلة على الشكل:

$$\phi^{n+1} = (1 - H\Delta t)\phi^n + S^n.\Delta t \quad (55)$$

حيث المؤثر H يعرف بالشكل:

$$(H\phi)_i \equiv -\frac{1}{h^2}(\delta^2\phi)_i$$

لنطبق هذه الخطوات على مثال بسيط. لنأخذ $S=0$ و الشروط الحدية $\phi(0)=\phi(1)=0$ و لنفترض أنه لدينا الشروط الابتدائية على شكل تابع غوص مركزه عند $x=1/2$.

$$\phi(x, t=0) = e^{-20(x-1/2)^2} - e^{-20(x-3/2)^2} - e^{-20(x+1/2)^2}$$

حيث الحدان الثاني و الثالث يضمنان تحقق الشروط الحدية، نريد إيجاد قيم ϕ في لحظات زمنية لاحقة. برنامج الفورتران التالي يطبق المعادلة (55) لحل هذه المسألة باستخدام شبكة ذات $N = 25$.

```

PARAMETER (NSTEP=25)
DIMENSION PHI(0:NSTEP)
GAUSS(X,T)=EXP(-20.*(X-.5)**2/(1.+80*T))/SQRT(1+80*T)
EXACT(X,T)=GAUSS(X,T)-GAUSS(X-1.,T)-
GAUSS(X+1.,T)
H=1./NSTEP
50 PRINT*, 'ENTER TIME STEP AND TOTLA TIME (0 TO
STOP)'
READ*, DT, TIME
IF (DT.EQ.0.) STOP
NITER=TIME/DT
DTH=DT/H**2

```

```

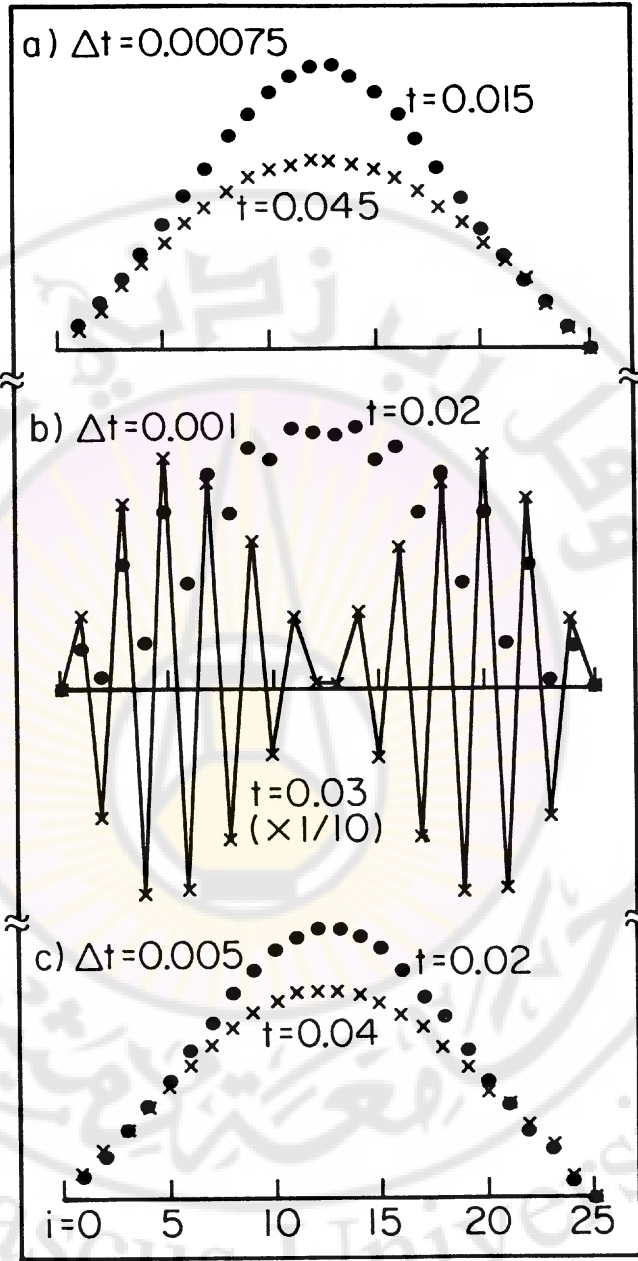
T=0.
PHI(0)=0
PHI(NSTEP)=0.
DO 10 IX=1,NSTEP-1
  PHI(IX)=EXACT(IX*H,T)
10 CONTINUE
DO 20 ITER=1,NITER
  POLD=0.
  DO 30 IX=1,NSTEP-1
    PNEW=PHI(IX)+DTH*(POLD+PHI(IX+1)-2*PHI(IX))
    POLD=PHI(IX)
    PHI(IX)=PNEW
30 CONTINUE
  IF (MOD(ITER,10).EQ.0) THEN
    PRINT*, 'ITERATION=',ITER,'TIME=',ITER*DT
    T=ITER*DT
    DO 40 IX=1,NSTEP-1
      DIFF=PHI(IX)-EXACT(IX*H,T)
      PRINT*, 'PHI=',PHI(IX), 'ERROR=',DIFF
40 CONTINUE
  END IF
20 CONTINUE
GO TO 50
END

```

نتائج هذا البرنامج موضحة بالشكل من أجل خطوة زمنية 0.00075 و تتفق النتائج مع الحل التحليلي:

$$\phi(x,t) = \tau^{-1/2} \left[e^{-20(x-1/2)^2/\tau} - e^{-20(x-3/2)^2/\tau} - e^{-20(x+1/2)^2/\tau} \right]$$

حيث $\tau = 1 + 80t$.



الشكل (1) مقارنة بين النتائج التحليلية و النتائج العددية من البرنامج

بعض الأمثلة على المعادلات التفاضلية الجزئية في الفيزياء:

1- معادلة لابلاس:

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (56)$$

تظهر هذه المعادلة في دراسة الكهرباء و المغنطيسية و في تحريك السوائل و في دراسة انتشار الحرارة و الثقالة.

2- معادلة بواسون

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (56)$$

و تظهر في دراسة مسائل الكهرباء و المغنطيسية.

3- معادلة هلمهولتز

$$\nabla^2 \psi \pm k^2 \psi = 0 \quad (56)$$

و تعبر عن معادلة انتشار مستقلة عن الزمن، أو انتشار أمواج مرنة في وسط صلب أو انتشار الأمواج الصوتية.

4- و المعادلة:

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (56)$$

و هي معادلة انتشار الأمواج.

5- و يمر أيضا في الفيزياء معادلات شبيهة بالمعادلات السابقة و لكن باستخدام

مؤثر اللابلاسيان \square عوضاً عن مؤثر نيلا ∇ . مثلاً:

$$\square^2 \psi = 0 \quad (57)$$

أو معادلة كلاين -جوردون

$$\psi = k^2 \psi \square^2 \quad (58)$$

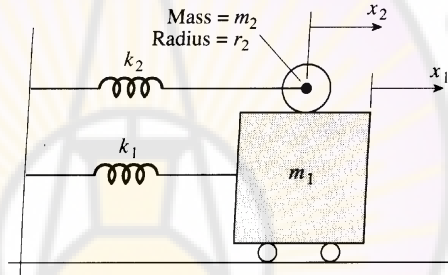
انظر الملحق من أجل ملخص للطرق العددية في حل المعادلات التفاضلية.

مسائل و تطبيقات

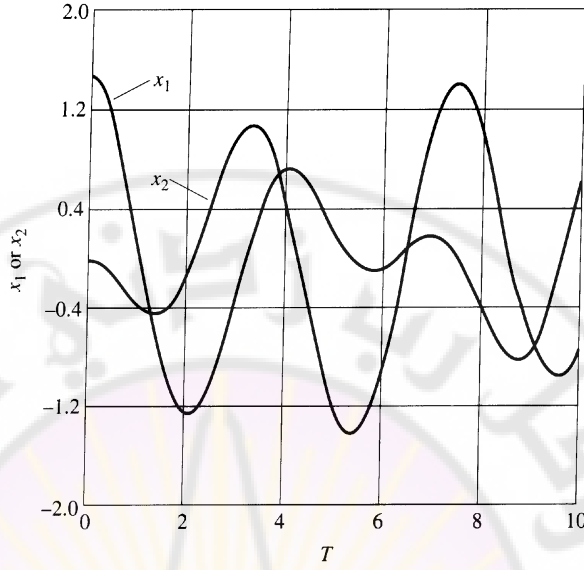
مسألة 1:

من أجل الجملة الميكانيكية المبينة في الشكل، بين أن المعادلات التفاضلية للحركة هي :

$$\begin{aligned} (m_1 + 0.5m_2) \frac{d^2 x_1}{dt^2} - 0.5m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} + k_1 x_1 &= 0 \\ -0.5m_2 \frac{d^2 x_1}{dt^2} + 1.5m_2 \frac{d^2 x_2}{dt^2} + k_2 x_2 &= 0 \end{aligned}$$

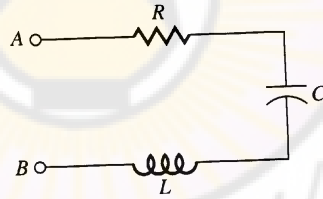


من أجل $m_1 = m_2 = 5$ و $k_1 = k_2 = 15$ و $x_1(0) = 1.5$ و من أجل $x_2 = \frac{dx_1}{dt} = \frac{dx_2}{dt} = 0$ عند $t = 0$. كامل المعادلات على المجال $t = 0$ إلى $t = 10$ و قارن عدة نقاط من الشكل.



مسألة 2:

في الدارة الكهربائية المبينة بالشكل و التي تحتوي على مقاومة و مكثفة و ملف تحريضي،
فرق الكمون بين النقطتين A و B يعطى بالعلاقة:



$$V_{AB} = L \frac{di}{dt} + Ri + \frac{q}{C} .$$

بالمفاضلة بالنسبة للزمن علما بأن $i = \frac{dq}{dt}$

$$L \frac{d^2i}{dt^2} + R \frac{di}{dt} + \frac{1}{C} i = \frac{dV}{dt} .$$

إذا كان الكمون V_{AB} صفراً في البداية ثم رفع إلى 15V و بقي دون تغيير أي $dV/dt = 0$ سيمر تيار في الدارة. استخدم طريقة عددية لحل هذه المعادلة و أوجد
تغير التيار مع الزمن ضمن المجال [0,0.1 sec] من أجل:

$$R = 4.7 \Omega$$

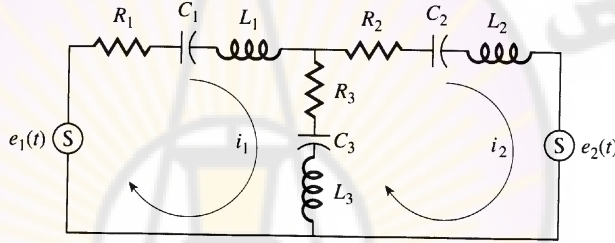
$$C = 1000 \mu F$$

$$L = 50 mH$$

استخدم $\Delta t = 0.002 \text{ sec}$, و احسب قيمة الكمون بين طرفي المكثفة في هذه الفترة الزمنية، قارن الحل مع الحل التحليلي للمعادلة.

مسألة 3:

باستخدام قوانين كيرشوف يمكن أن نكتب المعادلات التفاضلية التي تصف الدارة المبينة بالشكل



$$(L_1 + L_3) \frac{d^2 i_1}{dt^2} + (R_1 + R_3) \frac{di_1}{dt} + \left(\frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_3} \right) i_1 - L_3 \frac{d^2 i_2}{dt^2} - R_3 \frac{di_2}{dt} - \frac{1}{C_3} i_2 = e_1'(t),$$

$$(L_2 + L_3) \frac{d^2 i_2}{dt^2} + (R_2 + R_3) \frac{di_2}{dt} + \left(\frac{1}{C_2} + \frac{1}{C_3} \right) i_2 - L_3 \frac{d^2 i_1}{dt^2} - R_3 \frac{di_1}{dt} - \frac{1}{C_3} i_1 = e_2'(t).$$

حل المعادلتين التفاضليتين من أجل التيارين i_1 و i_2 بين المجال $t = 0$ و $t = 0.2 \text{ sec}$ إذا علمت أن

$$e_1(t) = 100 \sin(120\pi t) \quad \text{و} \quad e_2(t) = 0$$

$$R_1 = 22 \text{ ohms}, \quad C_1 = C_2 = C_3 = 10 \mu F,$$

$$R_2 = 4.7 \text{ ohms}, \quad L_1 = 2.5 \text{ mH},$$

$$R_3 = 47 \text{ ohms}, \quad L_2 = L_3 = 0.5 \text{ mH}.$$

مسألة 4:

أنبوب معدني اسطواني يستخدم لضخ سائل ساخن. المعادلة التفاضلية التي تعطي درجة حرارة جدران المعدن بدلالة نصف القطر:

$$r \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{du}{dr} = 0$$

حيث r نصف القطر و u درجة الحرارة.

أوجد درجة الحرارة إذا علمت أن نصف القطر الداخلي للأنبوب 1 cm و نصف القطر الخارجي

2 cm و درجة حرارة السائل ضمن الأنبوب 540°C و درجة حرارة الوسط الخارجي 20°C .

مسألة 5:

في المسألة السابقة إذا قمنا بلف مادة عازلة حول الأنبوب بحيث يتعلق تدرج الحرارة عند المحيط الخارجي du/dr بفرق درجة الحرارة بين المحيط الخارجي و الوسط المحيط:

$$\frac{du}{dr} = 0.083[u(2) - 20]$$

حل المسألة السابقة بإضافة هذا الشرط الحدّي.

مسألة 6:

استخدم برنامج حل معادلة بواسون لحل المعادلة:

$$\nabla^2 u = x.y(x-2)(y-2)$$

في المنطقة

$$0 \leq x \leq 2$$

$$0 \leq y \leq 2$$

حيث $u = 0$ من أجل كل الحدود عدا $y = 0$ حيث تأخذ القيمة: $u = 1.0$.

مسألة 7:

عدل برنامج حل معادلة بواسون بحيث يمكنك معالجة شروط حدية من الشكل:

$$au + b \frac{\partial u}{\partial x} = c$$

$$a'u + b' \frac{\partial u}{\partial y} = c'$$

استخدم هذا البرنامج المعدل لحل المسألة السابقة من أجل الشرط الحدي:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 1 \quad \text{عند} \quad y = 0$$

مسألة 8:

وتر مهتز بوجود قوة مخمدة تعاكس حركته يخضع للمعادلة:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \frac{Tg}{w} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - B \frac{\partial y}{\partial t}$$

حيث B هي شدة القوة المخمدة، أوجد حل هذه المعادلة إذا علمت أن طول الوتر 5 ft

و $T=20$ lb و $w=0.1$ lb/ft و $B=2.0$ و الشروط الابتدائية للمسألة:

$$y(x)|_{t=0} = \frac{x}{3}, \quad 0 \leq x < 3,$$

$$y(x)|_{t=0} = \frac{5}{2} - \frac{x}{2}, \quad 3 \leq x < 5,$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} \Big|_{t=0} = x(x-5).$$

الفصل الخامس

تحويلات فورييه و تطبيقاتها

Fourier Transforms and its Applications

رأينا سابقاً أنه يمكن أن نمثل أي تابع مستمر على شكل مجموع لانغائي لسلسلة، سلسلة تايلور مثلاً ورأينا أهمية سلسلة تايلور وتطبيقاتها العددية المختلفة في حساب المشتقات العددية على سبيل المثال. على الرغم من أن سلسلة تايلور مفيدة للغاية بشكل عام ولكن هناك حالات لا يصلح معها استخدام سلسلة تايلور. أولى هذه الحالات هي إذا كان التابع دورياً (مثل التتابع الجيبية) إذ نأخذ في سلسلة تايلور نقطة وحيدة ومميزة Unique ونأخذ المنشور في جوار هذه النقطة ولكن إذا كان التابع دورياً فإن هذه النقطة ماثلة لنقطة أخرى تبعد عنها مسافة دور واحد، وهذه الخاصة الدورية لا تؤخذ بعين الاعتبار في سلسلة تايلور. الحالة الثانية: يجب على التابع الذي نريد كتابته على شكل سلسلة تايلور أن يكون مستمراً وكذلك جميع مشتقاته مستمرة. هذه الشروط ناتجة عن اشتقاق سلسلة تايلور من سلسلة ماكلوران MacLauran والتي تعبر عن تحليلية التابع في ساحة عقدية، أي في كثير من الحالات لا يمكن استخدام سلسلة تايلور لوصف تابع يحتوي على قفزات في قيمه أو حتى في مشتقاته، ولكن في كثير من الحالات التطبيقية لدينا تابعاً معرّفاً على شكل مجموعة من النقاط فقط.

أي المشكلة تاريخياً هي في مفهوم التابع نفسه ، من وجهة نظر أولر Euler التابع يجب أن يكون قابلاً للتمثيل على شكل منحني أملس ومتصل وهذا يختلف تماماً مع المفهوم الحديث والذي يربط بين مجموعة من نقاط $\{x\}$ مع عناصر مجموعة أخرى $\{f(x)\}$. الانتقال من المفهوم القديم إلى المفهوم الحديث تم بفضل الرياضيين كوشي Cauchy وريمان Reimann وكذلك بفضل فورييه الذي كان يعتقد بأن الرياضيات يجب أن تمتلك تطبيقات في مسائل حقيقية و واقعية لذلك نجد الكثير من المسائل التطبيقية في الفيزياء تعتمد بشكل كبير على تحليل فورييه.

1-سلسلة فورييه:

استطاع كل من دالامبير Dalember وأولر Euler حل معادلة وتر مهتز باستخدام تابعين مختلفين مختارين بصورة عشوائية ولكن برنولي أوجد حلاً بدلالة حدود سلسلة لا منتهية من التوابع المثلثية. وبما أن التوابع المثلثية هي توابع دورية فإن هذا الحل بدا على أنه حالة خاصة وليس صيغة عامة لحل المسألة. ولكن فورييه اقترح أن أي تابع يمكن أن يكتب على الشكل:

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nt) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nt) \quad (1)$$

واضح أن العلاقة الأخيرة يمكن أن تعبر عن تابع دوري وخلافاً لسلسلة تايلور يمكن أن تمثل توابع غير مستمرة أو ذات مشتقات غير مستمرة. توصل فورييه إلى هذه النتيجة من خلال عمله على حل مسائل انتشار الحرارة وتمكن ديريخليه Deirichleih في عام 1828 من برهان ذلك ومن وضع الشروط لتقارب سلسلة فورييه.

نظرية ديريخليه: إذا كان $f(t)$ تابعاً دورياً ذا دور 2π ، وإذا كان يمتلك عدداً منته من نقاط الحدية العظمى و الأصغرية و عدداً منتهٍ من نقاط عدم الاستمرار وإذا كان

التكامل $\int_{-\pi}^{+\pi} f(t)dt$ منتهياً ، عندئذ تتقارب سلسلة فورييه إلى قيمة $f(t)$ عند النقاط التي يكون عندها $f(t)$ مستمرا و عند المجالات المتقطعة إلى القيمة المتوسطة عند طرفي هذا المجال.

من أجل التطبيقات الفيزيائية سنعتبر أن سلسلة فورييه تتقارب دائما. رياضيا تشكل توابع الـ \sin والـ \cos في سلسلة فورييه مجموعة كاملة و متعامدة complete orthogonal set ولذلك يمكن استخدامها لتمثيل أي تابع، وهذه التوابع متعامدة في المجال 2π وتعطى علاقات التعامد orthogonality بالشكل:

$$(2) \int_{-\pi}^{\pi} \sin(mt) \sin(nt) dt = \begin{cases} \pi \delta_{m,n} & m \neq 0 \\ 0 & m = 0 \end{cases}$$

$$(3) \int_{-\pi}^{\pi} \cos(mt) \cos(nt) dt = \begin{cases} \pi \delta_{m,n} & m \neq 0 \\ 2\pi & m = n = 0 \end{cases}$$

ومن أجل قيم صحيحة لـ m و n .

$$(4) \int_{-\pi}^{\pi} \sin(mt) \cos(nt) dt = 0$$

باستخدام علاقات التعامد السابقة نستطيع حساب الأمثال في سلسلة فورييه العلاقة (1):

$$(5) a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(t) \cos(nt) dt$$

$$(6) b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(t) \sin(nt) dt$$

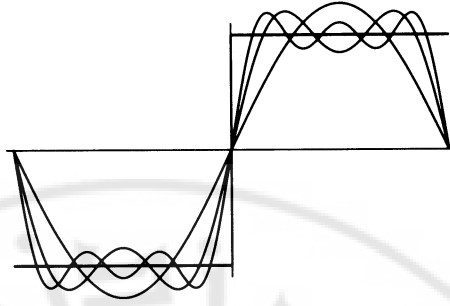
مثال: لدينا التابع

$$(7) f(t) = \begin{cases} -1, & t < 0 \\ +1, & t > 0 \end{cases}$$

بما أن التابع فردي فإن التكاملات في العلاقة (5) معدومة. وتبقى لدينا العلاقة (6) فقط:

$$\begin{aligned} (8) b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 (-1) \sin(nt) dt + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} (+1) \sin(nt) dt \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin(nt) dt = \frac{2}{n\pi} [1 - \cos n\pi] \\ (9) &= \begin{cases} 0, & n = 2, 4, 6, \dots, \\ \frac{4}{n\pi}, & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \end{aligned}$$

في معظم التطبيقات العملية يلزمنا فقط عدد منتهٍ من حدود سلسلة فورييه. وبما أن توابع الـ \sin والـ \cos في سلسلة فورييه تمثل مجموعة متعامدة يمكن تمثيل التوابع باستخدامها. حيث تمثل الأمثال في سلسلة فورييه أفضل تقريب ممكن للتابع الأصلي (بشكل مشابه لطريقة أصغر المربعات) وكلما احتفظنا بحدود أكثر زادت الدقة في تمثيل التابع. انظر الشكل (1). إذا كان التابع المدروس مستمراً فإن التقريب سوف يتأرجح حول قيم هذا التابع وإذا احتفظنا بحدود أكثر من سلسلة فورييه تصغر قيمة التأرجح ويقترّب من التابع الأصلي أما إذا كان التابع غير مستمر في بعض المجالات فإن سلسلة فورييه ستعطي قيمة وسطية عند نقطة عدم الاستمرار بين طرفي هذا المجال ويبقى التأرجح عند مجال عدم الاستمرار حتى مع الاحتفاظ بحدود أكثر من السلسلة تسمى هذه الظاهرة بتجاوز الحد overshoot على الرغم من هذه الظاهرة تذكر أن سلسلة تايلور لا يمكن استخدامها إطلاقاً في حالة عدم التعيين.



الشكل (1) ظاهرة جيبس Gibbs overshoot

تمرين 1:

ادرس التشويش المتجاوز الحد overshoot مع ازدياد عدد الحدود في سلسلة فورييه. ناقش التقريب في جوار عدم التعيين $0 \leq t \leq 0.1$ و ذلك بأخذ عدد من الحدود مثلا 10,20,30,40,50 حد في السلسلة. تسمى ظاهرة بقاء التشويش بظاهرة جيبس Gibbs phenomenon.

كمثال آخر لدينا التابع:

$$f(t) = |t| \quad -\pi \leq t \leq \pi$$

لدينا الحدود التي تحتوي على تابع الـ \cos فقط من سلسلة فورييه لأن هذا التابع زوجي

تمرين 2:

احسب أمثال سلسلة فورييه من أجل التابع $f(t) = |t|$ ، ادرس تقارب السلسلة و ذلك برسم التقريب في المجال $-\pi \leq t \leq \pi$ و ذلك بأخذ $N = 2,4,6,8,10$ و ارسم التابع الأصلي للمقارنة.

على الرغم من أن معظم التطبيقات العملية تتم باستخدام توابع حقيقية إلا أن مفهوم سلسلة فورييه هو مفهوم عام ويمكن تطبيقه على التوابع العقدية. وفي كثير من الأحيان

يكون من الأفضل كتابة توابع الـ \sin والـ \cos في سلسلة فورييه بشكلهما العقدي حيث تأخذ المعادلة (6-1) الشكل :

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{int} \quad (10)$$

حيث :

$$c_n = \begin{cases} (a_n - ib_n)/2, & n > 0, \\ a_0/2, & n = 0, \\ (a_{|n|} + ib_{|n|})/2, & n < 0. \end{cases} \quad (11)$$

وبالطبع يمكن الحصول على c_n من العلاقة :

$$(12) c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(t) e^{-int} dt.$$

2- تحويلات فورييه :

تفيدنا سلسلة فورييه في تمثيل التوابع فوق منطقة محددة أو فوق مجال لانهاضي إذا كان التابع دورياً أما تحويل فورييه فيفيد في تمثيل تابع غير دوري على مجال لا نهائي.

لنبدأ من تابع دوري على المجال $[-T, T]$ ولنأخذ سلسلة فورييه لهذا التابع بعد إجراء

$$t = \frac{\pi t}{T}$$

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi/T} \quad (13)$$

و تعطى الأمثال بالعلاقة:

$$c_n = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(t) e^{-in\pi/T} dt \quad (14)$$

يمكن أن نعرف الترددات "المتقطعة" التي تظهر في المجموع على الشكل:

$$\omega = \frac{n\pi}{T} \quad (15)$$

ويكون الفرق بين الترددات المتعاقبة هو :

$$\Delta\omega = \frac{\pi}{T} \quad (16)$$

وتكتب سلسلة فورييه عندئذ على الشكل:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\Delta\omega t} \quad (17)$$

حيث:

$$c_n = \frac{\Delta\omega}{2\pi} \int_{-T}^T f(t) e^{-in\Delta\omega t} dt \quad (18)$$

لنعرف المقدار

$$c_n = \frac{\Delta\omega}{\sqrt{2\pi}} g(n\Delta\omega) \quad (19)$$

ونستطيع الكتابة

$$g(n\Delta\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-T}^T f(t) e^{-in\Delta\omega t} dt \quad (20)$$

وبكتابة التابع $f(t)$ بدلالة التابع g :

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta\omega g(n\Delta\omega) e^{in\Delta\omega t} \quad (21)$$

بأخذ النهاية $T \rightarrow \infty$ يصبح المجموع السابق مستمراً ونستطيع إعادة الصياغة بدلالة المتحول ω على شكل تكامل:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (22)$$

و

$$g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (23)$$

نعرف المقدار $g(\omega)$ على أنه تحويل فورييه للتابع $f(t)$

$$F[f(t)] = g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (24)$$

وبالإمكان تعريف تحويل فورييه العكسي :

$$F^{-1}|g(\omega)| = f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (25)$$

بحسب التعريف الذي اتبعناه، العامل 2π موزع بشكل متناظر بين التحويل والتحويل المعاكس، ولكن يجب الانتباه إلى أن هذا الخيار هو مسألة اصطلاحية و تختلف في بعض الأحيان في بعض المراجع.

تمرين 3:

اكتب برنامجاً لحساب تحويل فورييه عددياً من أجل التابع:

$$f(t) = \begin{cases} a(1-a|t|) & |t| < \frac{1}{a} \\ 0 & |t| > \frac{1}{a} \end{cases}$$

حيث $a = 10$ من أجل القيم الموجبة و السالبة لـ ω . أوجد الحل التحليلي للتابع و قارن النتيجة مع الحساب العددي.

تمرين 4:

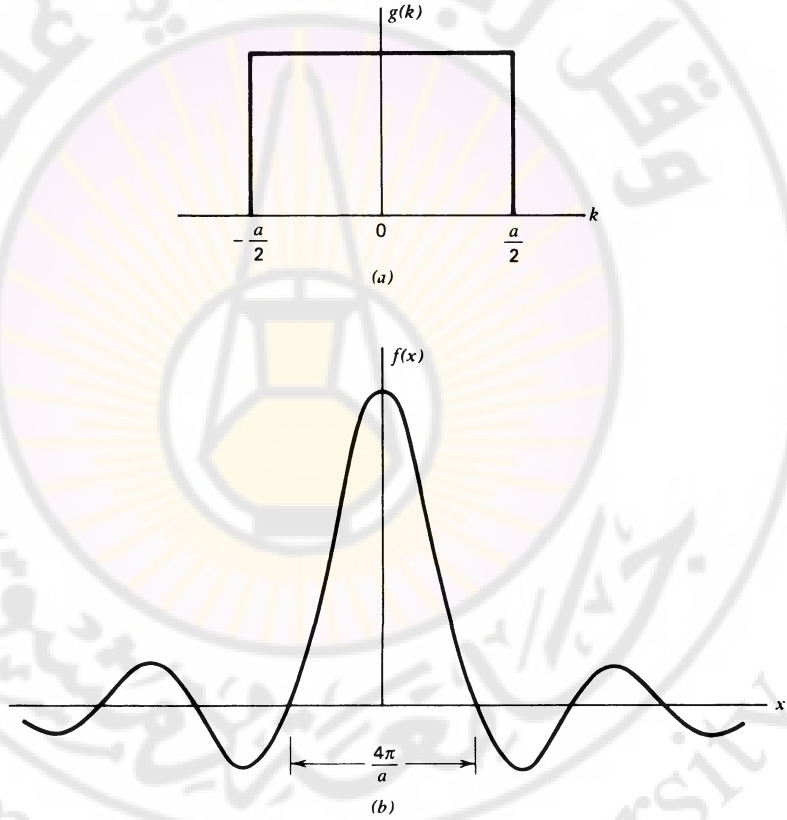
استعمل التابع الموجود في التمرين السابق و احسب تحويل فورييه من أجل $a = 2, 4, 6, 8, 10$ و ارسم طويلة التابع $|g(\omega)|$.

يستخدم تحويل فورييه كثيراً في الفيزياء، فعلى سبيل المثال تمثل الحزمة الموجية التي تعبر عن جسيمة في ميكانيك الكم بعلاقة من الشكل (24) وكذلك يرتبط التابع الموجي $\psi(x, t)$ في صياغة شرودنجر بالتابع الموجي في صياغة هايزنبرغ $\psi(p, t)$ بتحويلات فورييه من الشكل :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p) e^{ixp} dp$$

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ixp} dx$$

كما يستخدم تحويل فورييه بشكل واسع في الضوء الفيزيائي ومعالجة الإشارة والصور وفي التحليل الطيفي و في التطبيقات الجيوفيزيائية وغيرها.



الشكل (2) العلاقة بين الحزمة الموجية وتحويل فورييه لها من أجل حزمة موجية مربعة

3- خواص تحويلات فورييه:

هناك تناظر كبير في تحويلات فورييه كما أن التحويلات تمتلك خواص أساسية عديدة وذات أهمية كبيرة في التطبيقات. أهم هذه الخواص هي أن تحويلات فورييه خطية أي إذا كان $f_1(t)$ و $f_2(t)$ تابعا لهما تحويل فورييه $g_1(\omega)$ و $g_2(\omega)$ فإن تحويل فورييه لـ $f_1(t) + f_2(t)$ يأخذ الشكل:

$$\begin{aligned} g(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [f_1(t) + f_2(t)] e^{-i\omega t} dt \\ g(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(t) e^{-i\omega t} dt + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_2(t) e^{-i\omega t} dt \\ (26) \quad g(\omega) &= g_1(\omega) + g_2(\omega) \end{aligned}$$

خاصة أخرى هي علاقة الرفع scaling relation إذا كان لدينا التابعان $g(\omega)$ و $f(t)$ و كان أحدهما تحويل فورييه للآخر وإذا كانت α عدداً موجباً فإن :

$$\begin{aligned} F[f(\alpha t)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha t) e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} f(t') e^{-i\omega t' / \alpha} dt' \\ (27) \quad &= \frac{1}{\alpha} g\left(\frac{\omega}{\alpha}\right), \quad \alpha > 0 \end{aligned}$$

حيث $t' = \alpha t$. و لكن إذا كانت α سالبة فإن حدود التكامل سوف تنقلب وباستخدام نفس التعويض نحصل على:

$$\begin{aligned} F[f(\alpha t)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\alpha} \int_{\infty}^{-\infty} f(t') e^{-i\omega t' / \alpha} dt' \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} f(t') e^{-i\omega t' / \alpha} dt' \\ &= -\frac{1}{\alpha} g\left(\frac{\omega}{\alpha}\right), \quad \alpha < 0 \end{aligned} \quad (28)$$

وبشكل عام يمكن دمج العلاقتين السابقتين و الكتابة بشكل عام:

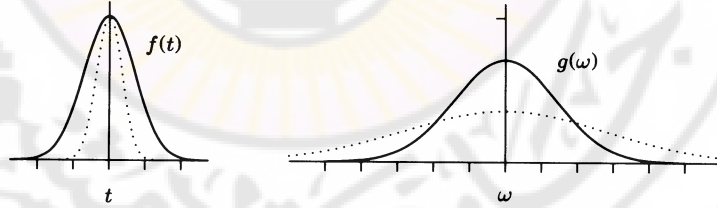
$$(29) F|f(\alpha t)| = \frac{1}{|\alpha|} g\left(\frac{\omega}{\alpha}\right)$$

تمرين:

برهن أنه يمكن الحصول على علاقة مشابهة لـ (29) من أجل تحويل فورييه العكسي.

$$(30) F^{-1}|g(\beta \omega)| = \frac{1}{|\beta|} f\left(\frac{t}{\beta}\right)$$

المعادلتان (29) و (30) تسميان علاقتي التعديل scaling relations و هما ذات أهمية من أجل فهم تحويلات فورييه. في التمرين (4) وجدنا أنه إذا أصبحت $f(t)$ أعرض فإن $g(\omega)$ تصبح أضيق. و هو ما تعبر عنه علاقات الرفع. لنأخذ التابع $f(\alpha t)$ الموضح في الشكل (2)، إذا ازدادت قيمة α يصبح التابع أضيق بينما بنفس الوقت يصبح تحويل فورييه لهذا التابع أعرض.



الشكل (3) خاصة الرفع لتحويلات فورييه

لنتحرى هذه الخاصة بشكل أكبر ولنأخذ كمثال تابعاً بسيطاً هو تابع الـ \sin مثلاً بمتحول واحد هذا التابع يمتد على كل الفضاء إذا أضفنا تابع \sin آخر ذا تردد مناسب

للتابع الأول فإن المجموع سوف يكون معدوماً في بعض المناطق من الفضاء ويكون ذا قيمة تساوي إلى المجموع في مناطق أخرى.

لنأخذ مثلاً بسيطاً تابع الـ \sin ذا التردد المحدد و الذي سيمتد على كامل الفراغ و لكن إذا أضفنا تابع \sin آخر بتردد مناسب للتابع الأول فإن المجموع يمكن أن يكون معدوماً في بعض المناطق و يكون ذا قيمة عبارة عن مجموع التابعين في مناطق أخرى. باستخدام حدود قليلة من توابع الـ \sin و \cos ستكون إمكانيتنا في الحصول على أشكال مختلفة من التوابع محدودة، سنحصل على الشكل العام للتابع ولكن هذا التقريب سوف يمتلك اهتزازات حول القيمة الحقيقية للتابع. أي نحتاج إلى عدد كبير من الحدود حتى نستطيع إلغاء جميع الترجحات و الحصول على القيمة الدقيقة للتابع المطلوب، أي الغرض من الحدود الإضافية التي تم استخدامها هو إلغاء الترجحات أو الضجيج أي كلما كان التابع محدد التموضع $localized$ بالنسبة للزمن كلما كان تحديده أقل في فضاء التردد، العبارة الأخيرة ليست ملاحظة عابرة وإنما خاصة أساسية من خواص تحويل فورييه و لها نتائج فيزيائية هامة، لنأخذ مثلاً لدينا فضاء الإحداثيات و فضاء الدفع عوضاً عن الزمن و التردد، نستطيع القول بالاعتماد على ما سبق أن جداء عرض الحزمة Δx بجداء عرض تحويل فورييه لها Δp يكون مساو أو أكبر من قيمة محددة أكبر من الصفر، لنسميها h و هو ما يعرف بمبدأ هايزنبرغ في الإرتياب .

تعتبر هذه الخاصة عن وصف أساسي في تحويل فورييه. وإذا كان التحويل يتم من إحداثي الدفع p إلى إحداثي المكان x فإننا نستطيع أن نكتب بالاعتماد على الخاصة السابقة أن جداء عرض التابع Δx بعرض تحويله Δp يبقى مقدار أكبر من أو يساوي إلى ثابت. أي نستطيع أن نكتب :

$$\Delta x \Delta p \geq h$$

العلاقة الأخيرة هي مبدأ هايزنبرغ في الإرتياب و ما هو رياضياً إلا نتيجة مباشرة لخواص تحويل فورييه.

خاصة أخرى لتحويلات فورييه هي خاصة الإنزياح shifting تحويل فورييه للتابع
 $f(t - t_o)$ مثلاً هو:

$$\begin{aligned}
 F[f(t - t_o)] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t - t_o) e^{-i\omega t} dt \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) e^{-i\omega(\tau + t_o)} d\tau \\
 &= e^{-i\omega t_o} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau) e^{-i\omega \tau} d\tau \\
 &= e^{-i\omega t_o} g(\omega),
 \end{aligned} \tag{31}$$

حيث تم استخدام المتحول $\tau = t - t_o$ و بالمثل لدينا التحويل العكسي:

$$(32) F^{-1}[g(\omega - \omega_o)] = e^{i\omega_o t} f(t).$$

الانعكاس بالنسبة للزمن يمكن اعتباره تطبيقاً لخاصة الرفع بأخذ $\alpha = -1$:

$$(33) F[f(-t)] = \frac{1}{|-1|} g\left(\frac{\omega}{-1}\right) = g(-\omega)$$

و هناك خواص أخرى لتحويلات فورييه تتعلق بـ تناظرات التابع $f(t)$ ، لنأخذ التابع:

$$(34) g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

و مرافقه العقدي:

$$(35) g^*(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f^*(t) e^{i\omega t} dt$$

إذا كان $f(t)$ حقيقياً فقط عندئذ:

$$(36) g^*(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i(-\omega)t} dt = g(-\omega)$$

أي الجزء الحقيقي من تحويل فورييه هو تابع زوجي و الجزء التخيلي هو تابع فردي، و
 يكون:

$$(37) g^*(\omega) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i(-\omega)t} dt = -g(-\omega)$$

أو:

$$(38) g(-\omega) = -g^*(\omega)$$

أو الجزء الحقيقي من التحويل فردي و الجزء التخيلي زوجي.

أي إذا كان لدينا تابعاً زوجياً $f(-t) = f(t)$ فإن

$$(39) g(-\omega) = g(\omega)$$

و إذا كان $f(t)$ فردياً:

$$(40) g(-\omega) = -g(\omega)$$

يمكن تلخيص هذه النتائج في الجدول 1.

جدول (1) بعض خواص تحويل فورييه

If $f(t)$ is real,	then $\Re g(\omega)$ is even and $\Im g(\omega)$ is odd;
if $f(t)$ is imaginary,	then $\Re g(\omega)$ is odd and $\Im g(\omega)$ is even;
if $f(t)$ is even,	then $g(\omega)$ is even;
if $f(t)$ is odd,	then $g(\omega)$ is odd;
if $f(t)$ is real and even,	then $g(\omega)$ is real and even;
if $f(t)$ is real and odd,	then $g(\omega)$ is imaginary and odd;
if $f(t)$ is imaginary and even,	then $g(\omega)$ is imaginary and even;
if $f(t)$ is imaginary and odd,	then $g(\omega)$ is real and odd.

كثيراً ما نتعامل في الفيزياء مع مشتقات أو معادلات تفاضلية و بالتالي سنحتاج لأخذ تحويل فورييه لهذه المشتقات. بالإمكان حساب تحويل فورييه من أجل المشتقات على الشكل التالي:

$$F|f'(t)| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f'(t) e^{-i\omega t} dt \quad (41)$$

بالتكامل بطريقة التجزئة نجد :

$$(42) F[f'(t)] = \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} f(t) \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{i\omega}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f'(t) e^{-i\omega t} dt$$

يجب أن يكون الحد الأول معدوماً عند $t \rightarrow \pm\infty$ وإلا لا يمكن إيجاد تحويل فورييه $g(\omega)$ ، ونستطيع بالتالي أن نكتب بعد أخذ الحد الأول مساو إلى الصفر:

$$(43) F[f'(t)] = i\omega g(\omega)$$

أي من السهل حساب تحويل فورييه لمشتق. العلاقة الأخيرة تستخدم في إيجاد حلول بعض المعادلات التفاضلية.

و هناك بعض علاقات التكامل المرتبطة بتحويلات فورييه والتي لها أهمية تطبيقية، لنأخذ على سبيل المثال تحويل فورييه:

$$(44) g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

و تحويل فورييه العكسي:

$$(45) f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega') e^{-i\omega' t} d\omega'$$

لاحظ أننا غيرنا رمز المتحول إلى ω' و بما أنه لا يظهر في التابع المكامل فإن هذا التغيير لا يؤثر بشيء. بتعويض العلاقة (45) في (44) نجد:

$$(46) \begin{aligned} g(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega') e^{-i\omega' t} dt \right] e^{-i\omega t} dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(\omega-\omega')t} dt \right] g(\omega') d\omega' \end{aligned}$$

أو:

$$(47) g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega - \omega') g(\omega') d\omega'$$

حيث عرفنا تابع دلتا ديراك على الشكل:

$$(48) \delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega')t} dt$$

العلاقة (47) هي ليست معادلة عادية و كذلك التابع $\delta(\omega - \omega')$ هو ليس تابعاً عادياً، لنحاول فهم هذه النقطة أكثر، لنأخذ التابع:

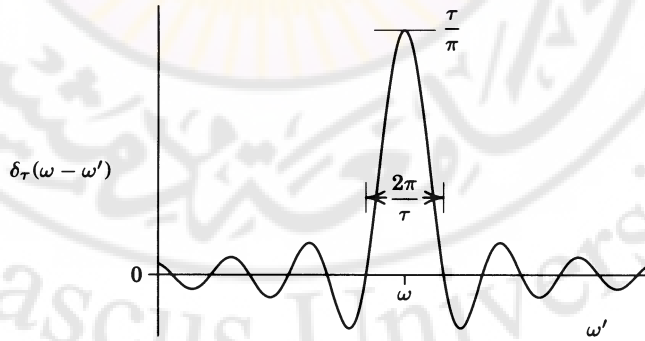
$$(49) \delta_{\tau}(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\tau}^{\tau} e^{i(\omega - \omega')t} dt = \frac{\sin(\omega - \omega')\tau}{\pi(\omega - \omega')}$$

هذا التابع يمثل تابعاً عادياً و يمكن تمثيله بيانياً كما في الشكل 3. عند النهاية $\tau \rightarrow \infty$ يبدو أن $\delta_{\tau}(\omega - \omega') \rightarrow \delta(\omega - \omega')$ من أجل $\omega - \omega' \approx 0$ لدينا:

$$\delta_{\tau}(\omega - \omega') = \frac{\sin(\omega - \omega')\tau}{\pi(\omega - \omega')} \approx \frac{1}{\pi(\omega - \omega')} \left[\tau(\omega - \omega') - \frac{\tau^3(\omega - \omega')^3}{3!} + \dots \right]$$

$$(50) \delta_{\tau}(\omega - \omega') \approx \frac{\tau}{\pi} - \frac{\tau^3}{3!\pi}(\omega - \omega')^2 + \dots$$

أي $\delta_{\tau}(0) = \frac{\tau}{\pi}$. أي عند $\tau \rightarrow \infty$ نجد أن التابع يزداد في شدته. بينما يقترب التابع من الصفر عند طرفي المبدأ $\omega - \omega' \approx \pm \frac{\tau}{\pi}$ (انظر الشكل 3) و يكون عرض التابع هو $\frac{2\pi}{\tau}$ و تكون شدة التابع متزايدة بشكل خطي مع العرض أو بشكل عكسي مع τ ، و جداء العرض مع الشدة يعطي بشكل تقريبي المساحة وهي مقدار ثابت في هذه الحالة.



الشكل (3)

كما يمكن أن نحسب تكامل تابع دلتا، بأخذ $g(\omega)=1$ في العلاقة (47) نجد:

$$(51) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega - \omega') d\omega' = 1$$

أي تكامل التابع دلتا على كامل الفضاء يعطي الواحد و لكن بحسب العلاقة (48)

$$(52) \delta(0) = \infty$$

هذا السلوك لتابع دلتا غريب بعض الشيء و في الواقع تابع دلتا ليس بتابع و إنما توزع و له معنى فقط عندما يظهر في تكامل كما في العلاقة (47). بسبب هذه الخواص لتابع دلتا فإن له تطبيقات عديدة في الفيزياء منها ميكانيك الكم و فيزياء الحالة الكثيفة. تكامل آخر هو:

$$(53) I = \int_{-\infty}^{\infty} f_1^*(t) f_2(t) dt$$

بكتابة $f_1(t)$ و $f_2(t)$ بدلالة تحويل فورييه لهما:

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g_1(\omega) e^{i\omega t} d\omega \right]^* \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g_2(\omega) e^{i\omega t} d\omega \right] dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g_1^*(\omega) g_2^*(\omega') \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega')t} dt \right] d\omega d\omega' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g_1(\omega) g_2(\omega') \delta(\omega - \omega') d\omega d\omega' \\ (54) &= \int_{-\infty}^{\infty} g_1^*(\omega) g_2(\omega) d\omega \end{aligned}$$

تسمى العلاقة الأخيرة متطابقة بارسفال Parseval's Identity. التابع المكامل في هذه العلاقات عادة ما يكون ذا أهمية فيزيائية مثلاً $|f(t)|^2$ تمثل الطاقة المحتواة في إشارة في لحظة t ، الكمية $|g(\omega)|^2$ عندئذ تمثل الطاقة المحتواة في المجال الترددات $[\omega, \omega + d\omega]$. من أجل إشارات ذات مدة محدودة يمثل التابع $S(\omega) = |g(\omega)|^2$ طيف الطاقة، و من أجل إشارات دورية أو عشوائية $|f(t)|^2$ تمثل معدل تدفق الطاقة أو القدرة و

الترددات. $S(\omega) = |g(\omega)|^2$ هي طيف القدرة Power في هذه الحالة. أي علاقة بارسفال تنص على أنه يمكن الحصول على الطاقة بمكاملة $|f(t)|^2$ على الزمن أو $|g(\omega)|^2$ على مجال الترددات.

و سنذكر أخيراً أن تحويل فورييه يمكن أن يعمم على أكثر من بعد واحد، فمثلاً من أجل بعدين:

$$(55) F[f(x, y)] = g(k_x, k_y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-i(k_x x + k_y y)} dx dy$$

و من أجل ثلاثة أبعاد:

$$(56) F[f(x, y)] = g(k_x, k_y, k_z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, z) e^{-i(k_x x + k_y y + k_z z)} dx dy dz$$

و باستخدام رموز الأشعة نستطيع كتابة:

$$(57) F[f(\vec{r})] = g(\vec{k}) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{3/2} \int f(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

حيث يؤخذ التكامل على كافة الفضاء. و في الحالة العامة يكون لدينا تابعة لإحداثي المكان وإحداثي الزمان و نستطيع أن نكتب بصورة عامة:

$$(58) F[f(\vec{r}, t)] = g(\vec{k}, \omega) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \int f(\vec{r}, t) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)} d\vec{r} dt$$

حيث يؤخذ التكامل على كامل الفراغ بالنسبة للزمن و المكان في هذه الحالة.

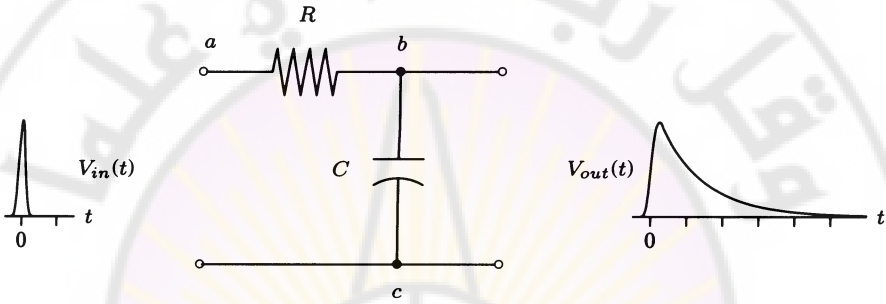
4-الإلتفاف و الترابط: Convolution and correlation

الإلتفاف و الترابط الرياضيين لتابع ما مرتبطان بتحويلات فورييه. لنعرف الإلتفاف

convolution لتابعين $p(t)$ و $q(t)$ على أنه:

$$p \otimes q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau) q(t - \tau) d\tau \quad (59)$$

نحصل على الالتفاف عندما نحاول أن نفسر استجابة response الجملة الفيزيائية لتأثير معين مطبق عليها، على سبيل المثال يمكن أن يكون لدينا أداة الكترونية التي تكشف و تضخم إشارة الكمون. لنأخذ أبسط شكل ممكن لدارة مؤلفة من مكثف و مقاومة كما هو موضح بالشكل 4. الإشارة التي نريد أن نلاحظها هي إشارة الدخل $V_{in}(t)$ و الإشارة التي نكشفها بواسطة القياس الفيزيائي هي $V_{out}(t)$



الشكل (4) استجابة دارة RC

باستخدام علاقات كيرشوف نستطيع أن نجد العلاقة بين إشارة الدخل و إشارة الخرج للدارة.

و يكون لدينا التيار بين النقطتين b و c :

$$(60) I_{\text{through capacitor}} = C \frac{d(V_b - V_c)}{dt}$$

و بين a و b يتعلق التيار بفرق الكمون بين طرفي المقاومة و يكون لدينا:

$$(61) \frac{V_a - V_b}{R} = C \frac{d(V_b - V_a)}{dt}$$

إذا أخذنا $V_c=0$ عندئذ $V_a=V_{in}$ و $V_b=V_{out}$ و بالإمكان كتابة العلاقة (61) على الشكل:

$$(62) \frac{V_{in} - V_{out}}{R} = C \frac{dV_{out}}{dt}$$

أو

$$(63) \frac{dV_{out}}{dt} + \frac{V_{out}}{RC} = \frac{V_{in}}{RC}$$

و هي معادلة خطية من المرتبة الأولى و تملك الحل التحليلي:

$$(64) V_{out}(t) = e^{-t/RC} \left[\int_{-\infty}^t e^{\tau/RC} V_{in}(\tau) d\tau + C_1 \right],$$

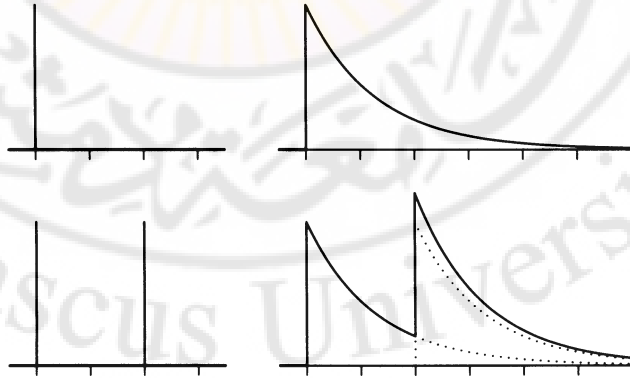
حيث C_1 ثابت التكامل، و نختاره بحيث يحقق الشروط الابتدائية. لنأخذ مثلاً : كيف ستستجيب الدارة لإشارة دخل من الشكل:

$$V_{in} = \delta(t)$$

بإجراء التكامل نجد:

$$(65) V_{out}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ \frac{1}{RC} e^{-t/RC}, & t \geq 0 \end{cases}$$

لنتصور عدداً من النبضات المتتالية و التي تطبق على الدارة، إشارة الخرج في أي لحظة هي مجموع الاستجابات لهذه النبضات المتتالية (لأن الجملة خطية) أي إشارة الخرج هي مجموع الإشارات التي تصل تباعاً، كما هو مبين بالشكل:



الشكل (5) الشكل في الأعلى إشارة واحدة و الشكل الأسفل يمثل أكثر من إشارة

و في حالة فواصل زمنية قصيرة جدا نستطيع أن نأخذ تكاملاً عوضاً عن المجموع:

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau) \delta(t - \tau) d\tau \quad (66)$$

إذا رمزنا بـ $r(t)$ لاستجابة الجملة الفيزيائية، من أجل الدارة المبينة في الشكل و هي دارة RC تكون

$$r(t) = e^{-t/RC}$$

و يعطى كمون الدخل في هذه الحالة بالعلاقة:

$$V_{in}(t) = \int V_{in}(\tau) \delta(t - \tau) d\tau \quad (67)$$

و كمون الخرج بالعلاقة:

$$\begin{aligned} V_{out}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} V_{in}(\tau) \cdot r(t - \tau) d\tau \\ &= V_{in} \otimes r \end{aligned} \quad (68)$$

أي أن كمون الخرج للدارة هو إلتفاف إشارة الدخل مع استجابة الجملة لدخل على شكل تابع دلتا.

كما هو واضح من الشكل (5) كشف إشارة الدخل بواسطة الدارة سوف يجعل الإشارة أعرض، هذا التشويه لإشارة الدخل يعبر عنه رياضياً بعلاقة الإلتفاف. لنأخذ تحويل فورييه للإلتفاف:

$$\begin{aligned} F|p \otimes q| &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [p \otimes q] e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau) q(t - \tau) d\tau \right] e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau) \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} q(t - \tau) e^{-i\omega t} dt \right] d\tau \end{aligned} \quad (69)$$

باستخدام خاصة الانزياح المذكورة سابقا (علاقة 47) نجد أن الجزء بين الأقواس المربعة يعطى بالعلاقة:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} q(t - \tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = e^{-i\omega\tau} Q(\omega) \quad (70)$$

حيث $Q(\omega)$ هو تحويل فورييه لـ $q(t)$ ، أي لدينا:

$$F[p \otimes q] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau) e^{-i\omega\tau} Q(\omega) d\tau = P(\omega) Q(\omega) \quad (71)$$

حيث $P(\omega)$ هو تحويل فورييه لـ $p(t)$ ، العلاقة الأخيرة تسمى نظرية فورييه و الالتفاف ويمكن أن تكتب بالشكل:

$$F[p \otimes q] = F[p] F[q] \quad (72)$$

في أغلب الأحيان نريد أن نعرف القيمة الحقيقية لـ V_{in} و حيث نعلم استجابة الجملة و نعلم V_{out} و نريد أن نأخذ عملية الالتفاف العكسية deconvolution و قد لا تكون المعادلة التفاضلية التي تصف هذه المسألة الفيزيائية بسيطة، و لذلك من الأفضل أن نستفيد من الالتفاف و تحويل فورييه:

نعلم أن:

$$V_{out} = V_{in} \otimes r \quad (73)$$

نأخذ تحويل فورييه:

$$F[V_{out}] = F[V_{in} \otimes r] = F[V_{in}] F[r] \quad (74)$$

نحل العلاقة الأخيرة من أجل $F[V_{in}]$:

$$F[V_{in}] = \frac{F[V_{out}]}{F[r]} \quad (75)$$

أو:

$$V_{in}(t) = F^{-1} \left[\frac{F[V_{out}]}{F[r]} \right] \quad (76)$$

يمكن أن نستخدم الخطوات السابقة من أجل الكثير من الجمل الفيزيائية مثلاً يمكن أن يصف الالتفاف التأثير بين إشارة ما (موجة ضوء مثلاً) و أداة ما (شبكة انعراج في الضوء مثلاً).

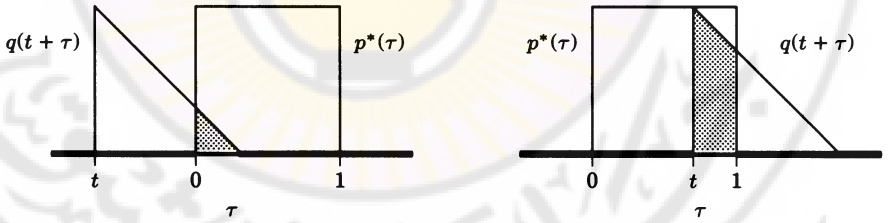
الترابط : correlation

رأينا أن الالتفاف يعطي الأثر بين إشارة و جملة ما، أما التعالق فيعطي قياساً لمدى تشابه إشارة ما مع إشارة أخرى، و يمكن أن يعرف رياضياً بالشكل:

$$p \circ q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p^*(\tau) q(t+\tau) d\tau \quad (77)$$

يعبر الترابط رياضياً عن مدى تشابه التابعين $p(t)$ و $q(t)$. وحيث $p^*(t)$ هو المرافق العقدي.

لا حظ أن العلاقة السابقة تحتوي على المرافق العقدي لأحد التابعين. الشكل (6) يعطي تمثيلاً لعملية الترابط.



الشكل (6) الترابط

لنأخذ التابعين:

$$q(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1-t, & 0 < t < 1 \\ 0, & t > 1 \end{cases} \quad \text{و} \quad p(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & 0 < t < 1 \\ 0, & t > 1 \end{cases}$$

لحساب الترابط نزاح q مسافة t بالنسبة لـ p و نكامل الجداء، هذه العملية موضحة في الشكل 6 الذي يبين حساب الترابط في زمنين مختلفين:

$$p \circ q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\max\{0,t\}}^{\min\{1,1+t\}} (1-t-\tau) d\tau$$

$$= \begin{cases} 0, & t < -1 \\ \frac{1-2t-3t^2}{2\sqrt{2\pi}} & -1 \leq t \leq 0 \\ \frac{1-4t+3t^2}{2\sqrt{2\pi}} & 0 \leq t \leq 1 \\ 0, & t > 1 \end{cases} \quad (79)$$

ترتيب التوابع مهم في عملية الترابط.

في كثير من الحالات التوابع التي ندرس ترابطها ليست ذات فترة زمنية محدودة و بالتالي يمكن أن نعرف تابعاً وسطياً للترابط على الشكل:

$$[p \circ q]_{average} = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} p^*(\tau) q(t+\tau) d\tau \quad (80)$$

و إذا كان دور التوابع T_0 يمكن الكتابة:

$$[p \circ q]_{average} = \frac{1}{T_0} \int_{-T_0/2}^{T_0/2} p^*(\tau) q(t+\tau) d\tau \quad (81)$$

لنكتب التوابع $p(\tau)$ و $q(\tau)$ على الشكل:

$$p(\tau) = \langle p \rangle + \delta_p \langle \tau \rangle \quad q(\tau) = \langle q \rangle + \delta_q \langle \tau \rangle \quad (82)$$

حيث $\langle p \rangle$ هي القيمة الوسطية للتابع و δ_p انحراف التابع عن القيمة الوسطية في لحظة τ . و يكون ترابط التابعين:

$$p \circ q = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} [\langle p \rangle + \delta_p(\tau)] [\langle q \rangle + \delta_q(\tau)] d\tau$$

$$= \langle p \rangle \langle q \rangle + \langle p \rangle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \delta_q(t+\tau) d\tau + \langle q \rangle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \delta_p(\tau) d\tau + \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \delta_p(\tau) \delta_q(t+\tau) d\tau$$

بما أن δ_p هي الانحراف عن القيمة الوسطية فإن التكامل:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \delta_q(t+\tau) d\tau$$

يجب أن يكون معدوماً. و يجب أن نأخذ بالاعتبار أن التتابع مستقلة عن بعضها بعضاً أي تغيرات التابع p لا تتعلق بتغيرات التابع q، و يكون لدينا:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \delta_p(\tau) \delta_q(t+\tau) d\tau = 0 \quad (84)$$

و يكون لدينا:

$$p \circ q = \langle p \rangle \langle q \rangle \quad (85)$$

أحدى الحالات المهمة هي تابع ارتباط الذاتي autocorrelation.

تطبيق: احسب الترابط الذاتي للتابع التالي:

$$p(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & 0 \leq t \leq 1 \\ 0, & t > 1 \end{cases} \quad (86)$$

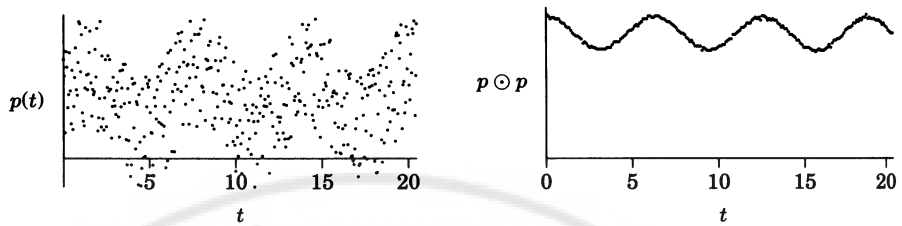
من أجل التتابع الدورية يمكن أن نتوقع أن الترابط الذاتي سيكون كبيراً لأن إزاحة التابع الدوري بمقدار قريب من دوره سوف يعطي التابع نفسه، مثلاً تابع الجيب:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin \tau \sin(t+\tau) d\tau = \frac{1}{2} \cos t \quad (87)$$

أما إذا أخذنا تابعاً عشوائياً تماماً، و من أجل زمن طويل نسبياً لدينا:

$$p \circ p = \langle p \rangle^2 \quad (88)$$

في كثير من المسائل الفيزيائية لدينا ضجيج عشوائي يمنع أحيانا من قياس و معرفة الإشارة الفيزيائية المطلوبة (انظر الشكل 7) لاحظ أن تناثر النقاط في الجزء الأيسر من الشكل يجعل من الصعب أن نحصل على أي وصف دقيق للتابع p(t).



الشكل (7) استخدام الترابط الذاتي لعزل الضجيج في إشارة ما

لنأخذ الترابط الذاتي:

$$(89) p \circ p = s \circ s + s \circ n + n \circ s + n \circ n$$

بما أن الإشارة و التابع غير متعلقين يكون لدينا

$$(90) s \circ n = n \circ s = \langle s \rangle \langle n \rangle$$

و نستطيع أن نكتب من أجل فترة زمنية كافية:

$$(91) p \circ p = s \circ s + 2\langle s \rangle \langle n \rangle + \langle n(t) \rangle^2$$

أي نستطيع حساب التابع المطلوب و عزل خلفية الضجيج عن الإشارة. من أجل تابع

$$p(t) = \sin t \quad \text{لدينا:}$$

$$(92) p \circ p = \frac{1}{2} \cos t + \langle n(t) \rangle^2$$

ملاحظة:

$$p \circ q \approx \frac{1}{T} \int_0^T p^*(\tau) q(t + \tau) d\tau \quad (93)$$

بأخذ تحويل فورييه للترابط:

$$\begin{aligned}
F[p \circ q] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} [p \circ q] e^{-i\omega t} dt \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p^*(\tau) q(t+\tau) d\tau \right] e^{-i\omega t} dt \\
(94) \quad &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p^*(\tau) \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} q(t+\tau) e^{-i\omega t} dt \right] d\tau \\
&= Q(\omega) \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau) e^{-i\omega \tau} d\tau \right]^* \\
&= P^*(\omega) Q(\omega)
\end{aligned}$$

و في حالة الترابط الذاتي نجد:

$$(95) F[p \circ p] = |P(\omega)|^2$$

5- تحويل فورييه المتقطع : Discrete Fourier Transform

ليكن لدينا خاصية فيزيائية ما و التي تتبع الزمن، و لنفترض أننا أخذنا قياسات لهذه الكمية الفيزيائية بفواصل زمنية مقدارها Δt . و بالتالي نحصل على

$$f(m\Delta t), \quad m = 0, 1, \dots, N-1$$

و يعطى تحويل فورييه بالتكامل

$$(103) g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

و بما أننا نعرف المقادير $f(m\Delta t)$ فيمكن إجراء التكامل عددياً بطريقة شبه المنحرف مثلاً. و لكننا لا نعرف أي قيمة لهذه الخاصية الفيزيائية قبل اللحظة $t = 0$ و كذلك لا نملك معلومات مستمرة عن التابع f و لكن فقط مجموعة من القيم $m\Delta t$.

في مثل هذه الحالة لا نستطيع إيجاد تحويل فورييه الحقيقي بإجراء التكامل و كل ما لدينا هو مجموعة محددة من النقاط، و التي يمكن أن نحسب منها هذه النقاط تحويلاً شبيهاً بتحويل فورييه و الذي يعطي في كثير من الأحيان نتائج هامة.

تعطى سلسلة فورييه العقدية في المجال $0 < t < T$ بالعلاقة:

$$(104) f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i2n\pi t/T}$$

و تعطى الأمثال بالعلاقة:

$$(105) c_n = \frac{1}{T} \int_0^T f(t) e^{-i2n\pi t/T} dt.$$

لنعرف:

$$(106) \Delta\omega = \frac{2\pi}{T}$$

نقرب التكامل باستخدام قاعدة شبه المنحرف، و نعرف تحويل فورييه المتقطع بالعلاقة:

$$(107) g(n\Delta\omega) = \sum_{m=0}^{N-1} f(m\Delta t) e^{-in\Delta\omega m\Delta t} = \sum_{m=0}^{N-1} f(m\Delta t) e^{-i2\pi mn/N}$$

تذكر أننا نعرف فقط عدداً N من النقاط التي تمثل التابع و بالتالي نستطيع حساب N من الترددات فقط.

و هذا ما يجعل حساب تحويل فورييه العكسي مسألة ليست بالبسيطة و خصوصاً أننا قربنا التكامل في تحويل فورييه باستخدام قاعدة شبه المنحرف و التي تملك دقة من رتبة $O(h)$ فقط. و لكن يمكن أن نستفيد من فكرة تعامد التوابع:

ليكن لدينا المجموع:

$$S_N = \sum_{k=0}^{N-1} e^{ik\alpha} \quad (108)$$

إذا كانت $\alpha \neq 0$ لدينا السلسلة الهندسية:

$$\sum_{k=0}^{N-1} r^k = r^0 + r^1 + r^2 + \dots + r^{N-1} = \frac{1-r^N}{1-r} \quad (109)$$

و إذا أخذنا $e^{i\alpha} = r$ نحصل على:

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{ik\alpha} = \frac{1 - e^{i\alpha N}}{1 - e^{i\alpha}} = S_N \quad (110)$$

نريد أن نجعل المجموع $S_N = 0$ إذا كانت $\alpha \neq 0$ و ذلك حتى نولد علاقات تعامد،

$$e^{i\alpha N} = 1 \quad \text{للحصول على ذلك نجعل:}$$

أو:

$$\alpha = \frac{2\pi l}{N} \quad (111)$$

حيث l عدد صحيح . و هذا يجعل $1 - e^{i\alpha N} = 0$ و بالتالي S_N معدوما و نستطيع أن نكتب:

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi k l / N} = \begin{cases} N, & l = 0 \\ 0, & l \neq 0 \end{cases} \quad (112)$$

نستطيع اعتبار l على أنها الفرق بين العددين الصحيحين m و n و بالتالي كتابة علاقات التعامد:

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi k l / N} e^{-i2\pi k l / N} = N\delta_{n,m} \quad (113)$$

بضرب الطرفين في العلاقة (107) بـ $e^{i2\pi k n / N}$ و أخذ المجموع على n نحصل على:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{N-1} g(n\Delta\omega) e^{in\Delta\omega m\Delta t} &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} f(m\Delta t) e^{-in\Delta\omega m\Delta t} e^{in\Delta\omega m\Delta t} \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} f(m\Delta t) \sum_{n=0}^{N-1} e^{-in\Delta\omega m\Delta t} e^{in\Delta\omega m\Delta t} \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} f(m\Delta t) N\delta_{k,m} \\ &= Nf(k\Delta t) \end{aligned} \quad (114)$$

و يعطى تحويل فورييه المتقطع العكسي بالعلاقة:

$$f(m\Delta t) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} g(n\Delta\omega) e^{i2\pi m n / N} \quad (115)$$

لاحظ أن تحويل فورييه المتقطع يتضمن مجموعاً محدوداً عند حسابه .

6- تحويل فورييه السريع: Fast Fourier Transform

رأينا أنه يمكننا أن نأخذ تحويل فورييه المتقطع من أجل مجموعة من النقاط N و هو يتميز بالتالي عن تحويل فورييه و لكن تحويل فورييه المتقطع يتطلب مجهوداً حسابياً كبيراً. من أجل N نقطة نحتاج لإجراء N من أجل كل مجموع و هو ما يعطي نقطة واحدة فقط في فضاء ω . من أجل حساب جميع نقاط $g(m\Delta\omega)$ نحتاج لأخذ N مجموع أي تنفيذ N^2 عملية، أي إذا ضاعفنا عدد النقاط ستزداد العمليات الحسابية بمقدار أربعة أضعاف . و طول الحسابات سيزداد بشكل أكبر من أجل بعدين أو ثلاثة. تستخدم معظم التطبيقات الفيزيائية خوارزمية تحويل فورييه السريع في الحسابات. إذا كان لدينا N عدد زوجي نستطيع أن نكتب تحويل فورييه المتقطع على شكل مجموع من أجل النقاط الزوجية و مجموع ثانٍ من أجل النقاط الفردية:

$$\begin{aligned} g(n\Delta\omega) &= \sum_{m=0}^{N-1} f(m\Delta t) e^{-i2\pi mn/N} \\ &= \sum_{m=0, \text{even}}^{N-1} f(m\Delta t) e^{-i2\pi mn/N} + \sum_{m=0, \text{odd}}^{N-1} f(m\Delta t) e^{-i2\pi mn/N} \\ &= \sum_{j=0}^{N/2-1} f(2j\Delta t) e^{-i2\pi 2jn/N} + \sum_{j=0}^{N/2-1} f((2j+1)\Delta t) e^{-i2\pi (2j+1)n/N} \end{aligned} \quad (116)$$

حيث أخذنا $m=2j$ من أجل النقاط الزوجية و $m=2j+1$ من أجل النقاط الفردية. و يمكن أن نكتب:

$$\begin{aligned} g(n\Delta\omega) &= \sum_{j=0}^{N/2-1} f(2j\Delta t) e^{-i2\pi 2jn/(N/2)} + e^{-i2\pi n/N} \sum_{j=0}^{N/2-1} f((2j+1)\Delta t) e^{-i2\pi jn/(N/2)} \\ &= g_{\text{even}}(n\Delta\omega) + e^{-i2\pi n/N} g_{\text{odd}}(n\Delta\omega) \end{aligned} \quad (117)$$

نرى من العلاقة الأخيرة أن كلاً من المجموعين هو تحويل فورييه متقطع يضم نصف عدد النقاط الأصلية الفردية و الزوجية. الحسابات الأصلية لتحويل فورييه المتقطع ستأخذ

N^2 عملية حسابية لإنجازها فإن تقسيم المجال إلى قسمين فردي و زوجي سيتطلب لحسابه $2(N/2)^2$ عملية حسابية فقط. لا يوجد سبب للتوقف عند هذا القدر و لكن يمكن أن نستمر في تقسيم المجالات طالما أن هذه المجالات تحتوي على عدد زوجي من النقاط و بالتالي إذا كانت $N=2^k$ فإننا و بعد عدد k من الخطوات يصبح لدينا N من التحويلات فقط و كل واحد منها يحتوي على نقطة واحدة فقط ! أي يصبح العدد الكلي للعمليات الحسابية التي يجب تنفيذها عوضاً عن N^2 ، $N \log_2 N$ فقط.

إجراء تحويل فورييه باستخدام Mathcad:

يمكن أن يتم إجراء تحويل فورييه السريع باستخدام Mathcad على مجموعة من النقاط والتي تمثل تابعا ما، باستخدام الأمر FFT و التحويل العكوس invfft ، و بشرط أن يكون عدد النقاط المعطاة زوجياً. انظر الملحق من أجل بعض البرمجيات التي تقوم بتحويل فورييه.

7-تابع غرين:

يسمى تابع غرين أيضاً تابع استجابة الدفع impulse response أو تابع التأثير influence function أو تابع الجملة system function و هو ذو أهمية كبيرة في التطبيقات الفيزيائية و الهندسية . و قد ارتأينا تخصيص هذا الجزء للحديث عن تابع غرين بسبب ارتباطه بتحويلات فورييه و الالتفاف. تعريف أولى:

لنفرض أننا نريد أن نحل المعادلة الخطية من المرتبة الأولى،

$$\frac{dy}{dt} + a.y(t) = \left(\frac{d}{dt} + a \right) y(t) \equiv \hat{M}y(t) = f(t) \quad (118)$$

حيث \hat{M} هو المؤثر $(d/dt + a)$ ، و تابع القوة (أو المنبع) $f(t)$ معروف. نريد إيجاد الاستجابة $y(t)$ ، و التي تأخذ القيمة صفر قبل تطبيق القوة $f(t)$ عند لحظة زمنية t أي: $y(t) = 0$ من أجل $t < 0$ ، إذا استخدمنا تحويل لابلاس على المعادلة:

$$L[y(t)] \equiv \int_0^{\infty} dt \cdot y(t) \cdot e^{-st} \equiv \hat{y}(s) \quad (119)$$

و بأخذ $L[f(t)] \equiv \hat{f}(s)$ نحصل على:

$$(s + a)\hat{y} = \hat{f} \quad (120)$$

$$\hat{y}(s) = \frac{\hat{f}}{s + a} = \left(\frac{1}{s + a} \right) \hat{f}(s) \quad \text{أو:}$$

أي أن الحل يتضمن جزئين الأول: $\hat{f}(s)$ تحويل لابلاس لتابع القوة و الثاني $L[\hat{M}^{-1}] = \frac{1}{s + a}$ هو تحويل لابلاس لمقلوب المؤثر \hat{M} و الذي يسمى تابع الانتقال .transfer function

نسمي تحويل لابلاس لمقلوب المؤثر \hat{M} تابع غرين لـ \hat{M} .

$$L^{-1}\left[\frac{1}{s + a}\right] = G(t) \quad (121)$$

من نظرية الالتفاف convolution theorem

$$L\left[\int_0^t G(t-t') \cdot f(t') \cdot dt'\right] = L[G(t)]L[f(t)] \quad (122)$$

و يكون حل المعادلة الأساسية هو:

$$y(t) = \int_0^t G(t-t') \cdot f(t') dt' \quad (123)$$

أي أن تابع غرين يحتوي جميع المعلومات عن المؤثر \hat{M} .

تابع دلتا ديراك:

نعرف تابع دلتا ديراك على الشكل

$$\delta(t-t') = 0 \quad (124)$$

$$\int_a^b \delta(t-t') dt = 1 \quad \text{if } (a < t' < b) \quad (125)$$

يأخذ تابع دلتا قيمة لا نهائية عندما تكون $t - t_0 = 0$.

يمكن أن نصف تابع دلتا بأنه مشتق تابع الخطوة step function

$$\delta(t) = \frac{d\theta(t)}{dt} \quad (126)$$

حيث :

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } t \geq 0 \\ 0 & \text{if } t < 0 \end{cases} \quad (127)$$

و يكون لدينا:

$$f(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \cdot f(t) \cdot \delta(t-a) \quad (128)$$

أي يكون تحويل فورييه لتابع دلتا

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \cdot \delta(t-a) \cdot e^{-i\omega t} = e^{-i\omega a} \quad (129)$$

و تحويل لابلاس يأخذ الشكل:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \cdot \delta(t-a) \cdot e^{-st} = e^{-sa} \quad (130)$$

من أجل $a = 0$ يكون لدينا:

$$L[\delta(t)] = F[\delta(t)] = 1 \quad (131)$$

تابع غرين كتابع استجابة:

لنعد إلى المعادلة السابقة $\hat{M}G(t) = \delta(t)$ يمكن كتابة:

$$\hat{M}G(t) = \delta(t) \quad (132)$$

حيث استبدلنا تابع القوة $f(t)$ بتابع دلتا $\delta(t)$. يسمى $G(t)$ في هذه الحالة استجابة

نبضية Impulse response لأنه استجابة لتابع دلتا (الدفع). لأن تحويل لابلاس

العكسي لـ M^{-1} يعرف بأنه $G(t)$ و لأن تحويل لابلاس لتابع دلتا $\delta(t)$ هو واحد، تابع غرين المعروف سابقا هو حل لهذه المعادلة، أي لدينا المعادلة:

$$\left(\frac{d}{dt} + a\right)G(t) = \delta(t) \quad (133)$$

التي تعطي بأخذ تحويل لابلاس

$$\hat{G}(s) = \frac{1}{s+a} \quad (134)$$

أي تابع غرين هو تحويل لابلاس العكسي

$$G(t) = L^{-1}\left[\frac{1}{s+a}\right] \quad (135)$$

يمكن تعميم هذه النتيجة من أجل أي مؤثر. تابع غرين من أجل مؤثر ما هو حل معادلة المؤثر باستخدام تابع دلتا $\delta(t)$ كمنبع source. و بالطبع إذا كان تابع غرين معروفاً فيمكن حساب استجابة الجملة المدروسة من أجل أي منبع و ذلك بأخذ إلتفاف convolution تابع المنبع مع تابع غرين بحسب المعادلة (123).

تعريف ثاني:

لنأخذ المعادلة التفاضلية الجزئية و المؤثر P الخاص بها:

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} = 0 \quad (136)$$

و يعطى المؤثر المرافق بالشكل:

$$\hat{P} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (137)$$

و المعادلة المتجانسة تأخذ الشكل:

$$\hat{P}y(x,t) = 0 \quad (138)$$

لنفرض أن $y(x,t)$ يأخذ قيمة الصفر من أجل $t < 0$ و من أجل $t = 0$ لدينا الشرط

الحدي $y(x,0) = h(x)$.

نجري تحويل فورييه للمعادلة و للشرط الحدّي بالنسبة للمتحول المكاني x ، نرمز لتحويل فورييه للتابع $y(x,t)$ بـ $\tilde{y}(k,t)$: $F[y(x,t)] \equiv \tilde{y}(k,t)$

$$\frac{d\tilde{y}}{dx} + \frac{k^2}{2} \tilde{y}(x,t) = 0 \quad (139)$$

$$\tilde{y}(k,0) = \tilde{h}(k) \quad (140)$$

يمكن حل المعادلة من المرتبة الأولى من أجل \tilde{y} بسهولة حيث ستمتلك الشرط الأولي $\tilde{h}(k)$:

$$\tilde{y}(k,t) = \tilde{h}(k) e^{-k^2 t/2} \quad (141)$$

و عندما نجري تحويل فورييه للحصول على $y(x,t)$ ، النتيجة (باستخدام نظرية الإلتفاف) هي إلتفاف $h(x)$ مع تحويل فورييه العكسي لـ $e^{-k^2 t/2}$. و إذا استفدنا من المعادلتين:

$$\hat{M}G(x,t) = 0 \quad (142)$$

$$G(x,0) = \delta(x) \quad (143)$$

عندئذ $\tilde{G}(k,t)$ هو الحد $e^{-k^2 t/2}$. و هنا أيضا يكون حل المعادلة هو إلتفاف تابع غرين مع الشرط الحدّي للمسألة:

$$y(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x-x',t) h(x') dx' \quad (144)$$

و بأخذ تحويل فورييه لـ $e^{-k^2 t/2}$

$$F^{-1}\left[e^{-k^2 t/2}\right] = \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-x^2/2t} \quad (145)$$

و هذا هو تابع غرين لمعادلة الانتشار.

يمكن توحيد الطريقتين المذكورتين على الشكل التالي:

لأخذ معادلة تفاضلية متجانسة من المرتبة الأولى:

$$\frac{dy(t)}{dt} + ay(t) = 0 \quad (146)$$

و الشرط الابتدائي $y(0) = b$

يعطى الحل باستخدام تحويل لابلاس على الشكل:

$$s\hat{y}(s) - y(0) + a\hat{y}(s) = 0 \quad \hat{y}(s) = \frac{b}{s+a} \quad (147)$$

تظهر $y(0)$ في الحل لأن $L[dy/dt] = \hat{y}(s) - y(0)$. و هذا هو نفس الحل الذي نحصل عليه إذا أخذنا $y(0) = 0$ و أخذنا القوة $b\delta(t)$ ، أي سنحصل على المعادلة:

$$\frac{dy}{dt} + ay(t) = b\delta(t) \quad y(0) = 0 \quad (148)$$

يمكن أن يعبر عن الشرط الأولي باستخدام تابع دلتا. إذا اتبعنا نفس الأسلوب من أجل معادلة تفاضلية جزئية نحصل على الشكل التالي باستخدام تابع غرين

$$G(x,0) = 0^- \quad (149) \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(x,t) = \delta(t)\delta(x)$$

عوضاً عن:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(x,t) = 0 \quad G(x,0) = \delta(x) \quad (150)$$

تابع غرين يؤدي دوراً كبيراً في الفيزياء النظرية و خصوصاً في نظرية الحقول الكمومية.



الفصل السادس

تطبيقات من الفيزياء الإحصائية

طريقتا مونت كارلو و التحريك الجزيئي

Monte Carlo and Molecular Dynamics Methods

رأينا أنه في حالة الغازات المثالية أنه يمكن الحصول على علاقات تحليلية تعطي تابع مجموع الحالات و من ثم يمكننا حساب الخواص الترموديناميكية الأخرى ولكن المسألة تصبح أكثر تعقيدا في حالة الغازات الحقيقية، في هذه الحالة التكامل على إحداثيات الدفع يمكن إجراؤه بسهولة، ولكن بسبب طاقة التأثير المبادل (التأثر interaction) بين الجزيئات والتي تأخذ الشكل $U(r)$ من الصعب جدا إجراء التكامل على إحداثيات المكان ويجب أن نأخذ التأثيرات المتبادلة بين كل الجزيئات في الجملة. لذلك لا بد من أخذ بعض التقريبات مثل النشر بدلالة تركيز الجزيئات ضمن الغاز Virial expansion أو يجب استخدام الحاسوب لإجراء هذه الحسابات. لحساب الخواص الترموديناميكية الجملة ما باستخدام الكمبيوتر يمكن استخدام نموذجاً Model يمثل خواص الجملة (مثل نموذج آيسينغ) أو استخدام طرق المحاكاة Simulation مثل طريقة مونت كارلو Monte Carlo أو التحريك الجزيئي

Molecular Dynamics تعتمد هذه الطرق بشكل أساسي على استخدام الكمبيوتر في حسابات تأخذ وقتاً طويلاً ولا يمكن إجراؤها دون الكمبيوتر.

1- بعض النماذج و الكمونات:

في بعض الحالات البسيطة كالغازات الخاملة أو الغازات الممددة Dilute يمكن استخدام كمونات بسيطة تجريبية أو شبه تجريبية حيث يمكن أن تستخدم هذه الكمونات في حساب تابع مجموع الحالات للجملة أو في الطرق النظرية الأخرى أو ضمن طرق المحاكاة مثل مونت كارلو، بعض أشهر هذه الكمونات:

- نموذج الكرات الصلبة Hard sphere model

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ 0 & r \geq \sigma \end{cases} \quad (1)$$

حيث σ نصف قطر الكرة الصلبة التي نعتبر أنها تمثل الجزيئات. انظر الشكل 1 (a).

- أو كموناً من الشكل:

$$\phi(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n \quad (2)$$

حيث ε و σ و n ثوابت معينة. الشكل 1 (b).

- كمون ليونارد-جونز: كثيراً ما يستخدم كمون بسيط مثل كمون ليونارد جونز في حسابات مونت كارلو أو التحريك الجزيئي Molecular dynamics ويعطى هذا الكمون بالشكل

$$V_L(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

حيث ε و σ بارامترات تتعلق بالمادة المدروسة كما في حالة مادة مؤلفة من H-Kr يكون لدينا:

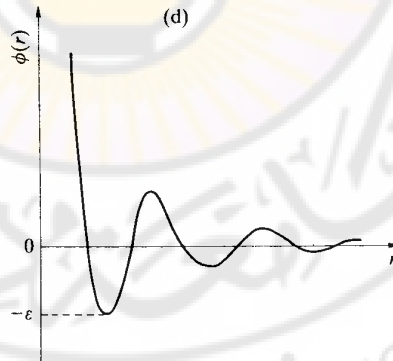
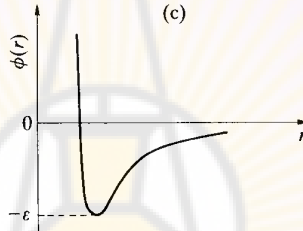
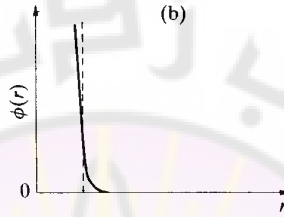
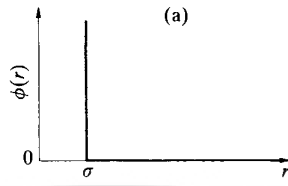
$$\varepsilon = 5.9 \text{ meV} \quad \text{و} \quad \sigma = 3.75 \text{ \AA}$$

انظر الشكل 1(c).

- في حالة أيونات تتبادل التأثير مع بعضها بعضاً يمكن استخدام كمون من الشكل:

$$\phi(r) = \frac{A}{r^3} \cdot \cos(2k_F r) \quad (4)$$

انظر الشكل 1(d).



الشكل (1) بعض الكمونات المستخدمة في النمذجة

أو يمكن استخدام نموذج يصف الجملة المدروسة و من أشهر هذه النماذج التي أدت دورا كبيرا في وصف الجمل المغناطيسية و الانتقالات الطورية هو نموذج آيسينغ Ising model

- نموذج آيسينغ (s=1/2) Ising Model :

نموذج آيسينغ هو أحد النماذج المستخدمة في الفيزياء الإحصائية ، بدأ هذا النموذج لوصف الخصائص المغناطيسية ومن ثم تم استخدامه في دراسة السطوح والخلائط المؤلفه من عنصرين ويستخدم كذلك في دراسة الانتقالات الطورية، يمكن حل نموذج آيسينغ في بعدين تماما والحصول على علاقات رياضية تصف الجملة و لكن لا يوجد حل رياضي تام من أجل ثلاثة أبعاد.

يعرف نموذج آيسينغ في بعدين على شبكة أبعادها $L \times L$ ترقيم مواقع هذه الشبكة باستخدام دليل واحد i ونرمز ل زوج متجاور بالرمز $\langle i, j \rangle$. والسبين s_i المرتبط بالموقع i والذي يأخذ قيمتين مختلفتين ($+1$ و -1 مثلا) ويعطى تابع هاميلتون من أجل تشكيل معين بالعلاقة:

$$(5) H\{s_i\} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

حيث J ثابت يعبر عن التأثير المتبادل بين المواقع المتجاورة على الشبكة ويأخذ المجموع الأول في العلاقة (5) الجار الأقرب فقط. إذا كانت J موجبة نحصل على طاقة أصغريه عندما تتجه السبينات المتجاورة بنفس الاتجاه و نحصل في هذه الحالة على المغناطيسية الحديدية وإذا كانت J سالبة نصف النموذج المغناطيسية الحديدية المضادة antiferromagnetic. ويعبر المجموع الثاني في العلاقة (5) عن التأثير المتبادل مع الحقل الخارجي المطبق H . ويعطى تابع مجموع الحالات لنموذج آيسينغ بالعلاقة:

$$(6) Z = \sum_{\{s_i\}} \exp \left[\beta J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j + \beta H \sum_i s_i \right]$$

كثيرا ما تستخدم طريقة مونتي كارلو مع نموذج أيسينغ حيث يتم توليد توجهات عشوائية للسبينات ومن ثم حساب الخواص الترموديناميكية المطلوبة للجمل كما سنرى لاحقا.

- نموذج أيسينغ (s=1) Ising Model:

من أجل جمل تملك أكثر من حالتين يمكن استخدام نموذج أيسينغ ذا سبين أعلى من 1/2 مثلا يأخذ تابع هاميلتون من أجل سبين 1 الشكل:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - K \sum_{i,j} s_i^2 s_j^2 - D \sum_i s_i^2 - L \sum_{i,j} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) - H \sum_i s_i \quad (7)$$

حيث :

$$s_i = \pm 1, 0$$

يمكن باستخدام نموذج أيسينغ (S=1) التعبير عن عدد أكبر من الظواهر الحرجة.

- نموذج هايزنبرغ: Heisenberg model

الذي يستخدم في وصف المغنطيسية الحديدية

$$H\{s_i\} = -2 \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \cdot \hat{s}_i \hat{s}_j \quad (8)$$

حيث \hat{s} هو مؤثر السبين.

2- طرق المحاكاة Simulation Methods

رأينا أنه من أجل حالات بسيطة و محدودة يمكن أن نستخدم كمونات مبسطة

تصف هذه الجمل الفيزيائية و لكن حتى في هذه الحالات تكون المعالجة الرياضية معقدة

- مثلا تخيل لو أخذنا حدود النشر virial expansion من أجل غاز موصوف

بكمون ليونارد- جونز- و و نعرف أنه لا يوجد حل رياضي تحليلي لنموذج بسيط مثل

نموذج آيسينغ من أجل ثلاثة أبعاد لذلك نلجأ في كثير من المسائل الفيزيائية إلى طرق المحاكاة و التي تنطلق من نموذج معين للجملة المدروسة ، مثلاً كمون يصف التأثير بين الجسيمات أو نموذج يصف الجملة كنموذج آيسينغ مثلاً، و حيث يقوم الكمبيوتر بمحاكاة هذه الجملة الفيزيائية ضمن شروط معينة و ذلك حتى نحصل على حالة التوازن و بالتالي حساب الخواص الترموديناميكية لهذه الجملة، من أشهر طرق المحاكاة طريقة مونتي كارلو طريقة التحريك الجزيئي و المحاكاة البراونية.

1-2 طريقة مونتي كارلو:

رأينا سابقاً طريقة مونتي كارلو في حساب التكاملات المتعددة الأبعاد ورأينا أن الطريقة تعتمد على توليد أرقام عشوائية وحساب القيمة الوسطية للتابع المكامل ومن ثم حساب التكامل على المجال المطلوب حيث يجب أن نولد هذه الأرقام العشوائية باستخدام الحاسب وبشكل تشتمل كل مجال التكامل ويجب أن نأخذ عدد كافٍ من النقاط حتى نحصل على نتيجة مقبولة. بشكل عام جميع الطرق التي تعتمد على توليد أرقام عشوائية يمكن تسميتها طرق مونتي كارلو. سنستعرض هنا كيفية استخدام هذه الطرق في دراسة خواص جمل كلاسيكية مؤلفة من عدد كبير من الجسيمات، تذكر أن حساب الخواص الترموديناميكية للجملة أو حساب أي خاصية (مثل الطاقة أو الضغط) يمكن أن يتم بأخذ وسطي الطاقم لهذه الخاصية حيث نتخيل وجود عدد كبير من الجمل المتماثلة (طواقم إحصائية Ensemble) ونحسب القيمة المتوسطة المطلوبة ورأينا أن هذه الطريقة تعطي نتيجة مكافئة للمتوسط الزمني من أجل عدد كافٍ من الجمل ضمن الطاقم Ergodicity Theorem . يأتي دور طريقة مونتي كارلو في توليد هذه الجمل ضمن طاقم معين وباعتماد مولدات الأرقام العشوائية Random Number

Generators ومن ثم حساب متوسط الطاقم للخاصة المطلوبة. ونميز بين عدة أنواع من مونتي كارلو:

- تكامل مونتي كارلو، رأينا هذه الطريقة سابقاً ورأينا أنها تناسب التكاملات المتعددة الأبعاد التي تظهر كثيراً في الفيزياء الإحصائية مثلاً تابع مجموع الحالات الذي هو تكامل على الفضاء الطوري من رتبة $3N$ حيث N عدد الجسيمات في الجملة.

$$z = \int \exp(-\beta V) . dr \quad (9)$$

أي إذا كان لدينا $N=100$ سيكون لدينا تكامل على 300 متحول !! لا يمكن إجراء مثل هذا التكامل بالطرق المعتادة (سيمبسون أو شبه المنحرف) و لكن ممكن استخدام طريقة تكامل مونتي كارلو في هذه الحالة (راجع الفصل الثالث).

- طريقة مونتي كارلو المباشرة التي نستخدم فيها الأرقام العشوائية لتمثيل تأثير ظاهرة معقدة ودون الاهتمام بتفاصيل الجملة المدروسة مثل محاكاة حركة المرور على شبكة من الطرق ضمن مدينة دمشق مثلاً. هذه الطريقة لها تطبيقات في الفيزياء وغيرها. أو من أجل جملة فيزيائية معينة
a- نقوم على الكمبيوتر بتوليد جمل متطابقة عشوائياً (طواقم) بشكل مستقل تماماً بعضها عن بعض و ذلك ضمن الشروط المحددة للجملة من حجم و ضغط.

b- نحسب عامل بولتزمان و تابع مجموع الحالات:

$$z = \frac{V^N}{\tau_{\max}} \sum_{\tau=1}^{\tau_{\max}} \exp(-\beta V) \quad (10)$$

و من ثم نحسب الخاصة الفيزيائية المطلوبة من العلاقة (متوسط الطاقم):

$$(11) \langle A \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N A_i \exp(-\beta U_i)}{\sum_{i=1}^N \exp(-\beta U_i)}$$

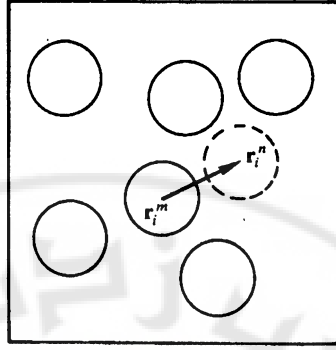
- طريقة متروبوليس Metropolis Monte Carlo أو خوارزمية ميتروبوليس، التي تعتمد على توليد الجمل العشوائية بحيث يتم توليد كل جملة من الجملة السابقة لها وفق ما يسمى رياضيا بسلسلة ماركوف Markov chain يمكن باستخدام هذه الطريقة حساب الخصائص السكونية للجملة المدروسة سواء كانت كلاسيكية أم كمومية.

لنأخذ الطاقم القانوني [N V T] نعلم أن وجود الجملة في حالة s يتناسب مع

$$P_s \propto \exp[-\beta E_s] \quad (12)$$

أي يجب أن تخضع التشكيلات العشوائية التي نريد توليدها من الجمل إلى هذا الاحتمال، أي نطبق تكامل مونتي كارلو على الفضاء الطوري للجملة المدروسة ولكن بإعطاء أهمية أكبر للتشكيلات configuration التي تتوافق و العلاقة (12).

نستطيع أن نولد على الحاسب تشكيلات (نقاط في الفضاء الطوري) عشوائية ومستقلة بعضها عن بعض وقبول هذه التشكيلات بحسب الاحتمال (12). ولكن باتباع هذه الطريقة سنقوم بتوليد عدد هائل من التشكيلات ومعظمها له احتمال حدوث ضئيل جدا. الطريقة الأفضل لتوليد هذه التشكيلات هي الطريقة التي اقترحها متروبوليس عام 1953 وتعتمد هذه الطريقة على توليد تشكيلات عشوائية بحيث نولد كل تشكيل من التشكيل السابق بتغيير موقع أحد الجسيمات مثلا انظر الشكل (2).



الشكل (2) توليد حالة من حالة سابقة بغزاحة ذرة بمقدار r

من أجل غاز أحادي الذرة أو سائل نتبع الخطوات التالية لإجراء حسابات مونتي كارلو: عوضاً عن توليد تشكيلات عشوائية عديدة للجملة المدروسة حيث يكون احتمال حدوث عدد كبير من هذه التشيكالات، عوضاً عن التوليد العشوائي للتشكيلات نركز اهتمامنا على التشكيلات ذات الاحتمال الأكبر في الحدوث. خوارزمية متروبوليس تقوم بذلك وفق الخطوات التالية:

1- نحدد حجم الجملة وكثافة الجسيمات العددية فيها $n = \frac{N}{V}$.

2- نطبق شروطاً حدية على الجملة.

3- نبدأ من تشكيل ابتدائي معين للجملة.

4- نختار إحدى الجسيمات ونحركها بمقدار صغير δr .

5- نحسب تغير الطاقة الناتج عن تحريك هذه الجسيمة

$$\Delta U = (\sum U_{ij}(new) - \sum U_{ij}(old))$$

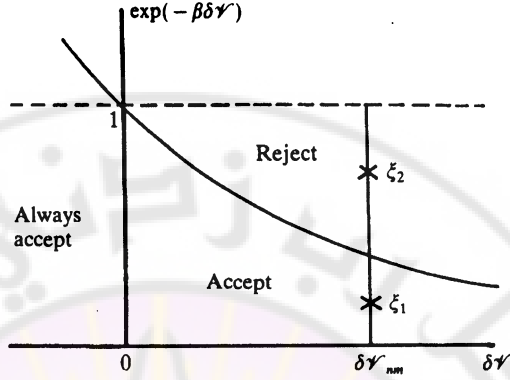
6- إذا كانت $\Delta U < 0$ نقبل هذه الخطوة، إذا كانت $\Delta U > 0$

نقبل الخطوة باحتمال $e^{-\beta \Delta U}$. انظر الشكل (2).

7- نكرر الخطوات 4-6 عدة آلاف من المرات ثم نحسب

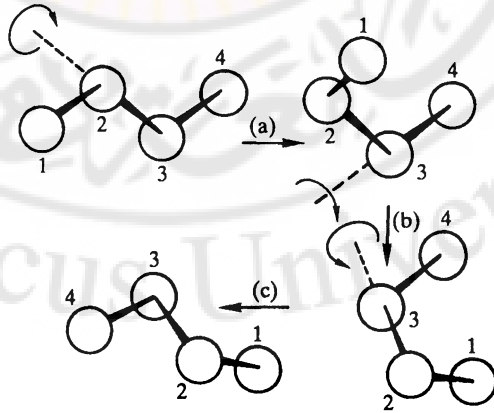
المتوسط للخاصة الفيزيائية المطلوبة من العلاقة:

$$(13) \langle A \rangle = \frac{\sum A_i \exp(-\beta U_i)}{\sum \exp(-\beta U_i)}$$

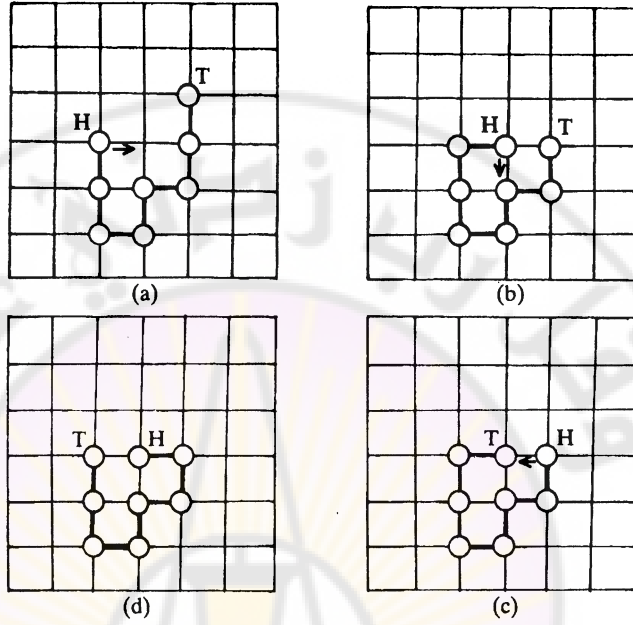


الشكل (3) قبول التشكيلات المولدة بطريقة مونتي كارلو

كما يمكن توليد تشكيلات عشوائية لغاز مكون من جزيئات و ذلك بتحريك مركز ثقل الجزيئات مسافة Δr بالإضافة إلى إزاحة دورانية انظر الشكل (4)، و من أجل البوليميرات فيمكن اعتبار البوليمير موزعاً على شبكة بحيث تقع كل ذرة على أحد عقد هذه الشبكة و يمكن توليد تشكيلات مختلفة بإزاحة البوليمير على هذه الشبكة انظر الشكل (5) و من ثم حساب الخواص الترموديناميكية و خصوصاً مقدار المسافة بين الرأس و الذيل Head to Tail distance من أجل البوليمير و التي تؤدي دوراً هاماً في وصف البوليميرات.



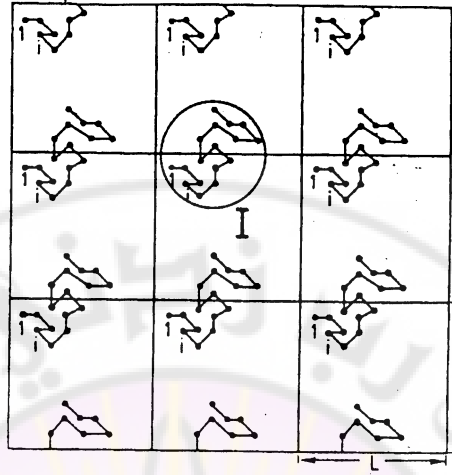
الشكل (4) طريقة ممكنة لأزاحة جزيء بطريقة مونتي كارلو



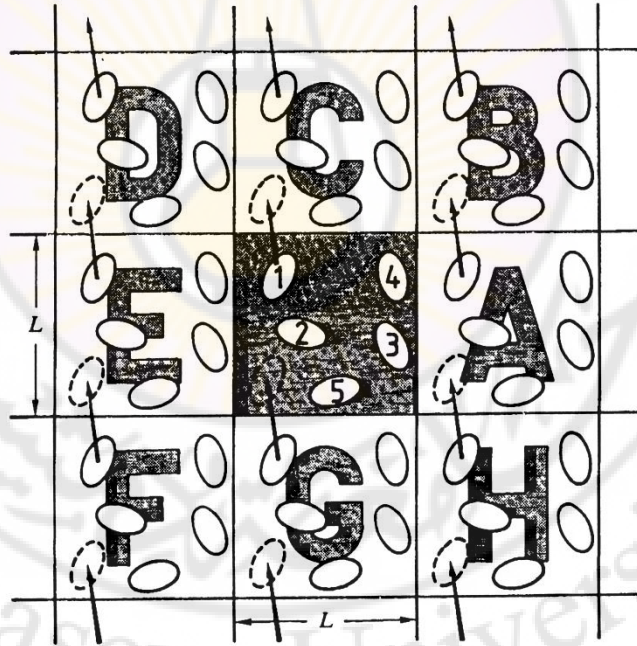
الشكل (5) بعض التشكيلات الممكنة لتحريك بوليمير على شبكة

ملاحظة حول الشروط الحدّية:

من أجل التغلب على تأثيرات السطوح يجب أن نطبق شروطاً حدّية دورية، و ذلك بتكرار الصندوق في المركز بحيث نشكل شبكة لا نهائية و بحيث لا يكون لدينا أي سطح من أجل الصندوق المركزي. انظر الشكلين 6 و 7.



الشكل (6) مثال عن الشروط الحدية الدورية من أجل بوليمير



الشكل (7) مثال عن الشروط الحدية الدورية

كثيرا ما تستخدم طريقة مونتي كارلو مع نموذج أيسينغ و ذلك باتباع الخطوات التالية:

- أولاً: نقوم بإعداد الجملة و ذلك بأن نعرف شبكة تحتوي على N موقع و كل موقع i يمتلك سبين s_i ، و يجب أن نعرف نقاط الجوار لكل نقطة لأننا نحتاجها في حساب الطاقة و كذلك يجب تعريف التأثير المتبادل J exchange interaction و درجة الحرارة للجملة.

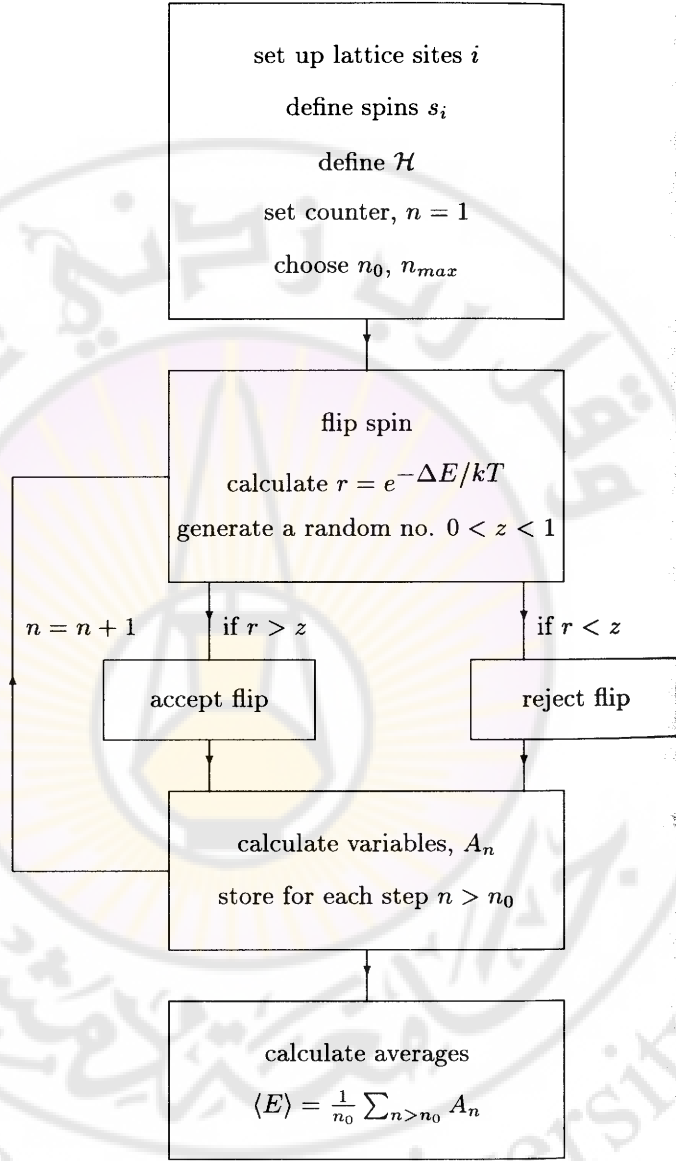
و يجب اتباع طريقة ما لمعالجة السبينات التي تقع عند الحدود (عند السطح) إما إن نطبق شروطاً دورية كما ذكرنا سابقاً- و هو الحل الأفضل - أو نتركها بعدد أقل من نقاط الجوار. و كذلك يجب أن نأخذ بعين الاعتبار كيف سنختار التشكيل الأولي الذي ستبدأ المحاكاة منه، و في الحقيقة سوف تتقارب المحاكاة إلى وضع توازن على كل حال لكن قد تأخذ العملية وقتاً أطول من أجل تشكيلات أولية معينة.

- ثانياً: نولد التشكيلات الجديدة بحسب سلسلة ماركوف:

- 1- نختار موقعاً معيناً من الشبكة (سبين) بشكل عشوائي أو بشكل متسلسل نحسب المقدار $r = e^{-\Delta E / k.T}$ حيث $\Delta E = E_f - E_i$ و المرتبط بقلب السبين.
- 2- نقارن المقدار r مع رقم عشوائي $0 < z < 1$.
- 3- نثبت السبين في الوضع الجديد إذا كان $r > z$.
- 4- نحسب الخاصة الترموديناميكية المطلوبة و نخزنها في الحاسب من أجل أخذ قيمة متوسطة لاحقاً.

- ثالثاً: حساب القيمة الوسطية

نأخذ متوسط القيم الترموديناميكية المحسوبة في كل خطوة و لكن يجب أن ننتبه إلى عدم إدخال القيم الناتجة عن التشكيلات الأولية في هذه المتوسطات.



الشكل (8) مخطط خوارزمية مونت كارلو من أجل نموذج أيسينغ

ملاحظة: يجب استخدام مولدات جيدة للأرقام العشوائية في مثل هذه الطرق للمحاكاة و ذلك لتجنب حدوث أخطاء منهجية systematic errors في توليد التشكيلات المتتالية. كما يمكن اللجوء إلى خوارزميات كثيرة متوافرة لتوليد الأرقام العشوائية Random Number Generator.

2-2 طريقة التحريك الجزيئي Molecular Dynamics:

تعتمد هذه الطريقة على مكاملة معادلات الحركة للجملة المدروسة عددياً. أي يمكن اعتبارها محاكاة لحركة الجملة بدلالة الزمن، أي تتحرك الجملة على مسار في الفضاء الطوري تحدده معادلات الحركة وتعطينا هذه الطريقة القدرة على حساب الخواص السكونية (عامل بنية مثلاً) وكذلك الخواص الحركية (المتعلقة بالزمن) للجملة المدروسة مثل خواص النقل انتقال الحرارة مثلاً.

لنأخذ جملة مؤلفة من N جسيمة كلاسيكية ضمن حجم أبعاده $L_1 \times L_2 \times L_3$ هذه الجسيمات تتبادل التأثير فيما بينها (حالة غاز غير مثالي) وللتبسيط سنعتبر أن هذا التأثير يمكن التعبير عنه على شكل قوى ثنائية $F(r)$ تعتمد على البعد بين الجسيمتين r فقط. أي يمكن كتابة القوة بين الجزيئات بالشكل :

$$(14) F_i(R) = \sum_{\substack{i=1,N \\ i \neq j}} F(r_i - r_j)$$

ونستطيع كتابة معادلة الحركة على الشكل:

$$(15) \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{F_i(R)}{m_i}$$

حيث m_i كتلة الجسيمة i . طريقة التحريك الجزيئي تتضمن الحل العددي للمعادلة (9) من أجل مجموعة كبيرة من الجسيمات. ومن أجل تحقيق ذلك نتبع الخطوات التالية :

- نحدد عدد الجسيمات في الجملة و نوع التأثير المتبادل فيما بينها (كمون ليونارد-جونز مثلا) ودرجة الحرارة ($[n V T]$ الطاقم القانوني). ونحدد إحداثيات المكان والدفع لكل جسيمة من الجملة. بالإمكان مثلا استخدام توزيع ماكسويل بولتزمان للسرع.

- نبدأ بالحسابات حتى تصل الجملة إلى وضع التوازن. هذه الحسابات تتضمن مكاملة معادلات الحركة على مجال زمني معين وبأخذ خطوات مقدارها h وأشهر الطرق لإجراء هذه المكاملة هي خوارزمية فيرليت Verlet Algorithm والتي تأخذ الشكل:

$$(16) r(t+h) = 2r(t) - r(t-h) + h^2 F[r(t)]/m$$

حيث $r(t)$ موضع الجسيمة في اللحظة $t=nh$. لدينا علم مسبق بالإحداثيات عند $t=0$ نحسب هذه القيم بعد خطوة واحدة h وبأخذ $m=1$ نستطيع أن نكتب:

$$(17) r(h) = r(0) + hV(0) + \frac{h^2}{2} F[r(t=0)]$$

ونستطيع حساب السرعة من العلاقة:

$$(18) V(t) = \frac{r(t+h) - r(t-h)}{2h} + O(h^2)$$

أو نستطيع حساب السرعة وإحداثيات المكان في كل خطوة من العلاقات:

$$(19) r(t+h) = r(t) + hV(t) + h^2 F(t)/2$$

$$(20) V(t+h) = V(t) + h[F(t+h) + F(t)]/2$$

- نستمر في العمليات الحسابية أي بمكاملة معادلات الحركة حتى نصل إلى حالة التوازن بالدقة المطلوبة. ونستطيع حساب أي خاصية فيزيائية من العلاقة:

$$(21) \bar{A} = \frac{1}{n} \sum_i^n A_i$$

حيث n عدد الخطوات الزمنية في التكامل العددي.

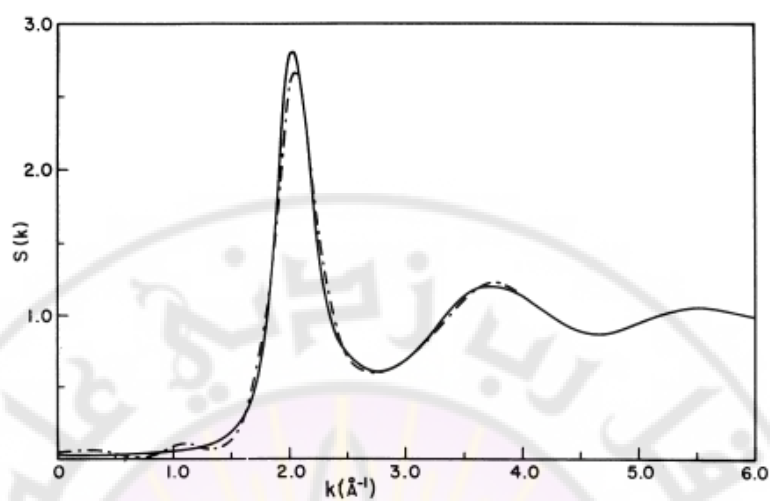
مقارنة بين طريقة مونتي كارلو وطريقة التحريك الجزيئي:

التحريك الجزيئي	مونتي كارلو
- خواص سكونية و ديناميكية	- خواص سكونية فقط (لا تتبع الزمن)
- تعتمد الدقة على طريقة مكاملة و على مقدار الخطوة	لا توجد أخطاء ناجمة عن تكاملات معادلات الحركة أو عن حساب القوى
تعتمد الحسابات صراحة على الزمن	الحسابات لا تتبع للزمن و يمكن معالجة درجات حرية متقطعة، مثل السبينات (نموذج أيسينغ)

- كلا الطريقتين يحتاج تقريبا لنفس الوقت على الحاسب.

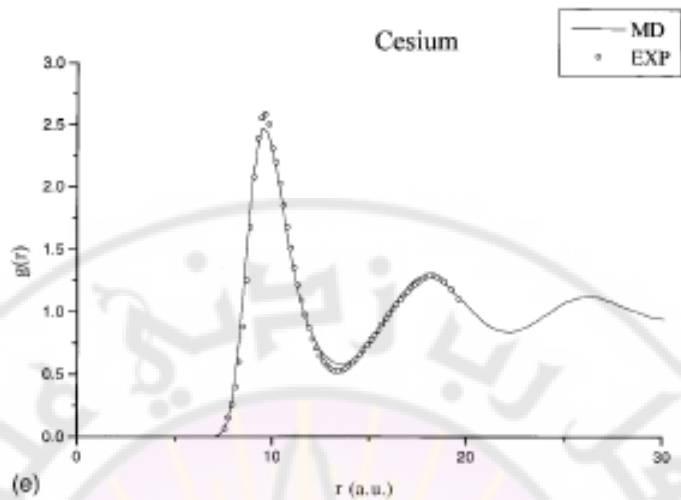
ملاحظة: يمكن مزج الطريقتين إذ نبدأ بمونتي كارلو ومن ثم نستخدم التحريك الجزيئي لإكمال الحسابات.

تتم حسابات من هذا النوع عادة على حواسيب فائقة **super computers** وتدوم أحيانا عدة أيام، ولكن يمكن معالجة جمل صغيرة أو متوسطة على الحواسيب الشخصية.



الشكل (9)

عامل البنية للبيوتاسيوم السائل محسوب بطريقة مونت كارلو، الخط المتقطع هو القيمة التجريبية



الشكل (10)

تابع التوزيع القطري للسيزيوم السائل محسوب بطريقة التحريك الجزيئي،
الخط المنقطع هو القيمة التجريبية



The background of the page features a large, faint watermark of the Damascus University logo. The logo is circular, with a central yellow lamp (Diya) emitting rays. The top arc of the circle contains the Arabic text 'وقل رب زدني علما' (Qul Rabbi Zidni 'Alima). The bottom arc contains the Arabic text 'جامعة دمشق' (Jama'at Dimashq) and the English text 'Damascus University'.

الباب الثاني الجزء العملي



مقدمة في لغة البرمجة

الـ FORTRAN

1-مقدمة:

لغة البرمجة الفورتران هي من أكثر اللغات استخداما فيما يخص الحسابات العددية في الفيزياء خصوصا وفي معظم العلوم الأساسية و الهندسية، وذلك بسبب سهولة كتابة العلاقات الرياضية وكذلك سرعة تنفيذ الحسابات التي تتطلب تكراراً لمرات طويلة كما هي الحالة في كثير من الخوارزميات العددية (لغة الـ C تتحسن باستمرار في هذا المجال) كما أنه يوجد مخزون هائل من مكتبات البرامج مكتوبة بهذه اللغة بعضها مؤلف من ملايين الأسطر وبالتالي من الصعب جدا استبدالها كما أن الإضافات الجديدة على الفورتران في فورتران 90 وفورتران 95 سمحت بتطوير البنى البرمجية مما أعطى الفورتران قدرات جديدة مثل البرمجة المتوازية Parallel programming التي تستخدم بشكل واسع من أجل إجراء الحسابات باستخدام الحواسيب الفائقة supercomputers، وكذلك البرمجة الجزئية Modular programming.

ولكن القدرات الرسومية بقيت ضعيفة باستخدام الفورتران و الأفضل استخدام برامج خاصة بالرسم أو لغات أخرى مثل C, C++, أو JAVA. أو البرمجيات التجارية الجاهزة مثل Origin أو البرامج الرياضية مثل MathCad أو Mathematical أو Maple أو MatLab.

فوائد استخدام لغة الفورتران:

- بساطة عبارات هذه اللغة.
- وجود لغة الفورتران منذ بدايات الحواسيب و تعد من أوائل لغات البرمجة.
- توافر العديد من مترجمات الفورتران ForTran Compilers.
- تستخدم بشكل واسع في الحسابات العلمية و التقنية.
- مناسبة جدا للحسابات العددية التي تتطلب دقة عالية.
- لا بد من وضع مخطط لحل المسألة حتى تبرز في الفورتران.
- يوجد عدد كبير من المكتبات البرمجية المتداولة عالميا و المكتوبة بلغة الفورتران و تشمل مختلف التطبيقات العلمية.
- مترجمات الفورتران ذات كفاءة عالية.
- أول لغة برمجة استخدمت نظام موحد عالميا International Standard.
- تتطور باستمرار مع توافق تام مع النسخ الأقدم.
- هي اللغة المستخدمة بشكل أساسي في الحواسيب الفائقة . Supercomputers

ملاحظة: التسمية فورتران FORTRAN أتت من عبارة Formula Translation،
ونقصد في هذا المقرر بالفورتران Fortran 77.

2- بعض التعاريف:

البتة Bit: في لغة الكمبيوتر هي خانة عددية من نظام العد الثنائي Binary Digit.
البايت Byte = 8 Bit.

Integer : عدد صحيح يجب كتابته دون فواصل عشرية ويمكن أن يكون سالباً أو موجباً ويحتاج تخزينه إلى 4 Byte (وفق لغة الفورتران).

Real : عدد حقيقي ويكتب باستخدام الفواصل العشرية و الأسس إذا دعت الحاجة ويمكن تخزينه بإحدى الصياغات التالية:

- 1- دقة أحادية 4 Byte. يرمز لها ب E. حوالي 7 خانات عشرية.
 - 2- دقة مضاعفة 8 Byte. يرمز لها ب D. حوالي 16 خانات عشرية.
 - 3- دقة رباعية 16 Byte. يرمز لها ب Q. حوالي 33 خانة عشرية.
- مقبول على بعض الحواسيب التي تحتوي على معالجات 64 Bit.

ينصح دائماً باستخدام الدقة المضاعفة في الحسابات العلمية.

أمثلة:

Integer :

173
91
-12224

Real :

7 E3 = 7000
1928.21D01 = 19282.1
5.73 D -2 = 0.0573

البرنامج التالي يبين الفرق بين الدقة الأحادية والدقة المضاعفة: وذلك بإضافة واحد على مليون إلى العدد 1 مليون مرة وذلك باستخدام دقة أحادية ودقة مضاعفة و مقارنة الناتجين.

C-----

c Program 1

c Computational Physics class

c Damascus University - Physics department

c -----

c student Name :

c Date:

c -----

c Declarations

real x

double precision y

integer i

c

c If we start with one, and add one-millionth a million
c times, what do we get?

x = 1.

y = 1.d0

write(*,*) ' This may take a while...'

do i = 1, 1000000

x = x + 0.000001

y = y + 0.000001d0

end do

write(*,*) ' Which is closer to two, 'x,' or','y','?'

end

البرنامج التالي يبين الفرق بين الدقة الأحادية والدقة المضاعفة (والدقة الرباعية

إذا كان الجهاز المستخدم يسمح بذلك) وذلك بحساب $\frac{1}{3}$ بدقة أحادية ودقة

مضاعفة ومقارنة النتيجة:

c-----

c Program 2

c Computational Physics class

c Damascus University - Physics department

c -----

c student Name :

c Date:

c -----

c Real*4 A

REAL*8 B

c REAL*16 C

A=1./3.

```

B=1./3.
C=1./3.
WRITE (6,10) A
WRITE (6,11) B
c WRITE (6,12) C
10 FORMAT(E20.20)
11 FORMAT(D30.20)
12 FORMAT(D50.40)
STOP
end

```

ملاحظة : إذا أردت كتابة أسماء أو أحرف ضمن برنامج الفورتران فيجب كتابتها بين فاصلتين علويتين ويجب أن تكون الخانة الأولى حرفاً حصراً.
مثلا :

‘ DATA ‘ , ‘ B29 ‘ , ‘ speed ‘ ,.....

ملاحظة : يستحسن التصريح بنوع المتحولات في بداية برنامج الفورتران مثلاً:

real*4متحول حقيقي بدقة 32 Bit

real*8متحول حقيقي بدقة 64 Bit

real*16متحول حقيقي بدقة 128 Bit

integerعدد صحيح

إذا لم تعلن عن المتحولات في بداية البرنامج فسوف يفترض الفورتران ما يلي :

الأحرف بين a - h و o - z هي أعداد حقيقية بدقة 32 Bit و الأحرف من I - M هي أعداد صحيحة.

3 - كيفية كتابة العمليات الحسابية:

العمليات الحسابية هي :

الجمع ويرمز له +
الضرب ويرمز له *
الأس ويرمز له **
الطرح ويرمز له -
القسمة ويرمز لها /

ينفذ الكمبيوتر الأس ثم الضرب أو القسمة أولاً ثم الجمع أو الطرح.

$$A*B+C*D**I$$

ينفذها الكمبيوتر كالتالي:

$$1-A*B \text{ أولاً ويخزنها في مكان لنسميه } X.$$

$$2-D**I \text{ ويخزنها في مكان لنسميه } Y.$$

$$3-C*Y \text{ ويخزنها في مكان لنسميه } Z.$$

$$4-X+Z \text{ وهي النتيجة النهائية.}$$

بعض الأمثلة:

$$\Rightarrow a*b+c*d**3 \text{ - } ab+cd^3$$

$$\Rightarrow a*(b+c)*(a**4) \text{ - } a(b+c)a^4$$

ينصح دائماً باستخدام الأقواس لمنع الالتباس.

$$\Rightarrow a*b+(c*d)**5 \text{ - } ab+(cd)^5$$

$$\Rightarrow ((a*b)+(c*d))**3 \text{ - } (a*b+c*d)^3$$

ملاحظة: كتابة $A=B$ تعني في لغة البرمجة تخزين B في A وبالتالي مسح المعلومات

المخزنة في A سابقاً. أي العلاقة السابقة هي علاقة استبدال وليست معادلة رياضية

حيث يحجز الكمبيوتر مكاناً في الذاكرة يسميه A ويخزن فيه المعلومات الموجودة في B .

$A=B+C$ يمكن أن تكون علاقة استبدال أيضاً و لكن $B+C=A$ هي علاقة استبدال

خاطئة .

أي يجب دائماً في مثل هذه العلاقات أن يكون الطرف اليسار رمزاً ما والطرف الأيمن

علاقة ما.

4- كيفية كتابة برنامج الفورتران:

يتم تقسيم شاشة الكمبيوتر إلى 85 عمود على الشكل التالي:

85.....73|727|6|3421
| | | |

العمود الأول : لوضع ملاحظة ("C comment the letter") أو يترك فارغا. عند وجود الحرف C أو أي رمز آخر في هذا العمود يعني أن الكمبيوتر لن يقرأ هذا السطر لأن هذا السطر هو ملاحظة للمبرمج Comment.

- الأعمدة من 2 وحتى 5: لترقيم أسطر برنامج الفورتران إذا كان هذا ضروريا. ترقيم الأسطر في الفورتران لا يكون لجميع الأسطر (كما في لغة اليبسيك) ولكن فقط لبعض الأسطر التي نريد أن نشير إليها تحديدا.

- العمود 6 : يترك فارغا أو يوضع فيه رمز ما (* مثلا) إذا كان السطر استمرارا للسطر السابق. مثلا إذا كانت العلاقة التي نكتبها طويلة جدا فيمكن متابعة كتابتها في الأسطر التالية بهذه الطريقة.

- الأعمدة من 7 وحتى 72 : يكتب فيها برنامج الفورتران. لا يقوم مترجم الفورتران Fortran compiler بمعالجة أي شيء بعد العمود 72.

- الأعمدة 73 وحتى 85 : لا يكتب فيها أي شيء.

البرنامج التالي يعالج الأعداد العقدية: يتم تعريف عدد من عقديين W1 و W2 ثم يحسب مجموعهما و فرقهما وحاصل القسمة و الجداء و يرفع W1 إلى قوة 5، و يخزن النواتج في Z1 و Z2 و يقوم بطباعتها.

لاحظ أن الأعداد العقدية تخزن في الفورتران على شكل أزواج من الأعداد الأول منها هو الجزء الحقيقي و الثاني هو الجزء التخيلي.

1|2345|6|772|73.....85

```

c-----
c      Program 3
c      Computational Physics class
c      Damascus University - Physics department
c      -----
c      student Name :
c      Date:
c      -----
c      program to test complex arithmetic
complex*16 z1,z2,w1,w2
W1=(2.D0,-7.D0)
W2=(-11.D0,9.D0)
Z1=W1+W2
WRITE (6,10) Z1
10  FORMAT('SUM =',2D20.10)
Z2=W2-W1
WRITE (6,10) Z2
11  FORMAT(' DIFFERENCE = ',2D20.10)
Z1=W1/W2
WRITE (6,10) Z1
12  FORMAT('DIV =',2D20.10)
Z2=W2*W1
WRITE (6,10) Z2
13  FORMAT(' PRODUCT = ',2D20.10)
Z1=W1**5
WRITE(6,14)Z1
14  FORMAT(' W1**5 = ',2D20.10)
STOP
END

```

ملاحظة: إذا كان لدينا الأعداد الصحيحة $I=5$ و $J=2$ والأعداد الحقيقية

$$B=7.4D1 \text{ و } A=2.3D0$$

فإن ناتج العمليات التالية في الفورتران هو :

الناتج

العملية

$X=A+B$	=	9.7	or	9,7D0
$K=A+B$	=			9
$M= I/J$	=			2
$N=J/I$	=			0
$Y= I/J$	=			2.5
$Z= 5.D0/2.D0$	=			2.5
$N= 5.0D0/2.0D0$	=			2

أي يجب دائماً الانتباه إلى المتحولات والرموز المستخدمة التي تمثل عدداً صحيحاً أو عدداً حقيقياً مثلاً استخدام الرمز K في الطرف الثاني من الجدول السابق يعني أن الناتج سيكتب على أنه عدد صحيح (9).

5 - العمليات المنطقية في الفورتران:

العملية المنطقية	كيفية كتابتها بالفورتران
$A>B$	A.GT.B
$A\geq B$	A.GE.B
$A<B$	A.LT.B
$A\leq B$	A.LE.B
$A=B$	A.EQ.B
$A\neq B$	A.NE.B

6 - التوابع الرياضية في الفورتران:

التابع الرياضي	الكتابة في الفورتران
$y = \sqrt{x}$	$Y = \text{sqrt}(x)$
$y = \ln x$	$Y = \log(x)$
$y = e^x$	$y = \exp(x)$
$y = \sin(x)$	$Y = \sin(x)$
$y = \cos(x)$	$y = \cos(x)$
$y = \tan(x)$	$y = \tan(x)$
$y = \tan^{-1}(x)$	$Y = \text{atan}(x)$
$y = \sin^{-1}(x)$	$y = \text{asin}(x)$
$y = \cos^{-1}(x)$	$y = \text{acos}(x)$
$y = \cosh(x)$	$y = \cosh(x)$
$y = \sinh(x)$	$y = \sinh(x)$
$y = \tanh(x)$	$y = \tanh(x)$
$y = x $	$y = \text{abs}(x)$

ملاحظة: تكتب جميع التوابع السابقة بدقة مضاعفة وذلك بإضافة الحرف D قبل التابع
مثل :

$Y = \text{DSIN}(X)$
 $Y = \text{DABS}(X)$

7- علاقات التحكم والحلقات:

1- علاقة GOTO غير المشروطة: عندما يصل الحاسب إلى تنفيذ أمر GOTO فإنه يتجاوز الأسطر التالية و يذهب إلى السطر ذي الرقم المحدد في عبارة GOTO.

GOTO 109

2- علاقة IF الحسابية:

IF (A) 71,72,73

حيث A هي شرط رياضي ما و الأرقام 71,72,73 هي أرقام أسطر من برنامج الفورتران و تعني :

```
GOTO 71 IF A<0
GOTO 72 IF A=0
GOTO 73 IF A>0
```

عبارة IF الحسابية قديمة ولا ينصح باستخدامها ولكن لا تزال مقبولة في معظم مترجمات الفورتران.

2- علاقة IF المنطقية :

IF (L) excute expression

حيث L هي عبارة منطقية (علاقات أكبر أو أصغر مثلا). إذا كانت العبارة المنطقية محققة ينفذ الكمبيوتر الأمر الذي يليها مباشرة و إذا لم تكن محققة ينتقل إلى السطر التالي.

أمثلة:

```
IF (A.EQ.B ) R=17.4D0
IF (I.LE.K) GOTO 86
IF (J.LT.0) stop
```

3- عبارة IF(Logical statement) THEN

IF (Logical expression) Then

ELSE

ENDIF

ملاحظة : لا تحاول مقارنة الأعداد الحقيقية مع الصفر (أي اختبار إذا كانت تساوي الصفر) في برنامج الفورتران لأن ذلك قد يسبب بعض المشاكل لأن الأعداد الحقيقية تعامل بدقة كبيرة
0.0000000000000001.

ولكن استخدم عبارات أكبر أو أصغر من مقدار صغير جدا، مثلا من الشكل:
IF (DABS(x).LT.D-12)

ملاحظة : كل برنامج فورتران يجب أن يحتوي على أمر توقف STOP واحد على الأقل .

: Stop يعطي الأمر بالتوقف

: Return يعطي الأمر بالعودة إلى البرنامج الرئيسي من البرنامج الفرعي

: End يعطي إشارة بانتهاء عمل البرنامج

البرنامج التالي يحسب التوابع الجيبية sin و cos و tan من أجل زوايا تتراوح بين الصفر و $\pi/2$ راديان و ذلك بفواصل مقدارها 0.01 Rad و يطبع النتائج في جدول (انظر السطر 10).

```

C-----
C      Program 4
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
C      PROGRAM TO TEST SOME TRIGONOMETRIC
FUNCTIONS
C
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      X=0.0D0
      H=0.01D0
  
```

```

      HALFPI=1.5760D0
17  continue
      A=DSIN(X)
      B=DCOS(X)
      C=DTAN(X)
      WRITE (6,10) X,A,B,C
10  FORMAT (6 D20.10)
      X=X+H
      IF (X.GE.HALFPI) STOP
      GOTO 17
stop
END

```

البرنامج التالي يحل المعادلات الجبرية من الدرجة الثانية بطريقة المميز حيث يطلب البرنامج إدخال قيم الأمثال a, b, c (التي تعبر عن المعادلة $a.x^2+b.x+c=0$) و يقوم بإيجاد جذور هذه المعادلة سواء كانت حقيقية أم عقدية و يطبع الناتج.

```

C-----
C      Program 5
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C-----
C      student Name :
C      Date:
C-----
C      PROGRAM TO CALCULATES THE ROOTS OF A 2d
ORDER
C      ALGEBRIC EQUATION
C
      WRITE (6,33)
33  FORMAT( ' input a,b,c ' )
      READ*, a,b,c
      print*, a,b,c
      IF (ABS(A).LT.1.D-2) GOTO 90
      DELTA=B*B-4*A*C

```



```

RAD1X=SQRT(ABS(DELT A))
IF (DELT A.LT.0.D0) GOTO 70
R1=(-B+RAD1X)/(2*A)
R2=(-B-RAD1X)/(2*A)
WRITE(6,63) R1,R2
63  FORMAT( ' REAL ROOTS ARE ',2D20.10)
    GOTO183
70  CONTINUE
    R=-B/(2.D0*A)
    WRITE (6,73) R
73  FORMAT( ' REAL PART OF THE ROOT IS ', 2D20.10)
    Q=RAD1X/(2.D0*A)
    WRITE (6,74) Q
74  FORMAT( ' IMAGINARY PART OF THE ROOT = ',
D20.10)
    GOTO 183
90  CONTINUE
    WRITE (6,138)
138  FORMAT( ' A LESS THAN 0 ' )
    R=-C/B
    WRITE(6,139)R
139  FORMAT( 'b SINGLE ROOT = ',D20.10)
183  CONTINUE
    STOP
    END

```

8- كيفية كتابة المصفوفات في الفورتران:

تعرف المصفوفة بأنها مجموعة من البيانات التي تعطى اسماً ما. ويمكن أن تكون المصفوفة ذات بعد واحد وحتى سبعة أبعاد على بعض التجهيزات. يجب الإعلان عن المصفوفة وعن حجمها في بداية البرنامج وذلك لحجز الحجم الملائم في الذاكرة ويتم ذلك بالعبارة:

```

DIMENSION X(100)
DIMENSION Y(10,10,10)

```

تحتجز العبارة الأولى مكاناً في الذاكرة ل مصفوفة اسمها X ذات بعد واحد وتحتوي على 100 عنصر بينما تحتجز العبارة الثانية مصفوفة ثلاثية الأبعاد 10x10x10.

البرنامج التالي يحسب القيمة الوسطية، إذ يحجز مصفوفة score لألف عنصر و يقوم بجمع العناصر المدخلة ثم يحسب الوسطي، يجب إدخال الرقم صفر لإيقاف البرنامج.

```

C-----
C      Program 6
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
C      student Name:
C      Date:
C-----
C      MEAN VALUE
C      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C      DIMENSION SCORE(1000)
C      SUM=0.00
C      KOUNT=0
19CONTINUE
C      KOUNT=KOUNT+1
C      READ *, SCORE(KOUNT)
C      SUM=SUM+SCORE(KOUNT)
C      if (SCORE(KOUNT).eq.0) goto 90
C      GOTO 19
90 CONTINUE
10 FORMAT (D20.10)
C      KOUNT=KOUNT-1
C      AVE=SUM/(DFLOAT(KOUNT))
C      WRITE (6,11), KOUNT
11 FORMAT ('6 NODF SCORE IS',I)
C      WRITE (6,12) AVE
12 FORMAT (' 6 MEAN IS ',D20.10)

```

STOP
END

ملاحظة: يجب الانتباه إلى عدم تجاوز العدد المحدد للمصفوفة في بداية البرنامج.

DIMENSION X(100)

Y=X(101) WORMG
K=51
WRONG Z=X(2*K)

9- حلقات DO (DO LOOPS):

وتكتب بالشكل :

DO x l=m1,m2,m3

حيث m1 رقم البداية. و m2 رقم النهاية و m3 رقم الخطوة المأخوذة في كل حلقة
و x رقم الحلقة.

مثال:

DO 9 N=0,100,2

CONTINUE 9

في هذا المثال حلقة DO رقمها 9 أي تنتهي عند السطر رقم 9 ، و تبدأ الحلقة بقيمة N
من الصفر و تتزايد في كل تكرار حتى 100 و ذلك بخطوة مقدارها 2.
ملاحظة: ليس من الضروري كتابة كلمة continue و لكن من الضروري وضع رقم
الحلقة.

البرنامج التالي يحسب قيم بعض التتابع المثلثية ويكتبها في جدول، شبيه بالبرنامج 4
ولكن يستخدم حلقة DO عوضا عن أمر GOTO:

```

C-----
C      Program 7
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C-----
C      student Name :
C      Date:
C-----
C      CALCULATE SOME VALUES OF TRIGONOMETRIC
C      FUNCTION AND TABULATE IT
DO 17 L=1,157
X=0.01D0*DFLOAT(L)
P=SIN(X)
Q=COS(X)
R=TAN(X)
WRITE(6,13)X,P,Q,R
13  FORMAT( 4D20.10)
17  CONTINUE
STOP
END

```

البرنامج التالي يحسب القيمة الوسطية لعشرة أعداد، يقرأ البرنامج الأعداد العشرة باستخدام حلقة أولى (الحلقة 28)، ثم يجمع الأعداد باستخدام حلقة ثانية (الحلقة 29) و يحسب الوسطي.

غير العدد الكلي للأرقام المدخلة من 10 إلى عدد آخر؟

```

C-----
C      Program 8

```

c Computational Physics class
c Damascus University - Physics department
c -----

c student Name :

c Date:
c -----

c average of 10 numbers
dimension SCORE(100)
N=10
DO 28 L=1,N
READ*, SCORE(L)
28 CONTINUE
SUM=0DO
DO 29 K=1,N
SUM=SUM+SCORE(K)
29 CONTINUE
AVE=SUM/FLOAT(N)
print*,AVE
STOP
END

ملاحظات على كتابة الحلقات:

- 1- يجب الالتزام بالرقم المعطى للحلقة عند تعريفها.
- 2- يسمح بوضع حلقة ضمن حلقة وفي بعض التجهيزات يسمح حتى عشرين حلقة متداخلة.
- 3- إعطاء أمر للخروج من الحلقة مسموح.
- 4- لا يسمح بتقاطع الحلقات أي يجب أن تكون الحلقة محتواة تماما في الحلقة الأولى أو منفصلة عنها.

المثال التالي هو جزء من برنامج لحساب جداء مصفوفتين:

DO 17 L=1,N

```

DO 18 J=1,N
  C(L,J) = 0.0
DO 19 K=1,N
  C(L,J) =(C(L,J)+A(L,K)*B(K,J))
19 CONTINUE
18 CONTINUE
17 CONTINUE

```

10- البرامج الجزئية في الفورتران:

يوجد ثلاثة أنواع من البرامج الجزئية (تضاف كجزء من البرنامج الرئيسي) في الفورتران :

1- عبارة تعريف لتابع:

مثال :

$$\text{poly}(x)=x^{*3}-4D0*x*x-11.D0*x+12.D0$$

لا ينصح باستخدامها في البرمجة.

2- برنامج جزئي لتعريف تابع:

حيث يتم كتابة برنامج جزئي في نهاية البرنامج الرئيسي لتعريف التابع المطلوب ويطلب البرنامج التابع كلما دعت الحاجة لذلك.

البرنامج التالي يعرف تابعاً لحساب القيمة الوسطية وذلك بتعريف تابع amean و استدعائه من ضمن البرنامج الرئيسي:

```

c-----
c      Program 9
c      Computational Physics class
c      Damascus University - Physics department
c      -----
c      student Name :
c      Date:

```

```

c -----
c reads in and calculate the average for <=1000 number
c
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension score(100)
k=0
do 20 l=1,10
read*, score(l)
k=l
20 continue
ave=amean(score,k)
write (6,11)ave
11 format( 'average = ',D20.10)
stop
end
Function amean(s,n)
implicit real *8 (a-h,o-z)
dimension s(n)
ave=0.d0
w=n
do 28 l=1,w
ave=ave+s(l)
28 continue
amean=ave/dfloat(n)
return
end

```

التابع الجزئي التالي يحسب القيمة العاملة لعدد k , اكتب نص البرنامج الرئيسي للاستفادة من هذا التابع الجزئي؟

```

FUNCTION JFACT(k)
IF (K.LT.1) STOP
JFACT=1
DO 100 R=1,K
JFACT=JFACT*R
100 CONTINUE
RETURN
END

```

ملاحظات عن البرامج الجزئية المعرفة لتابع:

1- كل البرامج الجزئية يجب أن تحتوي على أمر RETURN واحد على الأقل.

2- كل البرامج الجزئية يجب أن تحتوي على أمر END واحد على الأقل.

3- يعالج الحاسب البرامج الجزئية بشكل منفصل بعضها عن بعض أي تكرار نفس الرمز في البرامج الجزئية لا يعني أن الرمز يعني الشيء نفسه.

4- اسم التابع يدل على نوع دقته مثلاً

```
JFACT    == > REAL*4  
AMEAN    == > REAL*8
```

3- البرامج الجزئية:

هي حالة أعم من برنامج جزئي لتعريف تابع ما إذ يمكن أن نكتب برنامجاً جزئياً للقيام بأي مهمة عندما يستدعى لذلك من ضمن البرنامج الرئيسي.

مثال:

```
IMPLICIT REAL*8  
.  
.  
OBTAIN A,B  
.  
.  
CALL MATADD(A,B,C,N)  
.  
.  
STOP  
END  
SUBROUTINE MATADD(A,B,C,N)  
IMPLICITE REAL*8 (A-H,O-Z)
```



```

DIMENSION A(N,N),B(N,N),C(N,N)
DO 28 K=1,N
DO 29 L=1,N
C(K,L)=A(K,L)+B(K,L)
29 CONTINUE
28 CONTINUE
RETURN
END

```

هذا البرنامج يطلب قيم المصفوفتين A و B ثم يستدعي البرنامج الجزئي MATADD لجمع هاتين المصفوفتين .
ملاحظات عن البرامج الجزئية:

- 1- لا بد من وجود عبارة في البرنامج الرئيسي لاستدعاء البرنامج الجزئي.
- 2- كل البرامج الجزئية يجب أن تحتوي على أمر RETURN واحد على الأقل.
- 3- كل البرامج الجزئية يجب أن تحتوي على أمر END واحد على الأقل.
- 4- ليس لاسم البرنامج الجزئي أي دلالة من حيث دقة تخزين المعطيات.
- 5- يبدأ البرنامج الجزئي بكلمة subroutine في سطره الأول يليها اسم هذا البرنامج الجزئي.
- 6- يستدعي البرنامج الجزئي باستخدام call متبوعة باسم البرنامج الجزئي.

استعرضنا في هذه المقدمة بعض أهم أوامر و صياغات لغة الفورتران. و لكن هناك كثير من الأوامر الأخرى التي لم تذكر. على الطالب المهتم مراجعة كتب خاصة بالبرمجة بلغة الفورتران أو بعض المواقع على شبكة الإنترنت التي تحتوي على تفاصيل أكثر عن هذه اللغة.

الملحق 1 | يتضمن مقارنة بين الفورتران و الباسكال. و الملحق 2 | يتضمن ملخص بجميع تعليمات لغة الفورتران.

11- ملاحظات حول كتابة البرامج:

يجب أن يكون البرنامج المكتوب واضحاً من حيث طريقة حل المسألة و الخوارزميات المستخدمة ضمن البرنامج و كذلك من حيث الكتابة و لذلك ينصح بإضافة أسطر ملاحظات للمبرمج (باستخدام الحرف C في العمود الأول) نسمي فيها المتحولات أو يوضع فيها شرح جزئي للخوارزمية المستخدمة مما يسهل تشغيل البرنامج أو إجراء تعديلات عليه لاحقاً.

يجب فهم المسألة المراد كتابة برنامج لحلها بشكل جيد أولاً ومن ثم كتابة البرنامج و في حالة المسائل المعقدة يمكن أن نجزئ المسألة على أجزاء و محاولة وضع طرق حل هذه الأجزاء مما يسهل معالجة المسألة الأساسية. يسمى مثل هذا النهج "التصميم من الأعلى إلى الأسفل" Top-down design

حيث يمكن أن نضع هيكلية حل المسألة المطلوبة و التي تبدأ بتجزئة المسألة و من ثم كتابة برامج جزئية لحل الأجزاء التي يستدعيها البرنامج الأساسي و قت اللزوم. كما ينصح باستخدام أسماء للمتحولات تذكر بالمعنى الفيزيائي للمسألة مثلاً من أجل استخدام قانون نيوتن الثاني يمكن أن نسمي المتحولات بأسمائها الفيزيائية:

$$\text{Force} = \text{mass} * \text{acceleration}$$

هذا الإجراء إذا كان ممكناً يسهل عملية قراءة البرنامج و فهم العلاقات المستخدمة فيه.

سنستخدم بيئة التطوير الفورتران 5 Visual FORTRAN و الذي يستخدم Microsoft Developer Studio كواجهة للعرض مما يسهل طباعة وتشغيل برامج

الفورتران لأنها ستعرض باستخدام واجهات الويندوز و باستخدام الألوان التي تشير إلى تعليمات الفورتران المختلفة. و هي شبيهة بالواجهة المستخدمة في لغات برمجة أخرى مثل C++ أو Java و غيرها.

تطبيق حل جملة معادلات خطية بطريقة الحذف

```
C-----
C      Program 10
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
dimension A(100,100),x(100),b(100)
integer ndim,n
real det,x
ndim=100
n=3
read (*,*) ((A(k,l),k=1,3),l=1,3)
print*, A(3,3)
read (*,*) (b(k), k=1,3)
call LUsolve( A, x, b, det, ndim, n )
print*, x(1)
stop
end

      Subroutine LUsolve( A, x, b, det, ndim, n )
*-----*
* This subroutine solves the linear set of equations *
* * *
*      A x = b *
* * *
* by the method of L U decomposition. *
* * *
* INPUT:  ndim  the size of the arrays, as dimensioned *
```

```

*           in the calling routine
*       n   the actual size of the arrays for
*           this problem
*       A   an n by n array of coefficients,
*           altered on output
*       b   a vector of length n
*
* OUTPUT:  x   the 'solution' vector
*          det the determinant of A. If the
*              determinant is zero, A is SINGULAR.
*-----*
integer ndim,n,order(100),i,j,k, imax,itemp
double precision a(ndim,ndim),x(ndim),b(ndim),det
double precision scale(100), max, sum, temporary
if(n.gt.100)stop ' n too large in LUsolve'
det = 1.d0
*
* First, determine a scaling factor for each row. (We
* could "normalize" the equation by multiplying by this
* factor. However, since we only want it for comparison
* purposes, we don't need to actually perform the
* multiplication.)
*
DO i = 1, n
  order(i) = i
  max = 0.d0
  DO j = 1, n
    if( abs(a(i,j)) .gt. max) max = abs(a(i,j))
  END DO
  scale(i) = 1.d0/max
END DO
*
* Start the LU decomposition. The original matrix A
* will be overwritten by the elements of L and U as
* they are determined. The first row and column
* are specially treated, as is L(n,n).
*
DO k = 1, n-1

```

```

* Do a column of L
*
  IF( k .eq. 1 ) THEN
    No work is necessary.
  ELSE
    Compute elements of L from Eq. (3.105).
    DO i = k, n !
      sum = a(i,k)
      DO j = 1, k-1
        sum = sum - a(i,j)*a(j,k)
      END DO
      a(i,k) = sum ! Put L(i,k) into A.
    END DO
  ENDIF
*
* Do we need to interchange rows? We want the largest
* (scaled) element of the recently computed column of L
* moved to the diagonal (k,k) location.
*
  max = 0.d0
  DO i = k, n
    IF(scale(i)*a(i,k) .ge. max)THEN
      max = scale(i)*a(i,k)
      imax=i
    ENDIF
  END DO
*
* Largest element is L(imax,k). If imax=k, the largest
* (scaled) element is already on the diagonal.
*
  IF(imax .eq. k)THEN
    No need to exchange rows.
  ELSE
    Exchange rows...
*
    det = -det
    DO j = 1, n
      temporary = a(imax,j)

```

```

        a(imax,j) = a(k,j)
        a(k,j) = temporary
    END DO
*
*   scale factors...
*
        temporary = scale(imax)
        scale(imax) = scale(k)
        scale(k) = temporary
*
*   and record changes in the ordering
*
        itemp = order(imax)
        order(imax) = order(k)
        order(k) = itemp
*
    ENDIF
    det = det * a(k,k)
*
*   Now compute a row of U.
*
    IF(k.eq.1) THEN
*   The first row is treated special, see Eq. (3.102).
*
        DO j = 2, n
            a(1,j) = a(1,j) / a(1,1)
        END DO
    ELSE
*   Compute U(k,j) from Eq. (3.106).
*
        DO j = k+1, n
            sum = a(k,j)
            DO i = 1, k-1
                sum = sum - a(k,i)*a(i,j)
            END DO
*   Put the element U(k,j) into A.
*
            a(k,j) = sum / a(k,k)
        END DO
    
```

```

    ENDIF
  END DO
*
* Now, for the last element of L
*
    sum = a(n,n)
    DO j = 1, n-1
      sum = sum - a(n,j)*a(j,n)
    END DO
    a(n,n) = sum
    det = det * a(n,n)
*
* LU decomposition is now complete.
*
* We now start the solution phase. Since the equations
* have been interchanged, we interchange the elements of
* B the same way, putting the result into X.
*
    DO i = 1, n
      x(i) = b( order(i) )
    END DO
*
* Forward substitution...
*
    x(1) = x(1) / a(1,1)
    DO i = 2, n
      sum = x(i)
      DO k = 1, i-1
        sum = sum - a(i,k)*x(k)
      END DO
      x(i) = sum / a(i,i)
    END DO
*
* and backward substitution...
*
    DO i = 1, n-1
      sum = x(n-i)
      DO k = n-i+1, n
        sum = sum - a(n-i,k)*x(k)

```

```
END DO
x(n-i) = sum
END DO
*
* and we're done!
*
end
```

تمارين

- 1- ماذا تعني التعليمة Logic ALL ؟
- 2- أعط الثابت K بالقيمة 0.75.
- 3- عرف المصفوفة PELLE و التي تحتوي ثلاثة صفوف و ثلاثة أعمدة.

4- عرف رقماً عشرياً بدقة مضاعفة

5- عرف بعض المتحولات بدقة مضاعفة

6- عرف بعض الثوابت بدقة مضاعفة

7- هل العبارة التالية صحيحة؟ `REAL DIMENSION(1:3,2:3) :: AA`

8- هل العبارة التالية صحيحة؟ `REAL REAL`

9- هل العبارة التالية صحيحة؟ `COMMON :: A`

10- ماذا تعني العبارة التالية:

`A = 0.0 ; B = 370 ! First variables ; C = 17.0 ; D = 33.0`

11- هل العبارات التالية مقبولة في لغة Fortran 90؟

`Y = SIN(MAX(X1,X2)) * EXP(- COS(X3)**I) - TAN(AT&
& AN(X4))`

12- ماذا تفعل العبارة التالية؟

`WRITE(*, "(HI)")`

13- ماذا تفعل العبارة التالية؟

`CHARACTER (LEN=9) :: FILIP
FILIP = '(1PG14.6)'
WRITE(*,FILIP) 0.001, 1.0, 1000000.`

14- اكتب عبارة CASE التي تنجز ثلاثة حسابات مختلفة فيما لو كان المتحول سالباً

أو موجباً أو صفراً.

15- اكتب حلقة DO التي تجمع جذور 100 عدد معطى، بحيث تحمل العدد

السالب.





الفصل الثاني

تطبيقات على حل المعادلات غير الخطية

يمكن حل المعادلات غير الخطية بإحدى الطرق التالية:

1- طريقة المنصف:

و تعتمد على اختيار مجال يحتوي الجذر المطلوب و من ثم البحث عن هذا الجذر بالدقة المطلوبة.

مثال :

البرنامج التالي يحسب جذر المعادلة $f(x) = \cos x - x$ بطريقة المنصف حيث نبدأ من النقطتين $[0,1]$, لا حظ أن تعريف التابع المطلوب إيجاد جذره يأتي في نهاية البرنامج حتى يسهل تمييزه عن الجزء الرئيسي من البرنامج و تعديله إذا ما أردنا إيجاد جذر توابع أخرى و لكن يجب في هذه الحالة الانتباه إلى اختيار نقطتي البداية المناسبين:

```
c-----
c      Program 11
c      Computational Physics class
c      Damascus University - Physics department
c      -----
c      student Name :
c      Date:
c      -----
c      real x1, x2, xm, xmold
c      real toler, f1, f2, fm, f
c      integer iter
c
c      initialize iterations number
c      iter=0
c      initial guesses
c      x1=0.
c      x2=1.
c      xm=(x1+x2)/2
c      xmold=x1
c      maximal error in the approximation
c      toler=0.00001
```

```

c    if the new iteration does not give the same result of
the
c    previous iteration
c    within tolerance do the following
do while (abs(xm-xmold).gt.toler)
    iter=iter+1
c    evaluate f(x) at different points
    f1=f(x1)
    f2=f(x2)
    fm=f(xm)
    if ((fm*f1).lt.0) then
c    if the sign of f(xm) similar to the sign of f(x2) then:
        x2=xm
    else
c    if the sign of f(xm) similar to the sign of f(x1) then:
        x1=xm
    endif
c    remember the result of the previous iteration.
    xmold=xm
c    new iteration
    xm=(x1+x2)/2.
end do
c    print result
    write(*,*) ' the zero of the f(x) is: ', xm
    write(*,10) iter
10    format (' obtained after',i3,'iteration')
    stop
end
c    function for which we want to find zero.
    real function f(x)
    real x
    f=cos(x)-x
    return
end

```

في أثناء طباعتك للبرنامج حاول فهم الخطوات المتبعة ثم قم بتشغيل البرنامج و تحقق من أن الجذر الذي تحصل عليه صحيح. غير تعريف التابع بتتابع أخرى و أوجد جذورها.

البرنامج التالي يحسب جذر المعادلة $f(x) = x^2 - 5$ باستخدام الطريقة المذكورة في
 الفقرة (2) من الفصل الأول في الجزء النظري حيث نأخذ نقطة البداية $x = 1.0$ و
 $\Delta = 0.5$ (DX) و بدقة 10^{-6} (Tolx)

```

C-----
C      Program 12
C      Computational Physics class
C      Physics Department
C      Damascus University –
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
FUNC(X)=X*X-5.
TOLX=1.E-06
X=1.
FOLD=FUNC(X)
DX=.5
ITER=0
10  CONTINUE
    ITER=ITER+1
    X=X+DX
    PRINT *,ITER,X,SQRT(5.)-X
    IF ((FOLD*FUNC(X)) .LT. 0) THEN
        X=X-DX
        DX=DX/2
    END IF
    IF (ABS(DX) .GT. TOLX) GOTO 10
STOP
END
    
```

2-طريقة القاطع:

و تعتمد على توظيف العلاقة التكرارية التالية:

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i) \cdot \frac{(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

مثال: هذا البرنامج يحسب جذر المعادلة :

$$x^2 - 5 = 0 \text{ في المجال } [0,2] \text{ بطريقة القاطع.}$$

```

C-----
C      Program 13
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
C      real xl,x2,xtmp
C      real fl,f2,toler
C      integer iter
C      Initialize iterations' number.
C      iter=0
C      Maximal error in the approximation.
C      toler=0.00001
C      Initial guesses.
C      xl=2.
C      x2=3.
C      Evaluate the function f(x)=x**2-5 at x=xl and at x=x2:
C      fl=xl*xl-5.
C      f2=x2*x2-5.
C      If the new iteration does not give the same result of
the
C      previous iteration
C      within toler do the following:
C      do while (abs(x2-xl).gt.toler)
C**    New iteration.
C      iter=iter+1
C      xtmp=x2-f2*(x2-xl)/(f2-fl)
C      xl=x2

```

```

x2=xtmp
C** Evaluate the function f(x)=x**2-5 at x=x1 and at x=x2:
    fl=x1*x1-5.
    f2=x2*x2-5.
    end do
C** Print result:
    write (*,*) 'The zero of f(x) is:',xl.
10  format ('obtained after ',i3,' iterations.')
    write (*,10) iter
    stop
    end

```

في أثناء طباعتك للبرنامج حاول فهم الخطوات المتبعة ثم قم بتشغيل البرنامج و تحقق من أن الجذر الذي تحصل عليه صحيح. غير تعريف التابع بتتابع أخرى و أوجد جذورها.

3-طريقة نيوتن رافسون:

و تعتمد على توظيف العلاقة التكرارية التالية و حيث نحتاج إلى معرفة التابع و المشتق الأول للتابع.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

مثال: البرنامج التالي يحسب جذور المعادلة $f(x) = \cos(x) - x$

```

C-----
C      Program 14
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
C      newton raphson method
C
C      real x1
C      real f1,df1,toler
C      integer iter
C      initialize iteration

```



```

iter=0
c maximum error in the approximation
toler=0.00001
c initial guess
x1=1.
c evaluate the function f(x)=cosx-x and its derivative at x=x1:
f1=cos(x1)-x1
df1=-1.*sin(x1)-1
c if the new iteration does not give the same result as
c the previous iteration within the toler do the following
do while (abs(f1/df1).gt.toler)
c new iteration
iter=iter+1
c evaluate the function f(x)=cosx-x and its derivative at x=x1:
x1=x1-f1/df1
f1=cos(x1)-x1
df1=-1.*sin(x1)-1
end do
c print results
write(*,*) ' the zero is:', x1
write(*,10)iter
10 format('obtained after', i3, 'iterations')
stop
end

```

في أثناء طباعتك للبرنامج حاول فهم الخطوات المتبعة ثم قم بتشغيل البرنامج و تحقق من أن الجذر الذي تحصل عليه صحيح. غير تعريف التابع بتتابع أخرى و أوجد جذورها.

البرنامج التالي يحسب جذر المعادلة التالية بطريقة نيوتن-رافسون و لكن بطريقة مختلفة برمجيا (اقرأ برنامج الفورتران و حاول فهم طريقة تطبيق نيوتن رافسون في هذا البرنامج و قارنها مع البرنامج السابق):

$$\begin{aligned}
 f(x) &= x^4 - x - 10 = 0 \\
 df/dx &= 4x^3 - 1 \\
 x_{n+1} &= \frac{3x_n^4 + 10}{4x_n^3 - 1}
 \end{aligned}$$

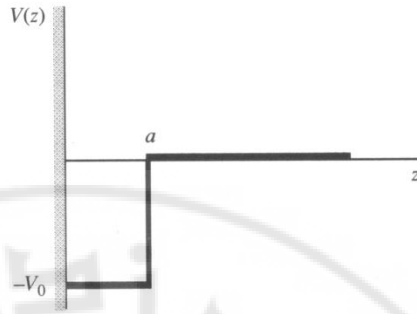
```

c-----
c      Program 15
c      Computational Physics class
c      Physics Department
c      Damascus University
c      -----
c      student Name :
c      Date:
c      -----
c      Newton raphson method
c
c      implicit real*8 (a-h,o-z)
c      start guessing
x=2.0d0
write (6,10)x
17  continue
   anum=3.d0*x**4+10.0d0
   denum=4.d0*x**3-1.d0
   y=anum/denum
   write(6,10)y
10  format (d20.10)
   if (dabs(x).gt.4.0) goto 41
   if (dabs(x-y).LT.0.0001) goto 43
   x=y
   goto 17
41  write (6,11)
11  format (' there is a root somewhere else')
43  continue
   stop
   end

```

- تطبيقات من الفيزياء:

1- احسب طاقة السوية الأرضية للإلكترون حر في بئر كموني من الشكل:



$$V(z) = \begin{cases} -V_o & 0 \leq z \leq a \\ \infty & z < 0 \\ 0 & \text{all other} \end{cases}$$

$$a = 10 \text{ \AA}$$

$$V_o = 10 \text{ eV}$$

لدينا الحالات:

$$z < 0 \quad (1) \psi = 0$$

$$0 \leq z \leq a \quad (2) \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} - V_o\psi = E\psi$$

$$z > a \quad (3) \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} = E\psi$$

من (2) نجد:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{-2m}{\hbar^2} (E - V_o)\psi$$

حل هذه المعادلة من الشكل:

$$\psi(z) = A_1 \sin(k_1 z) + B_1 \cos(k_1 z)$$

$$k_1 = \sqrt{2m(E - V_o)/\hbar^2}$$

حيث

و بالمثل من (3):

$$\psi = A_2 e^{k_2 z} + B_2 e^{-k_2 z}$$

$$k_2 = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$$

يجب أن تتحقق الشروط:

$$\psi(z \rightarrow \infty) = 0 \quad \text{و} \quad \psi(z \rightarrow -\infty) = 0$$

أي يجب أن يكون: $A_2 = 0$

و يجب أن يكون ψ و ψ' مستمرين و عند $z = 0$ أي يجب أن يكون: $B_1 = 0$.
عند $z = a$ لدينا:

$$A_1 \sin(k_1 a) + B_1 \cos(k_1 a) = B_2 e^{-k_2 a}$$

$$A_1 \sin(k_1 a) = B_2 e^{-k_2 a}$$

و كذلك من أجل ψ' :

$$A_1 k_1 \cos(k_1 a) = -B_2 k_2 e^{-k_2 a}$$

أو بالتقسيم:

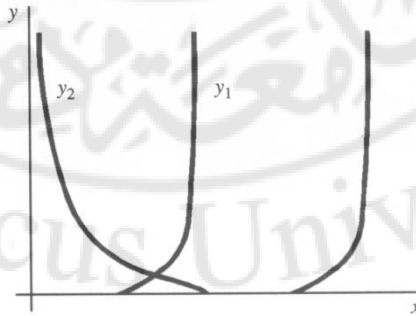
$$k_1 \cot(k_1 a) = -k_2$$

و لكن:

$$k_2 = \sqrt{\frac{-2m}{\hbar^2} E} \quad \text{و} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_o)}$$

بالتعويض نجد:

$$(5) -\cot x = \frac{\sqrt{2mV_o a^2 / \hbar^2 - x^2}}{x}$$



إذا رسمنا التابع الأخير نجد أن الجذر يقع ضمن المجال [2,3] استخدم program 11
 لحساب جذر المعادلة (5) و ذلك باستبدال التابع $f(x) = \cos x - x$ في البرنامج
 السابق بـ:

$$f(x) = \tan(x) + \frac{x}{\sqrt{10.4985965 - x^2}}$$

- احسب المقدار $(E + V_o)$
- غير قيم a و V_o كرر نفس الحساب.
- لماذا لم نستخدم العلاقة (5) تماماً كما هي و لكن أخذنا مقلوبها؟

II- عند حساب القيمة العظمى للطاقة الناتجة عن اشعاع الجسم الأسود نحصل على
 المعادلة التالية:

$$f(x) = e^x(5-x)-5$$

3- استخدم طريقة نيوتن رافسون في إيجاد جذر هذه المعادلة بدقة خانتين بعد الفاصلة.
 عدل البرنامج السابق و استخدمه في حساباتك.

4- احسب قيمة الثابت في قانون الإزاحة لفين ($\lambda_{\max} T = \text{const.}$) إذا علمت أن :

$$x = \frac{hc}{k\lambda_{\max} T}$$

$$h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J.sec.}, \quad c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/sec}, \quad k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J}^\circ\text{K}$$





الفصل الثالث
تطبيقات على الاستقراء و التقريب

1-المنحنيات التكعيبية:

البرنامج التالي يقرأ جدولاً مؤلفاً من سبعة أزواج من الأرقام (x,y) و يقوم بالاستقراء منها القيم التي يطلب ادخالها. يمكن تعديل البرنامج لقراءة عدد أكبر من القيم من أجل جداول أكبر و لكن يجب تعديل حلقة Do و أمر حجز المصفوفات في بداية البرنامج.

```

C-----
C      Program 16
C      Computational Physics class
C      Physics Department
C      Damascus University
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
C      cubic spline code
C      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C      DIMENSION
C      X(10),Y(10),Y2(10),XA(10),YA(10),Y2A(10),U(100)
C      print*, 'input the variable from the table'
C      DO 4 N=1,7
C      READ*,X(N)
4      CONTINUE
C      DO 5 T=1,7
C      READ*,Y(T)
5      CONTINUE
C      YP1=-0.00071
C      YPN=0.00072
C      N=7
C      CALL SPLINE(X,Y,N,YP1,YPN,Y2)
C      N=7
C      do 7 l=1,7
C      print*, 'input the required value '
C      READ*,A
C      CALL SPLINT(X,Y,Y2,N,A,B)
7      PRINT*,B
C      STOP
C      END

```



```

SUBROUTINE SPLINE(X,Y,N,YP1,YPN,Y2)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NMAX=100)
DIMENSION X(N),Y(N),Y2(N),U(NMAX)
IF (YP1.GT..99E30) THEN
Y2(1)=0.
U(1)=0.
ELSE
Y2(1)=-0.5
U(1)=(3./(X(2)-X(1)))*((Y(2)-Y(1))/(X(2)-X(1))-YP1)
ENDIF
DO 11 I=2,N-1
SIG=(X(I)-X(I-1))/(X(I+1)-X(I-1))
P=SIG*Y2(I-1)+2.
Y2(I)=(SIG-1.)/P
U(I)=(6.*((Y(I+1)-Y(I))/(X(I+1)-X(I))-(Y(I)-Y(I-1))
*      /(X(I)-X(I-1)))/(X(I+1)-X(I-1))-SIG*U(I-1))/P
11 CONTINUE
IF (YPN.GT..99E30) THEN
QN=0.
UN=0.
ELSE
QN=0.5
UN=(3./(X(N)-X(N-1)))*(YPN-(Y(N)-Y(N-1))/(X(N)-X(N-1)))
ENDIF
Y2(N)=(UN-QN*U(N-1))/(QN*Y2(N-1)+1.)
DO 12 K=N-1,1,-1
Y2(K)=Y2(K)*Y2(K+1)+U(K)
12 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE SPLINT(XA,YA,Y2A,N,X,Y)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION XA(N),YA(N),Y2A(N)
KLO=1
KHI=N
1 IF (KHI-KLO.GT.1) THEN
K=(KHI+KLO)/2
IF(XA(K).GT.X)THEN

```

```

KHI=K
ELSE
KLO=K
ENDIF
GOTO 1
ENDIF
H=XA(KHI)-XA(KLO)
IF (H.EQ.0.) PAUSE 'Bad XA input.'
A=(XA(KHI)-X)/H
B=(X-XA(KLO))/H
Y=A*YA(KLO)+B*YA(KHI)+
* ((A**3-A)*Y2A(KLO)+(B**3-B)*Y2A(KHI))*(H**2)/6.
RETURN
END

```

تطبيق:

في احدى القياسات الفلكية على أحد النجوم حصلنا على النتائج التالية :

Phase	-110	-80	-40	-10
Magnitude	7.98	8.95	10.71	11.70
		30	80	110
		10.01	8.23	7.86

3- باستخدام البرنامج الذي يعطي المنحنى التكعيبي (cubic spline)

وباستخدام الجدول السابق تحقق من الجدول التالي:

Phase	-100	-60	-20
Magnitude	8.37	9.40	11.39
	20	60	100
	10.84	8.53	7.89

4- أوجد القيم الموافقة لأي ثلاث نقاط تختارها أنت والتي تختلف عن النقاط

المعطاة في الجدولين السابقين.

استخدم البرنامج السابق في حل المسائل المعطاة في الفصل الثاني من الجزء النظري.

2- طريقة أصغر المربعات:

انظر الملحق 4 من أجل برنامج ينفذ طريقة أصغر المربعات.

الفصل الرابع

تطبيقات على التكاملات

1- التفاضل العددي:

البرنامج التالي يحسب المشتق الأول للتابع $\sin(x)$ عند النقطة ($x=1$) باستخدام العلاقة (11) من الفصل الثالث، يطلب البرنامج إدخال قيمة h ويطبع قيمة h و يقارن ناتج التفاضل العددي عن القيمة الحقيقية ($\cos 1=0.540302$)

```

C-----
C      Program 18
C      Computational Physics class
C      Damascus University - Physics department
C      -----
C      student Name :
C      Date:
C      -----
C      numerical differentiation
C      -----
      X=1.
      EXACT=COS(X)
10  PRINT *, 'ENTER VALUE OF H (.LE. 0 TO STOP)'
      READ *, H
      IF (H .LE. 0) STOP
      FPRIME=(SIN(X+H)-SIN(X-H))/(2*H)
      DIFF=EXACT-FPRIME
      PRINT 20,H,DIFF
20  FORMAT (' H=',E15.8,5X,'ERROR=',E15.8)
      GOTO 10
      END

```

2- التكامل العددي:

يمكن إجراء التكاملات عددياً باستخدام إحدى الطرق التالية:

1- طريقة شبه المنحرف:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + \cdots + \frac{1}{2}f_N\right)$$

2- طريقة سيمبسون:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + f_N) + O(h^2)$$

أو قاعدة سيمبسون $\frac{3}{8}$:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) + O(h^5)$$

وإذا أخذنا خمس نقاط نحصل على علاقة بول Boole.

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) + O(h^6)$$

3- طريقة مونتي كارلو:

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

و هي تناسب التكاملات ذات الأبعاد أكبر من 3.

مثال 1:

البرنامج التالي يقوم بإجراء تكامل سيمبسون لحساب تكامل التابع e^{x^2} , يطلب
البرنامج حدود التكامل [a,b] وقيمة h و العدد N ويخزن الناتج في ملف (result.txt).

```
c-----  
c      Program 19  
c      Computational Physics class  
c      Damascus University - Physics department  
c      -----  
c      student Name :  
c      Date:
```

```

c -----
c   Simpson method
c -----
integer n
real func(0:1000),a,b,s
real x,h
c   get the boundaries of the integral
write(*,*) 'Enter the interval bounds a and b'
read (*,*) a,b
c   prepare file for results
open (unit=1,file='results.txt')
write(1,*) 'the value of the integral of the function exp(x**2)'
10  format ('from',f4.2, 'to' f4.2)
    write(1,10)a,b
    write(1,*) 'N S the Integral'
c   Get the number of points
2   write(*,*) 'Enter the number of points N (0<N<1001):'
    write (*,*) 'Enter N<0 to stop'
    read (*,*) n
    if( n.gt.1000.or.n.lt.1) goto 3
c   the step value between points
    h=(b-a)/n
c   compute the value of the function of on the N points
    do 1 i=0,n
        x=a+h*float(i)
        func(i)=exp(x*x)
1    continue
c   compute the value of the integral
    call simpson(func,n,a,b,s)
c   print results
    write(1,*) n,s
    write(*,*) n,s
    goto 2
3    stop
end
c   subroutine to compute the value of a definite integral
subroutine simpson(func,n,a,b,s)
integer n
real func(0:1000),a,b,s

```

```

s=0
s=func(0)+func(n)
do 1 i=1,n-1
c  (1-mod(i,2)) equals 0 if i even and equals 1 if i odd
s=s+2*2**(1-mod(i,2))*func(i)
1  continue
s=s*(b-a)/(3*n)
return
end

```

مثال 2:

البرنامج التالي يستخدم طريقة شبه المنحرف لإجراء تكامل التابع e^{x^2} ، يطلب البرنامج حدود التكامل ويخزن الناتج في ملف (result.txt).

```

c-----
c      Program 20
c      Computational Physics class
c      Damascus University - Physics department
c      -----
c      student Name :
c      Date:
c      -----
c      Trapezoidal integration
c      -----
integer n
real func(0:1000),a,b,s
real x,h
c      get the boundaries of the integral
write(*,*) 'Enter the interval bounds a and b'
read (*,*) a,b
c      prepare file for results
open (unit=1,file='results.txt')
write(1,*) 'the value of the integral of the function exp(x**2)'
10  format ('from',f4.2, 'to' f4.2)
write(1,10)a,b
write(1,*) 'N S the Integral'
c      Get the number of points N
2   write(*,*) 'Enter the number of points N (0<N<1001):'
write (*,*) 'Enter N<0 to stop'

```

```

      read (*,*) n
      if( n.gt.1000.or.n.lt.1) goto 3
c     the step value between points
      h=(b-a)/n
c     compute the value of the function of on the N points
      do 1 i=0,n
      x=a+h*float(i)
      func(i)=exp(x*x)
1     continue
c     compute the value of the integral
      call trapez(func,n,a,b,s)
c     print results
      write(1,*) n,s
      write(*,*) n,s
      goto 2
3     stop
      end
c     subroutine to compute the value of a definite integral
      subroutine trapez(func,n,a,b,s)
      integer n
      real func(0:1000),a,b,s
      s=0.
      s=(func(0)+func(n))/2
      do 1 i=1,n-1
c         s=s+func(i)
1      continue
      s=s*(b-a)/n
      return
      end
      subroutine trapz(func,n,a,b,s)
      integer n
      real func(0:1000),a,b,s
      s=0.
      s=(func(0)+func(n))/2
      do 1 i=1,n-1
c         s=s+func(i)
1      continue

```



```

s=s*(b-a)/n
return
end

```

التكامل بطريقة مونت كارلو:

البرنامج التالي يحسب تكامل التابع $\exp(x)$ على المجال $(0,1)$. البرنامج الجزئي seed يبدأ عملية توليد الأرقام العشوائية والتي تتم باستخدام أمر Random. يطبع البرنامج قيمة التكامل و قيمة الخطأ.

```

C-----
c      Program 21
c      Computational Physics class
c      Damascus University - Physics department
c      -----
c      student Name :
c      Date:
c      -----
c      MONTE CARLO Method integration
C-----
c This program computes a Monte Carlo style estimate of
c the integral  $\exp(x)$  between 0 and 1. (= e-1)
c
C-----
double precision sum,e,ran1, x, error, monte
real xxx
integer N,i
integer*2 value
parameter ( e = 2.718281828459045d0 )

*
* Initialize the "seed" used in the Random Number
* Generator, and set the accumulated SUM to zero.
*

```

```

value = 1
call seed( value )
sum =0.d0
*
* Calculate the function a total of 1,000 times, printing
* an estimate of the integral after every 10 evaluations.
*
  DO i = 1, 100
  *
  * Evaluate the function another 10 times. SUM is the
  * accumulated total.
  *
    DO j = 1, 10
      call random( xxx )
      x = xxx
      sum = sum + exp(x)
    END DO
  *
  * The function has now been evaluated a total of
  * ( 10 * i ) times.
  *
    N = i * 10
    MONTE = sum / N
  *
  * Calculate the relative error, from the known value
  * of the integral.
  *
    error = abs( monte - (e-1.d0) )/( e - 1.d0 )
    write(*,*) n, MONTE, error
  END DO
End

```

تطبيقات :

1- احسب التكامل التالي باستخدام برامج الفورتران المعطاة وذلك بطريقة سيمسون أو شبه المنحرف.

هذا التكامل يعطي طول القوس المحددة بالمنحنى $y=\sin(x)$. ولا توجد علاقة تحليلية تعطي هذا التكامل.

$$\int_0^{\pi} \sqrt{1 + \cos^2 x} . dx$$

2- نعلم من مادة الضوء الفيزيائي أن الضوء "ينعرج حول الأجسام"، من أبسط حالات الانعراج، الانعراج حول حد مستقيم (مثل سكين) في هذه الحالة تختلف شدة الضوء عندما نبتعد عن الحد تبعا للعلاقة:

$$I=0.5I_0\{[C(v)+0.5]^2+[S(v)+0.5]^2\}$$

حيث I_0 شدة الضوء الوارد و v مقدار متعلق بالمسافة، $C(v)$ و $S(v)$ هي تكاملات فرينل Fresnel (راجع الضوء الفيزيائي):

$$C(v) = \int_0^v \cos(\pi w / 2) dw$$

$$S(v) = \int_0^v \sin(\pi w / 2) dw$$

احسب تكاملات فرينل عدديا وارسم تابعة I/I_0 بدلالة v .

3- انفلات الغاز f (Fugacity) هو مصطلح يعبر عن العمل المتوافر أو الممكن من التحولات متساوية الحرارة Isothermal process . في حالة الغاز المثالي f تساوي إلى ضغط الغاز P ولكن في حالة غاز حقيقي تعطى بالعلاقة:

$$\ln \frac{f}{P} = \int_0^P \frac{C-1}{P} . dp$$

حيث C (عامل الإنضغاط) تقاس تجريبيا. الجدول التالي يعطي قيم C من أجل ضغوط مختلفة.

P (atm)	C	F
1	0.9940	
10	0.9370	
20	0.8683	
40	0.7043	
60	0.4515	
80	0.3429	
120	0.4259	
160	0.5252	
250	0.7468	
400	1.0980	

تقترب قيمة C من الواحد عندما يقترب الضغط من الصفر، احسب f من أجل القيم المعطاة في الجدول وارسم تابعة f للضغط.

4- يعطى دور النواس بشكل عام بالعلاقة:

$$T = 4 \sqrt{\frac{l}{g}} K \left(\sin \frac{\theta_o}{2} \right)$$

حيث :

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \xi}}$$

يسمى هذا النوع من التكاملات بالتكاملات الإهليلجية. التكامل الأخير يأخذ القيم كما في الجدول التالي:

$\sin^{-1} k$	$K(k)$
0°	1.57079 63270
10°	1.58284 28043
20°	1.62002 58991
30°	1.68575 03548
40°	1.78676 91349
50°	1.93558 10960
60°	2.15651 56475
70°	2.50455 00790
80°	3.15338 52519
90°	∞

- استخدم أحد برامج التكاملات للتحقق من الجدول السابق.
- أوجد دور النواس من أجل إزاحة $\theta_0 > 60^\circ$ و قارن النتيجة مع الجواب المحسوب باعتماد التقريب التوافقي.

الفصل الخامس

تطبيقات على حل المعادلات

التفاضلية عدديا

1- حل معادلة شرودنجر باستخدام خوارزمية نيمروف:

البرنامج التالي يطبق خوارزمية نيمروف لمعادلة شرودنجر حيث يبدأ البرنامج من القيمة $k = 0.0$ و يحسب قيمة ابتدائية للتابع الموجي و يكامل المعادلة للحصول على k_i و يضيف مقداراً صغيراً dk ل k و يكامل مرة أخرى و في كل تكرار يضيف المقدار dk حتى تتغير إشارة التابع الموجي ψ عندها نعكس اتجاهنا و نضيف مقداراً dk أصغر من المقدار السابق و هكذا حتى تتقارب العملية إلى الدقة المطلوبة (10^{-5} في هذا البرنامج).

استخدم $k = 0.0$ في مدخلات البرنامج و سيعطي البرنامج قيمة k_1 .

- قارن النتيجة التي حصلت عليها من البرنامج مع القيمة المعطاة بالعلاقة:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2.m.a^2}{\hbar^2} . E_1}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 . \hbar^2}{2.m.a^2} . n^2$$

- غير قيمة a و احسب k_1 مجدداً.

- ابدأ من قيمة $k > 3.14$ ما هي النتيجة التي تحصل عليها؟

c Program 22

c-----

c Numerove algorithm

c in integrating Schrodinger equation

real k

real toler,psip,psiold

```

c  get initial value of the wave number
    write(*,*) 'Enter the starting value of the wave number k:
+ (k<0 to stop)'
    read (*,*) k
    if (k.lt.0.) goto 20
c  initial value of the step
    dk=1.
    toler=1.E-05
c  integrate the equation with the initial value k
    call intgrt(k,psip)
    psiold=psip
c  change the value of k
10   k=k+dk
c  integrate again with the new value of k
    call intgrt(k,psip)
c  if psip changes values backup ( the secant method)
    if ((psip*psiold).lt.0) then
        k=k-dk
        dk=dk/2
    endif
c  if convergence is not acheived try again
    if (abs(dk).gt.toler) goto 10
    write (*,*) ' '
    write (*,*) ' the result is: '
    write (*,*) k
20 stop
    end

c  subroutine to integrate schrodinger equation using
c  the numerove method
    subroutine intgrt(k,psip)
    real k,psia, psiz,h,const
    integer nstep
c  number of steps
    nstep=100
c  step value of normalized x
    h=1./nstep
c  left boundry condition
    psim=0.
    psiz=.01

```

```

const=(k*h)**2/12.
do 10 ix=1,nstep-1
c Numerove method equation:
psip=2*(1.-5.*const)*psiz-(1.+const)*psim
psip=psip/(1+const)
psim=psiz
psiz=psip
10 continue
c the result achieved
write(*,*) ' The wave number:',k
return
end

```

2- القيم الخاصة لمعادلة الموجة:

ليكن لدينا وتر مشدود ذو توزيع متجانس لكثافة الكتلة. تكتب المعادلة التي تصف هذه الموجة والتي تعطي الشروط الحدية على الشكل:

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} = s^2 \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}$$

$$s^2 = \frac{T}{\rho} \quad \text{حيث:}$$

بفصل المتغيرات نستطيع كتابة الجزء المتعلق بالمتحول x على الشكل:

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = k^2 \phi; \quad \phi(x=0) = \phi(x=1) = 0$$

وهو شبيه بالصيغة (1). حل هذه المعادلة يأخذ الشكل:

$$\phi_n \sim \sin n\pi x; \quad k_n = n\pi$$

إحدى الطرق لإيجاد الحل العددي لهذه المعادلة هو استخدام طريقة تكرارية تبدأ بقيمة تخمينية لـ k وتكامل المعادلة التفاضلية بطريقة مباشرة وباتجاه متزايد كما لو كانت مسألة قيمة ابتدائية، حتى نصل إلى النقطة ($x=1$) ونحسب قيمة $\phi(x=1)$ إذا كان الشرط الحدي $\phi(x=1)=0$ غير محقق نغير العدد الموجي k بمقدار dk ونكرر التكامل المباشر

مرة أخرى حتى تنعكس إشارة التابع $\phi(x)$ عندئذ نعكس جهة تزايد العدد k ونأخذ مجال dk أصغر من قبل وهكذا حتى تتقارب العملية إلى قيمة تحقق الشرط الحدّي.

البرنامج التالي يقوم بالعملية الموصوفة في الفقرة السابقة وعند تشغيله سيتقارب إلى القيمة $k=3.14$.

```
c  Program 26
    REAL K
    K=1.
    DK=1.
    TOLK=1.E-05
    CALL INTGRT(K,PHIP)
    PHIOLD=PHIP

10  CONTINUE
    K=K+DK
    CALL INTGRT(K,PHIP)
    IF (PHIP*PHIOLD .LT. 0) THEN
        K=K-DK
        DK=DK/2
    END IF
    IF (ABS(DK) .GT. TOLK) GOTO 10

    EXACT=4.*ATAN(1.)
    PRINT *, ' eigenvalue, error =',K,EXACT-K
    STOP
END
SUBROUTINE INTGRT(K,PHIP)
    REAL K
    DATA NSTEP/100/
    H=1./NSTEP
    PHIM=0.
    PHIZ=.01
    CONST=(K*H)**2/12.
    DO 10 IX=1,NSTEP-1
```

```

      PHIP=2*(1.-5.*CONST)*PHIZ -(1.+CONST)*PHIM
      PHIP=PHIP/(1+CONST)
      PHIM=PHIZ
      PHIZ=PHIP
10    CONTINUE
      PRINT *, K,PHIP
      RETURN
      END

```

3- معادلة بواسون:

البرنامج التالي يقوم بحل معادلة بواسون بطريقة التكرار مع الاسترخاء Iteration with overrelaxation، المعادلة المراد حلها هي:

$$\nabla^2 x + \nabla^2 y = f(x, y)$$

و يتم الحل باستخدام الخوارزمية العددية:

$$\phi_{ij}^{k+1} = \phi_{ij}^k + \frac{\omega}{4} (\phi_{i+1,j}^k + \phi_{i-1,j}^{k+1} + \phi_{i,j+1}^k + \phi_{i,j-1}^{k+1} - 4\phi_{ij}^k + 8)$$

حيث ω معامل استرخاء overrelaxation factor

يتم ادخال الشروط الحدية في مصفوفة U باستخدام تعليمة Do، في هذا البرنامج $f(x, y) = 0$ و لكن يمكن استبداله بأي تابع.

C Program Poisson

```

c -----
c a program to solve poisson equation on rectangular area
c the over relaxation method is used
c -----
c parameters used are
c NWIDE - number of nodes in the x-direction

```

c NHIGH - number of nodes in the y-direction
 c F(X,Y)- R.H.S function for poisson equation
 c TOL - tolerance to stop iteration
 c W - over relaxation factor
 c H - MESH size

```

C -----
      Real U(100,100),SUM,UAVG,RESID,CHGMAX,TOL,W,H
      INTEGER NWIDE,NHIGH,NHP1,NWP1,I,J
      F(X,Y)=0.0
      DATA NWIDE,NHIGH,TOL,W,H/16,8,0.001,1.4,1.25/
      NHP1=NHIGH+1
      NWP1=NWIDE+1
      DO 1 I=1,NHP1
        U(I,1)=0.0
        U(I,NWP1)=100.0
1      CONTINUE
        DO 2 I=2,NWIDE
          U(1,I)=0.0
          U(NHP1,I)=0.0
2      CONTINUE
5      SUM=0.0
      DO 10 I=1,NHP1
        SUM=SUM+U(I,1)+U(I,NWP1)
10     CONTINUE
      DO 20 I=2,NWIDE
        SUM=SUM+U(1,I)+U(NHP1,I)
20     CONTINUE
      UAVG=SUM/FLOAT(2*NWP1+2*(NHIGH-1))
      X=0.0
      Y=0.0
      DO 30 I=2,NHIGH
        DO 30 J=2,NWIDE
          U(I,J)=UAVG+H*H*F(X,Y)
30     CONTINUE
      PRINT 199,W
      DO 50 KNT=1,100
        CHGMAX=0.0
        DO 40 I=2,NHIGH
          Y=(I-1)*H
  
```

```

DO 35 J=2,NWIDE
  X=(J-1)*H
  RESID=W/4.0*(U(I+1,J)+U(I-1,J)+U(I,J+1)+
+   U(I,J-1)-4.0*U(I,J)+H*H*F(X,Y))
  IF (CHGMAX.LT.ABS(RESID)) CHGMAX=ABS(RESID)
  U(I,J)=U(I,J)+RESID
35 CONTINUE
40 CONTINUE
  IF (CHGMAX.LT.TOL) GOTO 55
50 CONTINUE
55 PRINT 200,KNT,CHGMAX
  DO 45 I=1,NHP1
    PRINT 201, (U(I,J),J=1,NWP1)
45 CONTINUE
  W=W+0.1
  IF (W.LT.1.8) GO TO 5
199 FORMAT(///
+ ' ITERATION WITH OVER-RELAXATION FACTOR OF 'F5.2)
200 FORMAT('AFTER ITERATION NO ',I3,'MAX CHANGE IN
U=',
+ F8.4,'U MATRIX IS'/)
201 FORMAT(1X,9F8.2)
STOP
END

```

نتائج تشغيل البرنامج معطاة في الجدول التالي:

PARTIAL OUTPUT FOR POISSON.F

ITERATIONS WITH OVER-RELAXATION FACTOR OF 1.40

AFTER ITERATION NO. 29 MAX CHANGE IN U = .0008 U MATRIX IS

.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	100.00	
.00	.08	.17	.28	.44	.66	.99	1.46	2.16
3.20	4.75	7.10	10.73	16.64	27.10	48.34	100.00	
.00	.14	.31	.52	.81	1.22	1.82	2.70	3.99
5.90	8.72	12.91	19.19	28.72	43.41	66.25	100.00	
.00	.19	.40	.68	1.05	1.59	2.38	3.52	5.20
7.68	11.31	16.63	24.40	35.64	51.58	73.24	100.00	
.00	.20	.43	.73	1.14	1.73	2.57	3.81	5.63
8.30	12.20	17.90	26.14	37.87	54.04	75.13	100.00	
.00	.19	.40	.68	1.06	1.60	2.38	3.52	5.21
7.68	11.31	16.63	24.40	35.64	51.58	73.24	100.00	
.00	.14	.31	.52	.81	1.22	1.82	2.70	3.99
5.90	8.72	12.91	19.19	28.72	43.41	66.25	100.00	
.00	.08	.17	.28	.44	.66	.99	1.46	2.16
3.20	4.76	7.10	10.73	16.64	27.10	48.34	100.00	
.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	00
.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	100.00	

ITERATIONS WITH OVER-RELAXATION FACTOR OF 1.50

AFTER ITERATION NO. 26 MAX CHANGE IN U = .0008 U MATRIX IS

.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	100.00	
.00	.08	.17	.28	.44	.66	.99	1.46	2.16
3.20	4.76	7.10	10.73	16.64	27.10	48.34	100.00	
.00	.14	.31	.52	.81	1.22	1.82	2.70	3.99
5.90	8.72	12.91	19.19	28.72	43.41	66.25	100.00	
.00	.19	.40	.68	1.06	1.60	2.38	3.52	5.21
7.68	11.31	16.63	24.40	35.64	51.59	73.24	100.00	
.00	.20	.43	.73	1.14	1.73	2.58	3.81	5.63
8.30	12.20	17.90	26.14	37.87	54.04	75.13	100.00	
.00	.19	.40	.68	1.06	1.60	2.38	3.53	5.21
7.68	11.31	16.63	24.40	35.64	51.59	73.24	100.00	
.00	.14	.31	.52	.81	1.22	1.82	2.70	3.99
5.90	8.72	12.91	19.19	28.72	43.41	66.25	100.00	
.00	.08	.17	.28	.44	.66	.99	1.46	2.17
3.20	4.76	7.10	10.73	16.64	27.10	48.34	100.00	
.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00
.00	.00	.00	.00	.00	.00	.00	100.00	

4-معادلة الموجة:

البرنامج التالي يقوم بحل معادلة وتر مهتز و التي تأخذ الشكل:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \frac{1}{c} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

حيث نستخدم المعادلة التالية لبدء الحل:

$$y(x_i, \Delta t) = y_i^1 = \frac{1}{2} [f(x_i + \Delta x) + f(x_i - \Delta x)] + \frac{1}{2c} \int_{x_i - \Delta x}^{x_i + \Delta x} g(v) dv$$

$$= \frac{1}{2} [y_{i+1}^0 + y_{i-1}^0] + \frac{1}{2c} \int_{x_i - \Delta x}^{x_i + \Delta x} g(v) dv$$

و نستخدم العلاقة التالية لحساب الإزاحة بدءاً بأول خطوة زمنية

$$y_i^{j+1} = y_{i+1}^j + y_{i-1}^j - y_i^{j-1}, \quad \Delta t = \frac{\Delta x}{\sqrt{c}}$$

C PROGRAM WAVE

C-----

c This program solves the one dimensional wave equation
c the initial displacement of the vibrating string
c X=0 to X=XLEN are given by F(X), the initial velocities
c are given by G(X), the end points are assumed fixed

C-----

c the relation used is U(I,J+1)=U(I+1,J)+U(I-1,J)-U(I,J-1)
C EXCEPT FOR THE FIRST STEP, WHERE THE VALUE IS
GIVEN C BY:

C U(I,1)=0.5*(U(I-1,0)+U(I+1,0))+0.5/C*INTEGRAL OF
C THE INIT VEL

C-----

C PARAMETERS ARE:

C X - DISTANCE ALONG THE STRING

C DX- INCREMENT OF DISTANCE

C XLEN- TOTAL LENGTH OF THE STRING

C N- NUMBER OF SUBDIVISIONS

C T- TIME

C TLAST- FINAL VALUE OF TIME FOR WHICH SOLUTION IS

C DESIRED

C F(X)- INITIAL DISPLACEMENT

C G(X)- INITIAL VELOCITIES

C TDM- VALUE OF TENSION /MASS=C SQUARED

C U- DISPLACEMENT AT EVEN TIME INTERVAL

C V- DISPLACEMENT AT ODD TIME INTERVALE

```

C-----
      REAL
      U(100),V(100),X,DX,XLEN,T,TLAST,F,G,TDM,SUBDX,XSUB,
      PI
      INTEGER N,NP1,I,J
      COMMON XLEN,PI
C  DEFINE SOME INITIAL VALUES
      DATA X,N,T/0.0,9.0,0.0/
      PI=4*ATAN(1.0)
      XLEN=9.0
C  GET SOME INITIAL DISPLACEMENT
      NP1=N+1
      DX=XLEN/FLOAT(N)
      U(1)=0.0
      U(NP1)=0.0
      V(1)=0.0
      V(NP1)=0.0
      DO 10 I=2,N
        X=X+DX
        U(I)=F(X)
10  CONTINUE
C  WRITE THE INITIAL DICPLACEMENT
      PRINT 200, (U(I), I=1, NP1/2)
C  NOW GET DISPLACMENT AFTER FIRST STEP
C  AND USE SIMPSON RULE TO INTEGRATE
      SUBDX=DX/10.0
      XSUB=DX
      DO 30 I=2,N
        SUM=0.0
        XSUB=XSUB-DX
        DO 20 J=1,19,2
          SUM=SUM+G(XSUB)+4.0*G(XSUB+SUBDX)+
+          G(XSUB+2.0*SUBDX)
          XSUB=XSUB+2.0*SUBDX
20  CONTINUE
        V(I)=0.5*(U(I-1)+U(I+1))+
+        0.5/SQRT(TDM)*SUBDX/3.0*SUM
30  CONTINUE
  
```

```

T=DX/SQRT(TDM)
PRINT 201,T,(V(I),I=1,NP1/2)
C  COMPUTE UNTIL TLAST IS REACHED
35 IF (T.GE.TLAST) STOP
    DO 40 I=2,N
        U(I)=V(I-1)+V(I+1)-U(I)
40 CONTINUE
    T=T+DX/SQRT(TDM)
    PRINT 201,T,(U(I),I=1,NP1/2)
    DO 50 I=2,N
        V(I)=U(I-1)+U(I+1)-V(I)
50 CONTINUE
    PRINT 201,T,(V(I),I=1,NP1/2)
    GO TO 35
200 FORMAT(// 'SOLUTION TO VIBRATING STRING
PROBLEM',//,
+ 'INITIAL DISPLACEMENT ARE '// (1X,11F9.4))
201 FORMAT('/AT T= ', F5.2/(1X,11F9.4))
END
C  DIFINING F(X) AND G(X)
    REAL FUNCTION F(X)
    REAL X
    F=0.0
    RETURN
END
    REAL FUNCTION G(X)
    REAL X
    COMMON XLEN,PI
    G=3.0*SIN(PI*X/XLEN)
    RETURN
END

```

نتائج تشغيل البرنامج معطاة في الجدول التالي:

OUTPUT FOR WAVE.F

SOLUTION TO VIBRATING STRING PROBLEM

INITIAL DISPLACEMENTS ARE

.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-------	-------	-------	-------	-------

AT T = .50

.0000	.5027	.9447	1.2728	1.4474
-------	-------	-------	--------	--------

AT T = 1.00

.0000	.9447	1.7755	2.3921	2.7202
-------	-------	--------	--------	--------

AT T = 1.50

.0000	1.2728	2.3921	3.2229	3.6649
-------	--------	--------	--------	--------

AT T = 2.00

.0000	1.4474	2.7202	3.6649	4.1676
-------	--------	--------	--------	--------

AT T = 2.50

.0000	1.4474	2.7202	3.6649	4.1676
-------	--------	--------	--------	--------

AT T = 3.00

.0000	1.2728	2.3921	3.2229	3.6649
-------	--------	--------	--------	--------

AT T = 3.50

.0000	.9447	1.7755	2.3921	2.7202
-------	-------	--------	--------	--------

AT T = 4.00

.0000	.5027	.9447	1.2728	1.4474
-------	-------	-------	--------	--------

AT T = 4.50

.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
-------	-------	-------	-------	-------

الباب الثالث

تطبيقات باستخدام برنامج

Mathcad



الفصل الأول

مقدمة في استخدام برنامج Mathcad

في حل مسائل الفيزياء

1- مقدمة:

Mathcad هو برنامج يستطيع القيام بعدد كبير من العمليات الرياضية كما يمكن برمجته للقيام ببعض الخوارزميات الحسابية أو ربطه ببرامج و تطبيقات أخرى ، كما يتمتع برنامج Mathcad ببعض القدرات على الرسم البياني في بعد واحد أو في بعدين و كذلك الرسم الفراغي .

يتميز برنامج Mathcad باحتوائه على عدد كبير من التوابع الرياضية و كذلك أوامر للقيام بعمليات رياضية عديدة مثل إيجاد جذور معادلة أو عمليات التكامل أو الاستقراء بالإضافة إلى عمليات مختلفة من الجبر الخطي والعمليات على المصفوفات و حل المعادلات التفاضلية.

2- كيفية استخدام Mathcad:

برنامج Mathcad مشابه للبرامج التي تعمل باستخدام نظام التشغيل ويندوز إذ يمكن تخزين أو فتح الملفات مثل برنامج مايكروسوفت وورد على سبيل المثال، كما يوجد شريط الأدوات الذي يحتوي على الأوامر اللازمة لتنفيذ العمليات الرياضية. شريط الأدوات الرياضية يحتوي على :

- آلة حاسبة: و التي تأخذ منها جميع العمليات الحسابية اللازمة لكتابة العلاقات الرياضية على Mathcad.
 - الرسم البياني: نختار من بين عدة طرق للرسم البياني.
 - المصفوفات والعمليات عليها: تستعمل لكتابة المصفوفات و لإجراء العمليات الحسابية عليها.
 - التكامل: تستعمل لكتابة و إجراء التكاملات.
 - العمليات المنطقية و جبر بول.
 - الأحرف اليونانية.
- تستخدم هذه الأدوات كي نكتب و ننفذ مختلف العمليات الرياضية. يمكن تشغيل هذه الأدوات بالنقر على الأيقونة المناسبة أو من قائمة view.

3- التوابع و الخوارزميات الرياضية في Mathcad:

يوجد العشرات من التوابع الرياضية و كذلك الخوارزميات العددية التي يمكن أن تستخدم ضمن التطبيقات العلمية لـ Mathcad و نستطيع أن نختار التابع الذي نريد استخدامه بالنقر على الأيقونة $f(x)$ أو من قائمة الأوامر insert ثم function كما نستطيع من قائمة $f(x)$ أن نحصل على بعض الشرح للتوابع وكيفية تطبيقها.

بعض أهم التوابع و الخوارزميات الموجودة في Mathcad:

- تحويلات فورييه: $FFT(v)$: تحويل فورييه السريع
- $CFFT(v)$: تحويل فورييه السريع من أجل قيم عقدية

IFFT(v): تحويل فورييه العكوس
ICFFT(v): تحويل فورييه العقدي العكوس

- طرق الاستقراء:

cspline(M_x, M_y): إنشاء منحني تكعيبي
lspline(M_x, M_y): إنشاء منحني تكعيبي
interp(v_s, M_x, M_y, x): إجراء استقراء من القيم M_x و M_y باستخدام المنحني V_s
interp(v_x, v_y, x): إجراء استقراء من القيم v_x و v_y

- إيجاد حلول المعادلات:

Find($var1, var2, \dots$):
Isolve(M, v): أمر حل جملة خطية معطاة بالمصفوفة M و الشعاع V
root($f(var), var, [a, b]$): إيجاد جذر التابع f
polyroots(v): إيجاد جميع جذور كثير الحدود V

- بعض التوابع الخاصة:

erf(z): يعطي تابع الخطأ
Gamma(a, z): تابع غاما
Her(n, x): كثير حدود هرميت من المرتبة n
Leg(n, x): كثير حدود ليجاندر من المرتبة n
Lag(n, x): كثير حدود لاغاري من المرتبة n

- المصفوفات و العمليات عليها:

diag(v): يعطي قطر المصفوفة V.

Eigenvals(M): يعطي القيم الخاصة للمصفوفة M

eigenvec(M, z): يعطي التابع الخاص المقابل للقيمة الخاصة z من أجل مصفوفة M

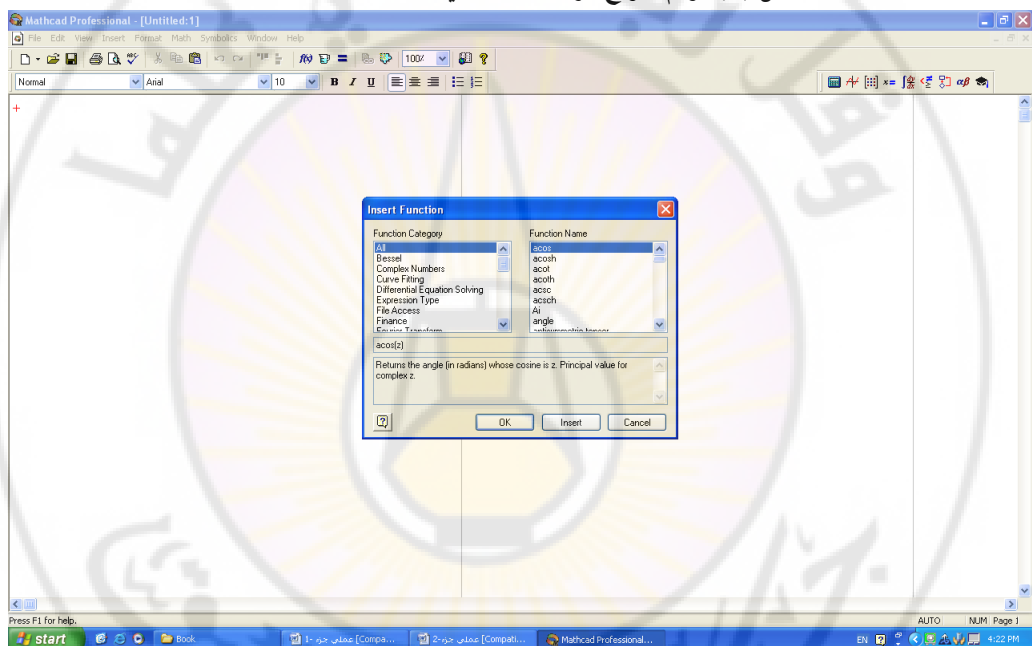
eigenvecs(M): يعطي التوابع الخاصة للمصفوفة M

يمكن استخدام قائمة Help في Mathcad للحصول على شرح مفصل للتوابع و الخوارزميات الموجودة في Mathcad وكذلك على بعض الأمثلة.

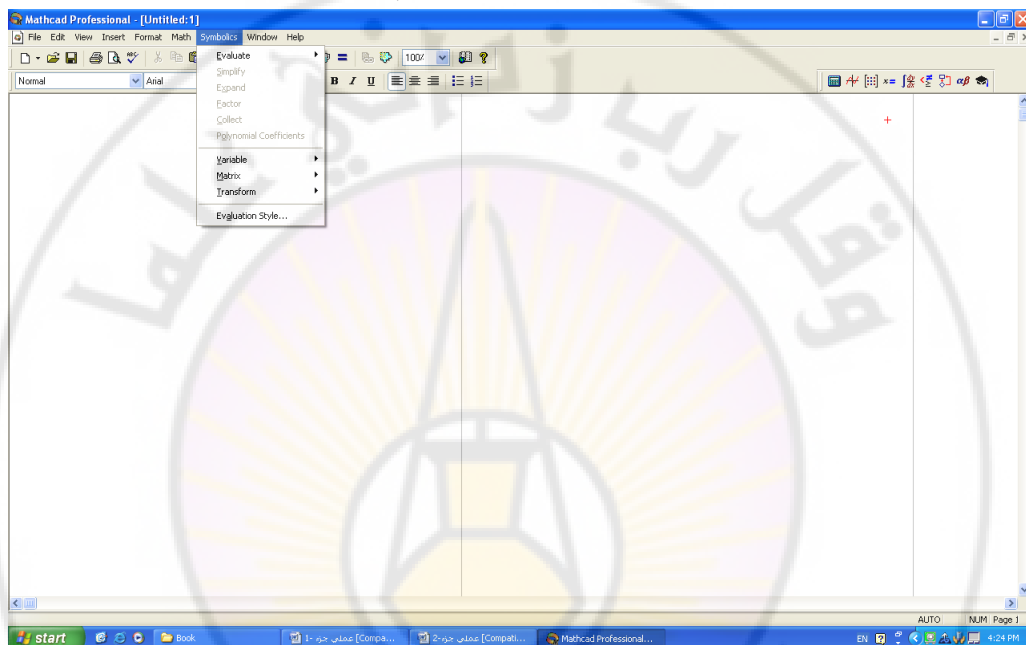
الشكل (1) قوائم العمليات الحسابية المتاحة في Mathcad



الشكل (2) قوائم التوابع الرياضية المتاحة في Mathcad



الشكل (3) قائمة العمليات الرياضية التحليلية المتاحة في Mathcad



4- تطبيقات :

العلاقات في الأمثلة التالية مكتوبة تماما كما تكتب على صفحة Mathcad

1- الجذور و إيجاد حلول المعادلات:

باستخدام تعليمة root، لاحظ أنه يجب أن نحدد قيمة ابتدائية لـ x (أو تخمين أولي للجذر) تماما

كما في الطرق العددية التي رأيناها سابقا في الفصل الثاني.
أولا نعرف التابع باستخدام رمز $(:=)$.

$$f(x) := \cos(x) - x$$

ثم نعطي قيمة أولية لـ x

$$x := 1$$

ثم نستخدم أمر root لإيجاد الجذر

$$\text{root}(f(x), x) = 0.739648$$

أو بالشكل:

$$x := 1$$

$$\text{root}(693x^6 - 945x^4 + 315x^2 - 15, x) = 0.932$$

$$x := 1$$

$$\text{root}(x - 3 - \ln(x), x) = 4.505$$

$$x := 2$$

$$\text{root}(e^{-x} - \cos(x), x) = 1.292$$

$$f(x) := e^x \cdot (3 - x) - 3$$

$$x := 7$$

$$\text{root}(f(x), x) = 2.821$$

- أو باستخدام تعليمة $\text{polyroots}(v)$:

و التي تعطي جميع جذور كثير حدود أمثاله معطاة في المصفوفة V

$$x^2 + x - 1 = 0$$

تعطي الأمثال بالمصفوفة v :

$$v := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$
$$\text{polyroots}(v) = \begin{pmatrix} -0.618 \\ 1.618 \end{pmatrix}$$

- أو لحل جملة معادلات خطية:

Given

$$2x + 4y = 2$$

$$3x - 9y = 5$$

$$\text{Find}(x, y) \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{19}{15} \\ -\frac{2}{15} \end{pmatrix}$$

- و من أجل جملة غير خطية:

ندخل أيضا التخمين الأولي للمتحولات مثلا:

$$x := 1$$

$$y := 1$$

$$z := 0$$

Given

$$2 \cdot x + y = 5 - 2 \cdot z^2$$

$$y^3 + 4 \cdot z = 4$$

$$x \cdot y + z = e^z$$

$$\text{sol} := \text{Find}(x, y, z)$$

$$\text{sol} = \blacksquare$$

2-العمليات على المصفوفات:

يتم تعريف مصفوفة على الشكل:

$$a := \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 2 \\ 1 & 6 & 7 \end{pmatrix}$$

أو مصفوفة ببعد واحد (عمود) على الشكل:

$$v := \begin{pmatrix} 11 \\ 3 \\ 7 \end{pmatrix}$$

حيث يكون العنصر

$$a_{0,1} = 2$$

و نستطيع حساب معين هذه المصفوفة:

$$|a| = 28$$

و مقلوب هذه المصفوفة يحسب بالشكل:

$$a^{-1} = \begin{pmatrix} 0.821 & 0.143 & -0.393 \\ -0.929 & 0.143 & 0.357 \\ 0.679 & -0.143 & -0.107 \end{pmatrix}$$

و يعطى منقول المصفوفة بالعلاقة:

$$a^T = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 2 & 5 & 6 \\ 3 & 2 & 7 \end{pmatrix}$$

كما يمكن حل جملة من المعادلات باستخدام طريقة مقلوب مصفوفة على الشكل التالي:

نعرف أولاً مصفوفة الأمثال ومصفوفة

$$M := \begin{pmatrix} 7 & 0 & -2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & -1 & -3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & -5 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -3 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad v := \begin{pmatrix} 10 \\ 7 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ثم نستخدم التعليمة: $\text{Isolve}(M,v)$ و التي تعطي الحلول على شكل مصفوفة :

$$\text{Isolve}(M,v) = \blacksquare$$

3-التكاملات:

يمكن إجراء التكاملات بسهولة إذ نحتاج فقط لكتابتها كما لو أننا نكتبها على ورقة

ثم نضغط على زر إشارة المساواة و نحصل على الإجابة:

$$\int_0^{3.14} \sqrt{1 + \cos(x)}^2 dx = 3.818$$

$$\int_0^{7.3} \sin\left(\frac{\pi \cdot x}{2}\right) dx = 0.348$$

$$\int_0^1 \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx = 1.809$$

$$\int_0^1 \ln(x) dx = -1$$

و لكن يجب أن تكون التوابع قابلة للمكاملة مثلا التابع:

$$\int_0^3 \frac{1}{x} dx = \blacksquare$$

متباعد و بالتالي لا يمكن مكاملته.

كما يمكن إجراء تكاملات متعددة الأبعاد على الشكل:

$$\int_0^1 \int_0^1 x \cdot y \, dx \, dy = 0.25$$

4- الاستقراء:

نستطيع إجراء الاستقراء بطريقة المنحنيات التكميلية باستخدام التعليمة: cspline:

Y	100	115	124	155	177	188	200
X	5	15	25	35	45	55	65

نعرف أولا القيم العددية التي نريد استقراء النقاط منها مثلا:

$$vx := \begin{pmatrix} 5 \\ 15 \\ 25 \\ 35 \\ 45 \\ 55 \\ 65 \end{pmatrix} \quad vy := \begin{pmatrix} 100 \\ 115 \\ 124 \\ 155 \\ 177 \\ 188 \\ 200 \end{pmatrix}$$

ننشئ المنحنى التكاملي عبر هذه النقاط باستخدام التعليمة:

$$vs := cspline(vx, vy)$$

ثم نقوم بعملية الاستقراء عند القيمة العددية المطلوبة (مثلا النقطة 20):

$$\text{interp}(vs, vx, vy, 20) = \blacksquare$$

5- حل المعادلات التفاضلية:

نستطيع استخدام أمر `odesolve` و ذلك بعد أن نعرف المعادلة التي نريد حلها الشروط الابتدائية لها.

$$\frac{d}{dt}y(t) = f(t, y) \quad y(t_0) = y_0$$

$$f(t, y) := \sin(t) + \frac{1}{y}$$

$$t_0 := 0 \quad y_0 := 1$$

$$t_1 := 8 \cdot \pi$$

$$N := 1000$$

Given

$$y'(t) = f(t, y(t))$$

$$y(t_0) = y_0$$

$$y := \text{Odesolve}(t, t_1)$$

سيرسم mathcad حل المعادلة بيانيا

كما يمكن حل مسائل القيم الحدية مثلاً:

$$4 \cdot \frac{d^2}{dt^2} x(t) + x(t) = t$$

$$x(0) = 4$$

$$x(5) = 13.4$$

Given

$$4 \cdot \frac{d^2}{dt^2} x(t) + x(t) = t$$

$$x(0) = 4$$

$$x(5) = 13.4$$

$$x := \text{Odesolve}(t, 5)$$

سيرسم mathcad حل المعادلة بيانيا

6- إجراء العمليات الرياضية رمزياً: symbolic

يمكن باستخدام mathcad إجراء بعض العمليات الرياضية رمزياً. نستطيع إجراء مثل

هذه العمليات باختيار التعليمة المناسبة من قائمة symbolics انظر الشكل (3)

مثلاً يمكن إجراء عملية تفاضل أو تكامل رمزياً على الشكل:

$$f(x) := x^4 - x^2 + 9$$

$$\int f(x) dx \rightarrow \frac{1}{5} \cdot x^5 - \frac{1}{3} \cdot x^3 + 9 \cdot x$$

$$\frac{d}{dx} f(x) \rightarrow 4 \cdot x^3 - 2 \cdot x$$

كما نستطيع إيجاد النهايات على الشكل:

$$\lim_{x \rightarrow 0} f(x) \rightarrow 9$$

$$\lim_{x \rightarrow 3} f(x) \rightarrow 81$$

كما نستطيع أخذ المجاميع أو الجداءات وكذلك إجراء تحويلات فورييه أو تحويلات لابلاس:

لنجري تحويل لابلاس للتابع و ذلك باختيار أمر Laplace من قائمة symbolics كما يجب أن نحدد المتحول الذي سنجري التحويل عليه x في هذه الحالة.

$$x^4 - x^2 + 9$$

نحصل على:

$$\frac{24}{s^5} - \frac{2}{s^3} + \frac{9}{s}$$

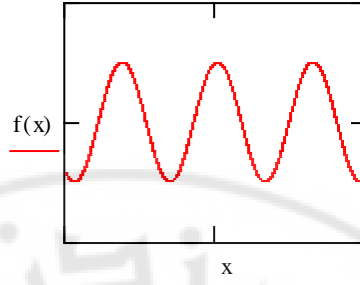
و إذا أخذنا تحويل لابلاس العكسي نحصل على العلاقة الأساسية مرة ثانية:

$$t^4 - t^2 + 9$$

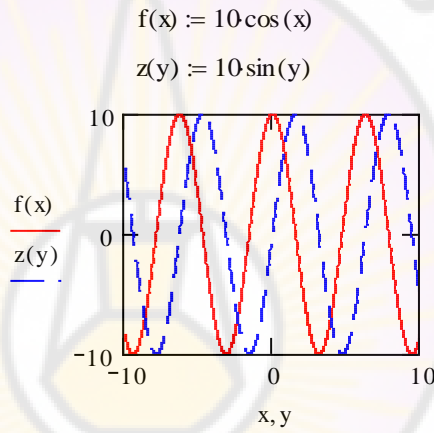
7-الرسم البياني:

نستطيع رسم تابع و ذلك بتعريف التابع و تسمية المتحول الذي نريد رسم التابع بدلالته:

$$f(x) := 5 \cos(x)$$



كما نستطيع رسم تابعين على نفس المحاور و ذلك باستخدام الفاصلة بعد تسمية التابع الأول و كتابة التابع الثاني، بالشكل:



مثال: نرسم توزيع ماكسويل - بولتزمان للسرع من أجل M الكتلة المولية و من أجل $T=600 \text{ K}$ على الشكل:

$$R := 8.31$$

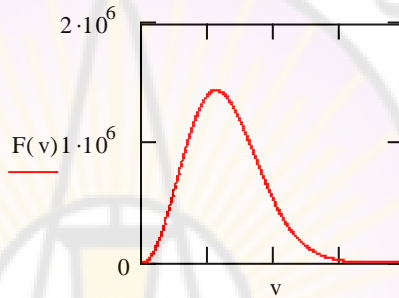
$$M := 0.03$$

$$T := 600$$

$$F(v) := 4 \cdot \pi \cdot v^2 e^{-\frac{M \cdot v^2}{2 \cdot R \cdot T}}$$

نحدد مجال الرسم من 0 إلى 2000 و ذلك بخطوة مقدارها 5 و ذلك بالشكل:

$$v := 0, 5..2000$$

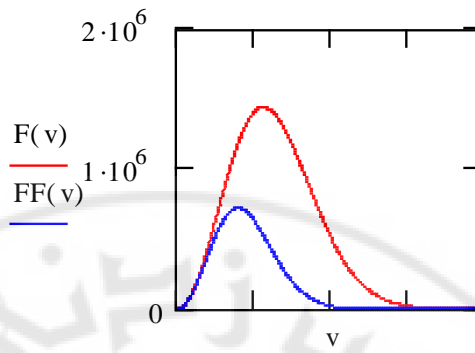


حيث تم أخذ المجال من 0 و حتى 2000 (و ذلك باستخدام الفاصلة المنقوطة ;) من أجل السرعة:

و نستطيع أن نرسم على نفس الرسم التوزيع من أجل

$$T := 300$$

$$FF(v) := 4 \cdot \pi \cdot v^2 e^{-\frac{M \cdot v^2}{2 \cdot R \cdot T}}$$



ملاحظة: يمكن الرسم على Mathcad رسومات ثلاثية الأبعاد.

مسائل وتمارين

استخدم MathCad في حل جميع المسائل التالية:

- 1- أوجد جذور المعادلات التالية وقارن النتائج مع النتائج المحسوبة باستخدام برامج الفورتران.

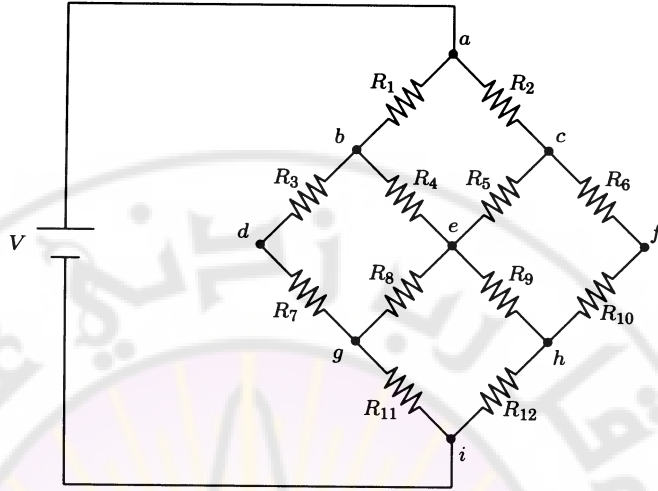
$$F(x)=\cos x-x, \\ \ln(x)=x-3,$$

$$F(x)=x^2-5, \\ e^{-x}=\cos x,$$

- 2- احسب التكامل التالي. هذا التكامل يعطي طول القوس المحددة بالمنحني $y=\sin(x)$. ولا توجد علاقة تحليلية تعطي هذا التكامل.

$$\int_0^{\pi} \sqrt{1+\cos^2 x} .dx$$

- 3- لدينا الدارة الكهربائية الموضحة بالشكل التالي، إذا طبقنا قانون كيرشوف نجد مجموعة من المعادلات التالية:



$$\begin{aligned}
 3V_b - V_d - V_e &= 10 \\
 3V_c - V_e - V_f &= 10 \\
 2V_b - 3V_d + V_g &= 0 \\
 2V_b + V_c - 6V_e + V_g + 2V_h &= 0 \\
 V_c - 3V_f + 2V_h &= 0 \\
 V_d + V_e - 3V_g &= 0 \\
 V_e + V_f - 3V_h &= 0
 \end{aligned}$$

حل هذه المعادلات باستخدام MathCad وأوجد قيم الكمونات V_a, V_b, V_c و V_d, V_e, V_f, V_g, V_h .

4- في احدى القياسات الفلكية على أحد النجوم حصلنا على النتائج التالية :

Phase	-110	-80	-40	-10
Magnitude	7.98	8.95	10.71	11.70
	30	80	110	
	10.01	8.23	7.86	

Phase	-100	-60	-20
Magnitude	8.37	9.40	11.39
	20	60	100
	10.84	8.53	7.89

5- باستخدام المنحنى التكميبي (cspline) من MathCad وبلاستفادة من

الجدول الأول تحقق من القيم المعطاة في الجدول الثاني:

6- كرر العملية السابقة باستخدام (lspline) وقارن مع (1) واشرح الفرق.

7- أوجد القيم الموافقة لأي ثلاث نقاط تختارها أنت والتي تختلف عن النقاط المعطاة في الجدولين السابقين.

5- يعطى دور النواس بشكل عام بالعلاقة:

$$T = 4 \sqrt{\frac{l}{g}} K \left(\sin \frac{\theta_o}{2} \right)$$

حيث :

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \xi}}$$

احسب دور النواس من أجل زوايا مختلفة.

6- احسب التكامل :

$$\int_0^2 \int_0^1 e^{-xy} dx dy$$

7- ليكن لدينا منطقة مربعة في المستوي xy بحيث يكون:

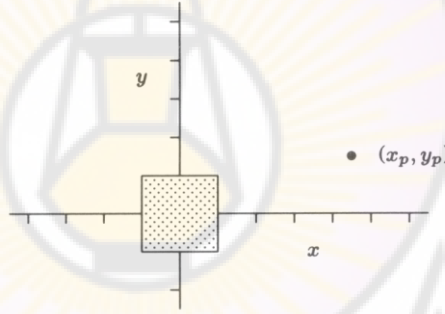
$$-1 \leq x \leq 1$$

$$-1 \leq y \leq 1$$

و تحتوي على توزيع منتظم للشحنات ρ كما هو مبين في الشكل. نحصل على الكمون الكهربائي الساكن في نقطة (x_p, y_p) الناتج عن هذا التوزيع للشحنات:

$$\Phi(x_p, y_p) = \frac{\rho}{4\pi\epsilon_0} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{dx dy}{\sqrt{(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2}}$$

احسب الكمون $\Phi(x_p, y_p)$ و ضع النتائج في جدول. خذ القيم $x, y = 2, 4, \dots, 20$ من أجل التبسيط خذ $\frac{\rho}{4\pi\epsilon_0} = 1$. ارسم خطوط تساوي الكمون.



8- كرر المسألة السابقة من أجل توزيع منتظم للشحنات ρ على حجم:

$$-1 \leq x \leq 1$$

$$-1 \leq y \leq 1$$

$$-1 \leq z \leq 1$$



الفصل الثاني

تطبيقات من الفيزياء الإحصائية

باستخدام Mathcad

1- توزيع ماكسويل - بولتزمان للسرعة:

شرط إمكانية تطبيق الإحصاء الكلاسيكي على غاز ما هو:

$$\lambda^3 \ll \ell^3 \quad \text{و} \quad \ell^3 = \frac{V}{N} \quad \text{حيث:}$$
$$\lambda = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2}$$

من أجل غاز يخضع للإحصاء الكلاسيكي يعطى توزيع السرعة بعلاقة ماكسويل بولتزمان:

$$F(V)dV = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} V^2 e^{-\frac{mV^2}{2kT}} dV$$

حيث يجب على هذا التوزيع أن يحقق شرط التنظيم:

$$\int F(V)dV = N$$

بالاستفادة من توزيع ماكسويل بولتزمان للسرعة نجد أن:

السرعة الوسطى تعطى بالعلاقة:

$$\bar{V} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \left(\frac{K.T}{m} \right)}$$

و السرعة التربيعية الوسطى:

$$V_{rms} = \sqrt{3 \left(\frac{K.T}{m} \right)}$$

و السرعة الأكثر احتمالا:

$$V_{mp} = \sqrt{\frac{2K.T}{m}}$$

أما نسبة الجزيئات التي تمتلك سرعة أكبر من سرعة v فيعطى بالعلاقة:

$$\frac{N_v}{N} = 1 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} u e^{-u^2} - \text{erf}(u)$$

$$u = \sqrt{\frac{m}{2.K.T}} . V$$

حيث

و $\text{erf}(u)$ هو تابع الخطأ.

كما يعطى عدد الجسيمات على ارتفاع z ، حيث $P(z_o)$ عدد الجسيمات على ارتفاع

z_o

$$P(z) = P(z_o) . e^{-mgz}$$

و التي تسمى المعادلة البارومترية Barometric equation.

- تحقق من صحة العلاقات السابقة.

تطبيقات:

باستخدام Mathcad حل ما يلي:

1- من أجل غاز مؤلف من جزيئات الأوكسجين O_2 عند الدرجة $T=300^\circ K$

يشغل حجم 1 m^3 و كثافته $\rho = 1 \text{ gr/cm}^3$. علما أن كتلة جزيء

الأوكسجين $M=0.032 \text{ Kg/mole}$:

a. هل من الممكن اعتبار هذا الغاز كلاسيكياً؟

b. احسب السرعة الوسطى و v_{rms} و السرعة الأكثر احتمالا لهذا الغاز؟

c. احسب نسبة الجزيئات التي تمتلك سرعة أكبر من $v= 300 \text{ m/sec}$.

d. احسب نسبة الجزيئات التي تمتلك سرعة ضمن المجال: $v = 300 - 450 \text{ m/sec}$.

e. كرر الحسابات من أجل الدرجة $T = 600^\circ \text{K}$ و $T = 900^\circ \text{K}$.

f. ارسم توزيع ماكسويل - بولتزمان للسرع من أجل الحالات $T = 300^\circ \text{K}$ و $T = 600^\circ \text{K}$ و $T = 900^\circ \text{K}$.

2- كرر الخطوات في السؤال السابق من أجل غاز مؤلف من جزيئات بخار الثاليوم عند الدرجة $T = 840^\circ \text{K}$.

3- كرر الخطوات في السؤال السابق من أجل غاز مؤلف من جزيئات غاز CO_2 عند الدرجة $T = 400^\circ \text{K}$.

4- كرر الخطوات في السؤال السابق من أجل غاز مؤلف من جزيئات بخار النحاس عند الدرجة $T = 1000^\circ \text{K}$.

5- من أجل غاز مؤلف من N ذرة أو جزيء. ويخضع لتوزيع ماكسويل - بولتزمان.

1- اختر أي عنصر من جدول العناصر الدوري أو أي جزيء. واختر أي درجة حرارة بين 300 K و 3000 K .

2- احسب السرعة الوسطية والتربيعية الوسطى والأكثر احتمالا.

3- احسب نسبة الذرات التي تمتلك سرعة أكبر من السرعة الأكثر احتمالا.

4- احسب نسبة الذرات التي تمتلك سرعة أكبر من السرعة $v = 400 \text{ m/sec}$.

5- احسب نسبة الذرات التي تقع ضمن المجال $(v_1 = 200 \text{ m/sec}, v_2 = 360 \text{ m/sec})$.

6- ارسم توزيع ماكسويل - بولتزمان للسرع.

جدول 1. الكتلة المولية $gr/mole$ لبعض العناصر و الجزيئات

O ₂	0.032	N ₂	0.028
C	0.012	TI	0.204
cu	0.064	Hg	0.200

6- تعطى السرعة اللازمة لهروب جسيمة من حقل جاذبية بالعلاقة:

$$V_{esc} = \sqrt{\frac{2.G.M}{R}}$$

حيث : M الكتلة المسببة لحقل الثقالة (كتلة الأرض مثلاً).

R بعد الجسيمة عن مركز ثقل الكتلة الجاذبة (نصف قطر الأرض مثلاً)

G ثابت الجاذبية العام:

$$G = 6.62 \times 10^{-11} N.m^2 / Kg^2$$

1- استفد من المعلومات المعطاة في الجدول (1) و احسب سرعة الهروب من أجل

كواكب المجموعة الشمسية و قارن مع النتائج المعطاة في الجدول (2).

2- احسب نسبة جزيئات النيتروجين بالقرب من سطح الأرض و التي تمتلك سرعة أكبر من سرعة الهروب.

3- احسب نسبة جزيئات النيتروجين على ارتفاع 10 Km من سطح الأرض و التي تمتلك سرعة أكبر من سرعة الهروب.

4- احسب نسبة جزيئات النيتروجين على ارتفاع 100 Km من سطح الأرض و التي تمتلك سرعة أكبر من سرعة الهروب.

5- احسب نسبة جزيئات النيتروجين بالقرب من سطح القمر و التي تمتلك سرعة أكبر من سرعة الهروب.

6- احسب نسبة جزيئات النيتروجين بالقرب من سطح المريخ و التي تمتلك سرعة أكبر من سرعة الهروب.
ماذا تستنتج من الحسابات السابقة؟.

جدول 2. بعض المعلومات عن كواكب المجموعة الشمسية

Solar System Data

Body	Mass (kg)	Mean Radius (m)	Period (s)	Distance from Sun (m)
Mercury	3.18×10^{23}	2.43×10^6	7.60×10^6	5.79×10^{10}
Venus	4.88×10^{24}	6.06×10^6	1.94×10^7	1.08×10^{11}
Earth	5.98×10^{24}	6.37×10^6	3.156×10^7	1.496×10^{11}
Mars	6.42×10^{23}	3.37×10^6	5.94×10^7	2.28×10^{11}
Jupiter	1.90×10^{27}	6.99×10^7	3.74×10^8	7.78×10^{11}
Saturn	5.68×10^{26}	5.85×10^7	9.35×10^8	1.43×10^{12}
Uranus	8.68×10^{25}	2.33×10^7	2.64×10^9	2.87×10^{12}
Neptune	1.03×10^{26}	2.21×10^7	5.22×10^9	4.50×10^{12}
Pluto	$\approx 1.4 \times 10^{22}$	$\approx 1.5 \times 10^6$	7.82×10^9	5.91×10^{12}
Moon	7.36×10^{22}	1.74×10^6	—	—
Sun	1.991×10^{30}	6.96×10^8	—	—

جدول 3. سرعة الهروب من أجل بعض الكواكب

TABLE 14.3 Escape Velocities for the Planets, the Moon, and the Sun

Planet	v_{esc} (km/s)
Mercury	4.3
Venus	10.3
Earth	11.2
Moon	2.3
Mars	5.0
Jupiter	60
Saturn	36
Uranus	22
Neptune	24
Pluto	1.1
Sun	618

2- تابع مجموع الحالات للجزيئات المتعددة الذرات:

من أجل جزيء خطي أو ثنائي الذرات يعطى تابع مجموع الحالات بالعلاقة:

$$Z = Z^{tr} \cdot Z^{rot} \cdot Z^{vib}$$

و ذلك بأخذ الحركة الانسحابية و الحركة الدورانية والحركة الاهتزازية فقط.

$$Z^{tr} = \left(\frac{2\pi M k T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot V$$

$$Z^{rot} = \frac{8\pi^2 I k T}{\sigma \cdot h^2} = \frac{T}{\sigma \cdot \Theta_r}$$

$$Z^{vib} = \frac{e^{-\Theta_v/2T}}{1 - e^{-\Theta_v/T}}$$

من أجل N جزيء يجب أن نأخذ عدم تمايز الجسيمات بالنسبة للحركة الانسحابية و نستطيع أن نحسب التتابع الترموديناميكية من تابع مجموع الحالات الناتج. و نحصل على العلاقات التالية:

طاقة هلمهولتز الحرة بالعلاقة:

$$-\frac{F}{N.K.T} = \ln \left[\left(\frac{2\pi(m_1 + m_2)k.T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{V.e}{N} \right] + \ln \frac{8.\pi^2.I.k.T}{\sigma.h^2} - \frac{h\nu}{2.k.T} - \ln(1 - e^{-h\nu/k.T})$$

الإنترودية:

$$\frac{S}{N.K} = \ln \left[\left(\frac{2\pi(m_1 + m_2)k.T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{V.e^{5/2}}{N} \right] + \ln \frac{8.\pi^2.I.k.T.e}{\sigma.h^2} + \frac{h\nu/k.T}{e^{h\nu/k.T} - 1} - \ln(1 - e^{-h\nu/k.T})$$

الطاقة الداخلية:

$$\frac{E}{N.K.T} = \frac{3}{2} + \frac{2}{2} + \frac{h\nu}{2.k.T} + \frac{h\nu/k.T}{(e^{h\nu/k.T} - 1)}$$

السعة الحرارية:

$$\frac{C_V}{N.K} = \frac{3}{2} + \frac{2}{2} + \left(\frac{h\nu}{k.T} \right)^2 \frac{e^{h\nu/k.T}}{(e^{h\nu/k.T} - 1)^2}$$

حيث اعتبرنا الغاز مثالياً أي:

$$P.V = R.T$$

باقي الرموز هي الرموز المتعارف عليها في مادة الفيزياء الإحصائية.

- تحقق من صحة العلاقات السابقة.

أما من أجل جزيء غير خطي (أو مؤلف من ثلاث ذرات أو أكثر) يعطى تابع مجموع الحالات بالعلاقة:

$$z = z^{tr} . z^{rot} . z^{vib}$$

و ذلك بأخذ الحركة الإنسحابية و الحركة الدورانية والحركة الاهتزازية فقط.

$$z^{tr} = \left(\frac{2\pi M k T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot V$$

$$z^{rot} = \frac{\pi^{1/2}}{\sigma} \cdot \left(\frac{8\pi^2 I_A k T}{h^2} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{8\pi^2 I_B k T}{h^2} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{8\pi^2 I_C k T}{h^2} \right)^{1/2}$$

$$z^{vib} = \prod_{i=1}^{n'} \frac{e^{-\Theta_i/2T}}{1 - e^{-\Theta_i/T}}$$

حيث : $n' = 3n - 5$ من أجل الجزيئات الخطية

و $n' = 3n - 6$ من أجل الجزيئات غير

الخطية

و الترددات الطبيعية $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_{n'}$. عادة نعرف قيم هذه الترددات من القياسات

التجريبية وبالتالي نستطيع حساب الخواص الترموديناميكية.

و تعطى طاقة هلمهولتز الحرة بالعلاقة:

$$-\frac{F}{N.K.T} = \ln \left[\left(\frac{2\pi \left(\sum_i m_i \right) k.T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{V e}{N} \right] + \ln \frac{\pi^{1/2}}{\sigma} \cdot \left(\frac{T^3}{\Theta_A \cdot \Theta_B \cdot \Theta_C} \right)^{1/2} - \sum_{i=1}^{3n-6} \left[\frac{h\nu_i}{2.k.T} + \ln(1 - e^{-h\nu_i/k.T}) \right]$$

و تعطى الإنتروبية بالعلاقة:

$$\frac{S}{N.K} = \ln \left[\left(\frac{2\pi \left(\sum_i m_i \right) k.T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{V \cdot e^{5/2}}{N} \right] + \ln \frac{\pi^{1/2} \cdot e^{3/2}}{\sigma} \cdot \left(\frac{T^3}{\Theta_A \cdot \Theta_B \cdot \Theta_C} \right)^{1/2} + \sum_{i=1}^{3n-6} \left[\frac{h\nu_i/k.T}{e^{h\nu_i/k.T} - 1} - \ln(1 - e^{-h\nu_i/k.T}) \right]$$

و تعطى الطاقة الداخلية بالعلاقة:

$$\frac{E}{N.K.T} = \frac{3}{2} + \frac{3}{2} + \sum_{i=1}^{3n-6} \left(\frac{h\nu_i}{k.T} + \frac{e^{h\nu_i/k.T}}{(e^{h\nu_i/k.T} - 1)} \right)$$

و تعطى السعة الحرارية بالعلاقة:

$$\frac{C_V}{N.K} = \frac{3}{2} + \frac{3}{2} + \sum_{i=1}^{3n-6} \left(\frac{h\nu_i}{k.T} \right)^2 \frac{e^{h\nu_i/k.T}}{(e^{h\nu_i/k.T} - 1)^2}$$

$$P.V = R.T$$

حيث :

- تحقق من صحة العلاقات السابقة.

تطبيقات:

1- استند من القيم المعطاة في الجداول و احسب قيم C_V و S من أجل عدد من العناصر و قارن مع النتائج المعطاة في الجدول و ذلك من أجل الجزيئات المعطاة في الجدول (1).

2- احسب F من أجل العناصر المحسوبة في المسألة السابقة.

3- احسب قيم C_V و S من أجل العناصر N_2O , BF_3 , CO_2 و قارن مع النتائج المعطاة في الجداول (حالة جزيئات غير خطية). علما بأنه:
من أجل NH_3 :

$$\theta_i = 5059,1624,5242,5242,2534,2534$$

$$\Theta_a = \Theta_b = \Theta_c = 25790$$

و من أجل N_2O :

$$\theta_i = 2087,1128,2577$$

$$\Theta_a = \Theta_b = \Theta_c = 4.22$$

انتبه إلى تناظر الجزيئات (قيمة σ).

4- احسب قيم C_v بدلالة درجة الحرارة من أجل BF_4 :

$$\theta_i = 270, 955, 2070, 2070, 631, 631$$

جدول 1.

PARAMETERS FOR DIATOMIC MOLECULES

	$\Theta_v, ^\circ\text{K}$	$\Theta_r, ^\circ\text{K}$	$r_e, \text{\AA}$	D_0, ev
H_2	6210	85.4	0.740	4.454
N_2	3340	2.86	1.095	9.76
O_2	2230	2.07	1.204	5.08
CO	3070	2.77	1.128	9.14
NO	2690	2.42	1.150	5.29
HCl	4140	15.2	1.275	4.43
HBr	3700	12.1	1.414	3.60
HI	3200	9.0	1.604	2.75
Cl_2	810	0.346	1.989	2.48
Br_2	470	0.116	2.284	1.97
I_2	310	0.054	2.667	1.54

جدول 2.

ENTROPY OF GASES AT 1 ATMOSPHERE PRESSURE

Gas	$T, ^\circ\text{K}$	$S_{\text{spect}},$ $\text{cal}\cdot\text{deg}^{-1}\cdot\text{mole}^{-1}$	$S_{\text{cal}},$ $\text{cal}\cdot\text{deg}^{-1}\cdot\text{mole}^{-1}$
A	298.1	37.0	36.4
Cd	298.1	40.1	40.0
Zn	298.1	38.5	38.4
Hg	298.1	41.8	41.3
N ₂	298.1	45.8	45.9
O ₂	298.1	49.0	49.1
HCl	298.1	44.6	44.5
HBr	298.1	47.5	47.6
NH ₃	239.7	44.1	44.1
CO ₂	194.7	47.5	47.6
CH ₃ Br	276.7	58.0	57.9

جدول 3.

ENTROPY OF GASES AT 1 ATMOSPHERE PRESSURE

Gas	$T, ^\circ\text{K}$	$S_{\text{spect}},$ $\text{cal}\cdot\text{deg}^{-1}\cdot\text{mole}^{-1}$	$S_{\text{cal}},$ $\text{cal}\cdot\text{deg}^{-1}\cdot\text{mole}^{-1}$	$S_{\text{spect}} - S_{\text{cal}}$	
CO	298.1	47.3	46.2	1.1	$R \ln 2 = 1.4$
NNO	184.6	48.5	47.4	1.1	$R \ln 2 = 1.4$
CH ₃ D	99.7	39.5	36.7	2.8	$R \ln 4 = 2.7$
H ₂ O	298.1	45.1	44.3	0.8	$R \ln (3/2) = 0.8$
D ₂ O	298.1	46.7	45.9	0.8	$R \ln (3/2) = 0.8$

جدول العناصر الدوري

Periodic Table of the Elements

Alkali Metals																		Inert Gases					
1 H	Alkaline Earth Metals																	Nonmetals		Halogens		2 He	
3 Li	4 Be																	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	Transition Elements (Heavy Metals)																13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr						
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe						
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn						
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Ha	106 Sg	107 Ns	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn												
Lanthanide Series			58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu							
Actinide Series			90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr							

الفصل الثالث

تطبيقات من فيزياء الجسم الصلب

باستخدام Mathcad

1- السعة الحرارية للأجسام الصلبة

السعة الحرارية الناتجة عن اهتزاز الشبكة البلورية تأخذ الشكل:

$$C_V = 3.R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \cdot \frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2}$$

و ذلك من أجل نموذج أينشتاين Einstein.

$$\Theta_E = \frac{h\nu_E}{k}$$

حيث

و تأخذ الشكل :

$$C_V = 9.R \left(\frac{T}{T_d} \right)^3 \cdot \int_0^{q_d} \frac{q^4 \cdot e^q}{(e^q - 2)^2} \cdot dq$$

من أجل نموذج ديبي Debye .

حيث : T_d درجة حرارة ديبي.

$$T_d = \frac{h\nu_d}{k}$$

$$q_d = \frac{h\nu_d}{k.T}$$

و حيث تعطى كثافة الحالات بالشكل:

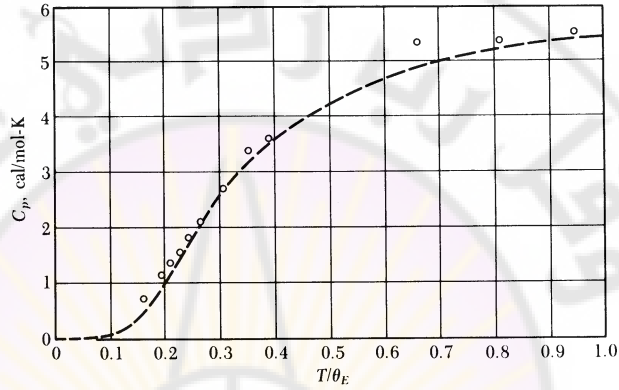
$$g(\nu) = \begin{cases} \frac{9N}{\nu_d^3} \nu^2 & \nu < \nu_d \\ 0 & \nu > \nu_d \end{cases}$$

تأكد من صحة العلاقات السابقة.

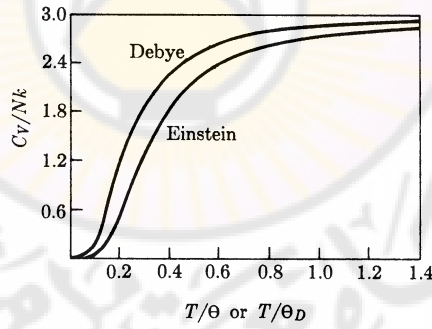
تطبيقات:

- 1- ارسم كثافة الحالات لنموذج ديباي من أجل عنصر ما.
- 2- من أجل مادة الألمنيوم احسب السعة الحرارية في مجال من درجات الحرارة بين $[0, 1500 \text{ } ^\circ\text{K}]$ وذلك باستخدام نموذجي أينشتاين و ديباي و قارن بين النتيجةين. ضع نتائجك في جدول مناسب. ارسم C_v بدلالة T وذلك من أجل الحالتين. ماذا تستنتج؟. هل تتوافق النتائج مع قانون دولونغ- بيتيت Delong-Petite من أجل الدرجات المرتفعة؟.
- 3- قارن بين النتائج المحسوبة باستخدام درجة حرارة أينشتاين المحسوبة من المعطيات الترموديناميكية $\Theta_E(therm)$ درجة حرارة أينشتاين المحسوبة من خواص المرونة $\Theta_E(el.)$.
- 4- احسب تغير الأنتروبية للألمنيوم في المثال السابق و ذلك إذا تغيرت درجة حرارته من:
a- $T_1=100 \text{ } ^\circ\text{K}$ و حتى $T_2=900 \text{ } ^\circ\text{K}$
b- $T_1=100 \text{ } ^\circ\text{K}$ و حتى $T_2=1100 \text{ } ^\circ\text{K}$.
علما أن درجة انصهار الألمنيوم هي $670 \text{ } ^\circ\text{C}$ و الحرارة الكامنة للانصهار هي:
 $m_l = 3.97 \times 10^4 \text{ J / Kg}$
- 5- كرر العمل في 1 من أجل العناصر التالية:
الرصاص، الفضة، النحاس.

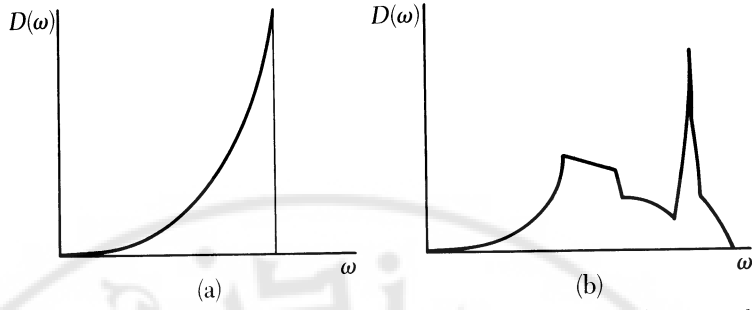
6- كرر العمل في 1 من أجل ثلاثة عناصر تختارها. و ذلك باستخدام نموذج ديباي فقط.



مقارنة لنتائج نموذج أينشتاين مع التجربة



مقارنة بين نموذج ديباي و نموذج أينشتاين



كثافة الحالات في نموذج ديبي (a) وكثافة الحالات في حالة بلورة حقيقية (b)

جدول 1. درجة حرارة أينشتاين لعدد من العناصر

	$\rho \text{ g / cm}^3$	$\Theta_E (threm) ^\circ K$	$\Theta_E (el.) ^\circ K$
Al	2.7	240	303
Pb	11.36	67	62

جدول 2. الكثافة و التركيز الذري

Table 4 Density and atomic concentration		The data are given at atmospheric pressure and room temperature, or at the stated temperature in deg K. (Crystal modifications as for Table 3.)	
H ^{4K} 0.088			He ^{2K} 0.205 (at 37 atm)
Li ^{78K} 0.542 4.700 3.023	Be 1.82 12.1 2.22	B 2.47 13.0 1.54	C 3.516 17.6 1.54
Na ^{5K} 1.013 2.652 3.659	Mg 1.74 4.30 3.20	N ^{20K} 1.03	O 1.44
		F 1.44	Ne ^{4K} 1.51 4.36 3.16
		Al 2.70 6.02 2.86	Si 2.33 5.00 2.35
		P 2.33 5.00 2.35	S 2.02
		Cl ^{93K} 2.03	Ar ^{4K} 1.77 2.66 3.76
K ^{5K} 0.910 1.402 4.525	Ca 1.53 2.30 3.95	Sc 2.99 4.27 3.25	Ti 4.51 5.66 2.89
		V 6.09 7.22 2.62	Cr 7.19 8.33 2.50
		Mn 7.47 8.18 2.24	Fe 7.87 8.50 2.48
		Co 8.9 8.97 2.50	Ni 8.91 9.14 2.49
		Cu 8.93 8.45 2.56	Zn 7.13 6.55 2.66
		Ga 5.91 5.10 2.44	Ge 5.32 4.42 2.45
		As 5.77 4.65 2.45	Se 4.81 3.67 2.32
		Br ^{123K} 4.05	Kr ^{4K} 3.09 2.17 4.00
Rb ^{5K} 1.629 1.148 4.837	Sr 2.58 1.78 4.30	Y 4.48 3.02 3.55	Zr 6.51 4.29 3.17
		Nb 8.58 5.56 2.86	Mo 10.22 6.42 2.72
		Tc 11.50 7.04 2.71	Ru 12.36 7.36 2.65
		Rh 12.42 7.26 2.69	Pd 12.00 6.80 2.75
		Ag 10.50 5.85 2.89	Cd 8.65 4.64 2.98
		In 7.29 3.83 3.25	Sn 5.76 2.91 2.81
		Sb 6.69 3.31 2.91	Te 6.25 2.94 2.86
		I 4.95 2.36 3.54	Xe ^{4K} 3.78 1.64 4.34
Cs ^{5K} 1.997 0.905 5.235	Ba 3.59 1.60 4.35	La 6.17 4.52 3.73	Hf 13.20 5.55 3.13
		Ta 16.66 6.30 2.86	W 19.25 6.80 2.74
		Re 21.03 7.14 2.74	Os 22.58 7.06 2.68
		Ir 22.55 7.06 2.71	Pt 21.47 6.62 2.77
		Au 19.28 5.90 2.88	Hg ²²⁷ 14.26 4.26 3.01
		Tl 11.87 3.50 3.46	Pb 11.34 3.30 3.50
		Bi 9.80 2.82 3.07	Po 9.31 2.67 3.34
		At —	Rn —
Fr —	Ra —	Ac 10.07 2.66 3.76	Ce 6.77 2.91 3.65
		Pr 6.78 2.92 3.63	Nd 7.00 2.93 3.66
		Pm —	Sm 7.54 3.03 3.59
		Eu 5.25 2.04 3.96	Gd 7.89 3.02 3.58
		Tb 8.27 3.22 3.52	Dy 8.53 3.17 3.51
		Ho 8.80 3.22 3.49	Er 9.04 3.26 3.47
		Tm 9.32 3.32 3.47	Yb 6.97 3.02 3.88
		Lu 9.84 3.39 3.43	
		Th 11.72 3.04 3.60	Pa 15.37 4.01 3.21
		U 19.05 4.80 2.75	Np 20.45 5.20 2.62
		Pu 19.81 4.26 3.1	Am 11.87 2.96 3.61
		Cm —	Bk —
		Cf —	Es —
		Fm —	Md —
		No —	Lr —

3-المغناطيسية المسايرة:

ليكن لدينا N ثنائي قطب مغناطيسي متمايز و بحيث التأثير المتبادل بين الثنائيات مهمل بالمقارنة مع الحقل المغناطيسي الخارجي H المطبق، يأخذ تابع مجموع الحالات الشكل:

$$Z = Z_1^N = \sum_{\{\theta_i\}} e^{\beta \mu H \sum \cos(\theta_i)}$$

أو:

$$Z = \sum_{\{\theta_i\}} e^{\beta \mu H \cdot \cos(\theta)}$$

حيث يأخذ المجموع $\{\theta_i\}$ على كل التوجهات الممكنة لثنائي المغناطيسي. سنناقش حالتين الحالة الكلاسيكية و التي تسمح بأخذ أي توجه للزوايا $\{\theta_i\}$ و الحالة الكمومية حيث تكون التوجهات مكممة.

1- الحالة الكلاسيكية:

ينتج لدينا في هذه الحالة:

$$\bar{\mu} = \mu \left\{ \coth(\beta \mu H) - \frac{1}{\beta \mu H} \right\} = \mu \cdot L(\beta \mu H)$$

حيث L يسمى تابع لانجفين Langevine .

و تأخذ الطواعية المغناطيسية الشكل :

$$\chi = \frac{N \cdot \mu^2}{3kT} = \frac{C}{T}$$

حيث C ثابت و تسمى العلاقة السابقة قانون كوري.

2- الحالة الكمومية:

ينتج لدينا في هذه الحالة:

$$\bar{\mu} = g \cdot \mu_B \cdot J \left\{ \left(1 + \frac{1}{2J} \right) \coth \left(\left(1 + \frac{1}{2J} \right) \cdot x \right) - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{x}{2J} \right) \right\}$$

$$\bar{\mu} = \mu \cdot B_J(x)$$

حيث :

$$x = \beta \cdot g \cdot \mu_B \cdot H \cdot m_J$$

و تأخذ الطواعية المغنطيسية في هذه الحالة الشكل:

$$\chi = \frac{C}{T}$$

$$C_J = \frac{N \cdot g^2 \cdot \mu_B^2 \cdot J(J+1)}{3 \cdot k}$$

باستخدام Mathcad أجب عما يلي:

- 1- ارسم تابع لانجفين من أجل قيم مناسبة تختارها أنت. قارن مع الشكل (1).
- 2- ارسم تابع بريللوان Brelloian من أجل قيم مناسبة تختارها أنت. قارن مع الشكل (2).
- 3- احسب قيمة $\bar{\mu}$ من أجل قيم تختارها أنت لـ H و μ و T . ادرس تغير $\bar{\mu}$ بدلالة درجة الحرارة. كرر الحساب من أجل الحالتين الكلاسيكية و الكمومية.
- 4- احسب الطواعية المغنطيسية χ في الحالة الكمومية و ذلك من أجل قيم مختلفة لـ J و T . ارسم تابعة χ لدرجة الحرارة.

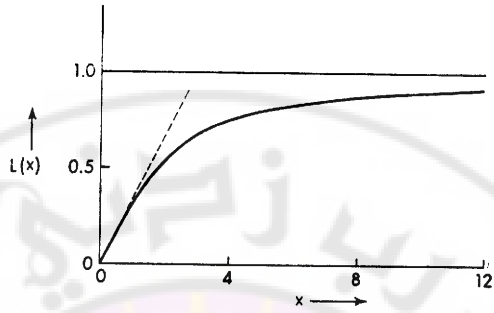


FIG. 3.6. The Langevin function $L(x)$.

الشكل (1)

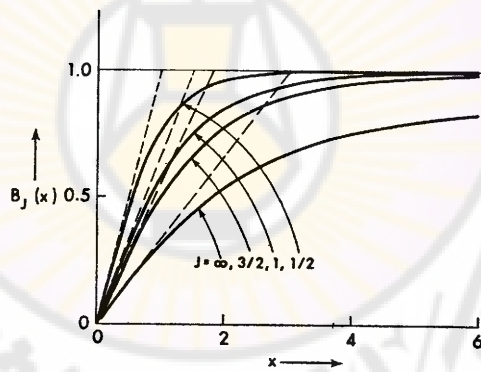


FIG. 3.8. The Brillouin function $B_J(x)$ for various values of J .

الشكل (2)

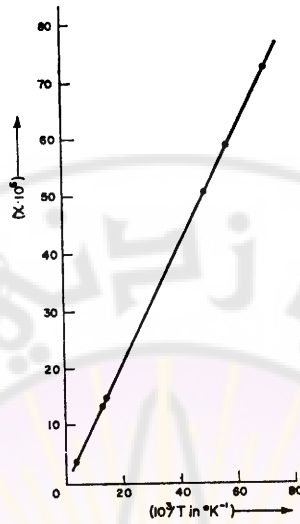


FIG. 3.7. χ vs. $1/T$ plot for a powdered sample of copper-potassium sulphate hexahydrate (after Hupse, 1942).

(3) الشكل

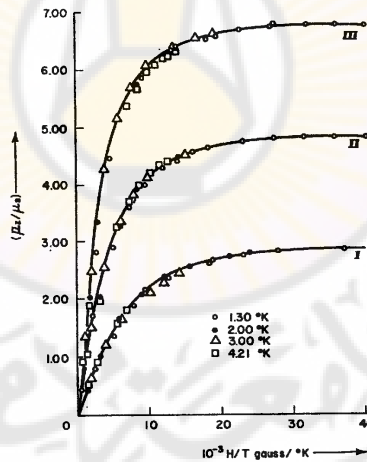


FIG. 3.9. Plots of $\bar{\mu}_z/\mu_B$ as a function of H/T . The solid curves represent the theoretical results, while the points mark the experimental findings of Henry (1952). Curve I is for potassium chromium alum ($J = \frac{3}{2}$, $g = 2$), curve II for iron ammonia alum ($J = \frac{5}{2}$, $g = 2$) and curve III for gadolinium sulphate octahydrate ($J = \frac{7}{2}$, $g = 2$).

(4) الشكل



الفصل الرابع

تطبيقات من ميكانيك الكم

باستخدام Mathcad

1- جسيمة في بئر كموي لا نهائي:

تعطى الطاقة لجسيمة في بئر كموي لا نهائي بالعلاقة:

$$E_n = \frac{n^2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2}{2 \cdot m \cdot L^2}$$

و يعطى التابع الموجي بالعلاقة:

$$\psi_n(r) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}\right)$$

و ذلك من أجل $0 < x < L$ و صفر من أجل أي نقطة خارج هذا المجال.

1- تحقق من العلاقات السابقة.

2- نفذ مايلي:

a- احسب السويات الطاقية من أجل :

$$n = 1, 2, 3, 4, 5$$

وذلك من أجل $L = 0.43 \text{ nm}$ و من أجل $m = m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$.

و أوجد الفروقات بين هذه السويات الطاقية.

b- كرر الحساب في (a) من أجل $L = 0.010 \text{ m}$ و $m = 0.010 \text{ Kg}$

ماذا تستنتج؟

c- ارسم التتابع الموجية $\psi_n(x)$ و $|\psi_n(x)|^2$ من أجل :

$$n = 1, 2, 3, 4, 5$$

d- ما هو احتمال وجود الجسيمة في النقاط :

$$x = L/4, L/2$$

e- لدينا من أجل بئر كموني لا نهائي :

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{2}{L} \right) \int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) x^2 dx$$

$$\langle x^2 \rangle = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right)$$

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2}{L} \right) \int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) x dx$$

$$\langle x \rangle = \frac{L}{2}$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - [\langle x \rangle]^2$$

$$= L^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right)$$

و بشكل مشابه نجد أن :

$$(\Delta p_x)^2 = \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2$$

$$\Delta p_x = \frac{n\pi\hbar}{L}$$

$$\Delta x \Delta p_x = \hbar \left(\frac{n^2 \pi^2}{12} - \frac{1}{2} \right)$$

و :

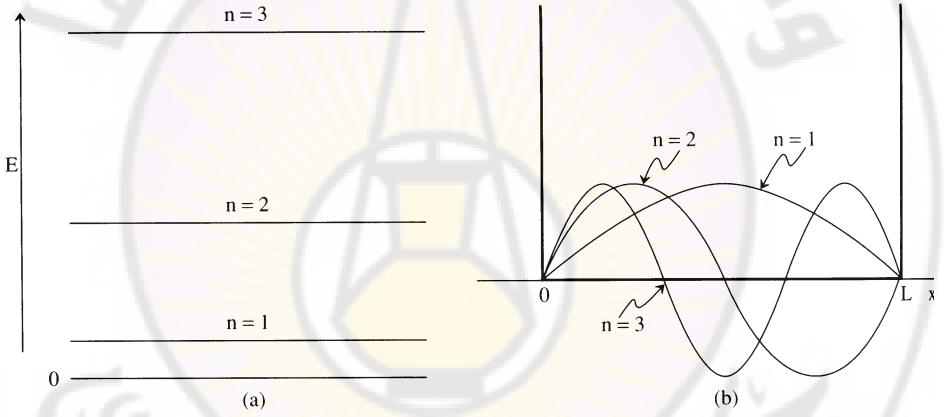
تحقق من العلاقات السابقة.

$$n = 1, 2, 3, 4, 5$$

احسب المقدار : $\Delta x \Delta p$ من أجل:

هل تتوافق النتيجة التي تحصل عليها مع مبدأ الشك لهايزنبرغ؟

شكل 1. السويات الطاقية و التوابع الموجية الموافقة لها



- عمم المسألة السابقة على حالة بئر ثلاثي الأبعاد.

2- الهزاز التوافقي في بعد واحد:

يعطى تابع هاميلتون من أجل هزاز توافقي بالشكل:

$$H = -\frac{h^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) + \frac{1}{2} kx^2$$

و معادلة شرودنجر في هذه الحالة

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) + \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi = E \psi$$

و يمكن أن تكتب على الشكل:

$$(1) \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\alpha - \beta^2 x^2) \psi = 0$$

$$\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

حيث:

$$\beta = \left(\frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

و

حل هذه المعادلة يأخذ شكل التابع الموجي المنظم :

$$(2) \psi_v(x) = \left[\frac{(\beta/\pi)^{1/2}}{2^v v!} \right]^{1/2} \cdot H_v(\beta^{1/2} x) \exp(-\beta x^2 / 2)$$

حيث $H_v(x)$ هي كثيرات حدود هرميت و المعطاة في الجدول (1). و تعطى طاقة الهزاز التوافقي بالعلاقة:

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_o$$

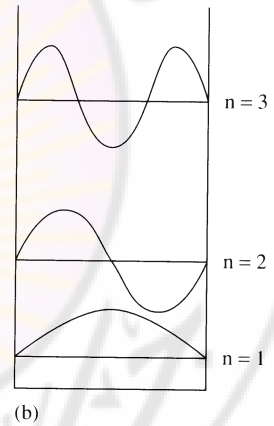
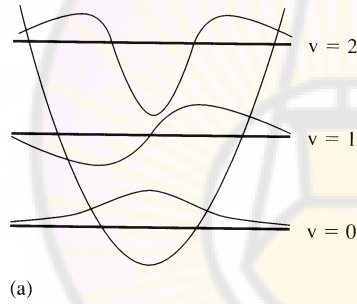
$$\omega_o = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

حيث

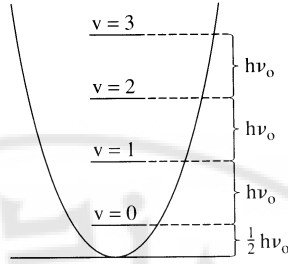
جدول (1) بعض كثيرات حدود هرميت

TABLE 16.1 Hermite polynomials H_v^*

v	$H_v(\beta^{1/2}x)$
0	1
1	$2(\beta^{1/2}x)$
2	$4(\beta^{1/2}x)^2 - 2$
3	$8(\beta^{1/2}x)^3 - 12(\beta^{1/2}x)$
4	$16(\beta^{1/2}x)^4 - 48(\beta^{1/2}x)^2 + 12$



شكل 2. مقارنة بين التوابع الموجية لهزاز توافقي مع التوابع الموجية لجسيمة في صندوق



شكل 3. السويات الطاقية لهزاز توافقي

- a- تحقق من أن العلاقة (2) هي حل للمعادلة (1) و ذلك بتعويض الحل بشكل مباشر. استفد من قدرات Mathcad في الحسابات التحليلية Symbolic.
- b- احسب طاقة السويات $v=1,2,3$ للهزاز التوافقي و احسب الفرق بينهما و ذلك من أجل قيم تختارها أنت ل m و k .
- c- اكتب التوابع الموجية للهزاز التوافقي و المقابلة ل: $v=1,2,3$.
- d- ارسم التوابع الموجية التي أوجدتها سابقا.

3 - نموذج بور لذرة الهيدروجين:

تعطى السويات الطاقية لذرة الهيدروجين بحسب نموذج بور بالعلاقة:

$$E_n = -\frac{e^4 \cdot m_e^2}{8 \cdot \epsilon_o^2 \cdot h^2 \cdot n^2}$$

و نصف القطر بالعلاقة:

$$r_n = \frac{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_o}{e^2 \cdot m_e} \cdot \left(\frac{n \cdot h}{2 \cdot \pi} \right)^2$$

$$\epsilon_o = 8.38 \times 10^{-12}$$

حيث :

- احسب السويات الطاقية من أجل: $n=1,2,3,4,5$

- احسب نصف القطر من أجل : $n = 1, 2, 3, 4, 5$

- احسب $E_2 - E_1$ و $E_3 - E_1$ و $E_3 - E_2$.

4- حل معادلة شرودنجر لذرة الهيدروجين:

ذرة الهيدروجين تحتوي على الكترون وبروتون أي لدينا تابع هاميلتون من الشكل:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r^2}$$

و يأخذ التابع الموجي القطري لهذه المسألة الشكل:

$$R_{nl}(\rho) = - \sqrt{\left(\frac{2}{n.a_o}\right) \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} . e^{-\rho/2} . \rho^l . L_{n+1}^{2l+1}(\rho)$$

$$a_o = \frac{\hbar^2}{\mu.e^2} \quad \text{و} \quad \rho = \frac{r}{a_o} \quad \text{حيث:}$$

$$E_1 = \frac{\mu.e^4}{2.\hbar^2} \quad \text{و} \quad \mu = m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$$

- احسب الكتلة المختزلة μ و a_o و E_1 .

- اكتب التوابع الموجية و قارن مع النتائج المعطاة، من أجل الحالات التالية :

$$n=1, \quad l=0$$

$$n=2, \quad l=0$$

$$n=2, \quad l=1$$

$$n=3, \quad l=0$$

$$n=3, \quad l=1$$

$$n=3, \quad l=2$$

التوابع الموجية القطرية لذرة الهيدروجين

$$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20}(r) = 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{30}(r) = 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right] e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} \left(1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/3a_0}$$

- ارسم المقدار: $r\psi(r)$ و $|r\psi(r)|^2$ و قارن مع الأشكال المعطاة، من أجل:

$$n=1, \quad l=0$$

$$n=2, \quad l=0$$

$$n=2, \quad l=1$$

$$n=3, \quad l=0$$

$$n=3, \quad l=1$$

$$n=3, \quad l=2$$

كما تعطى القيم المتوقعة بالعلاقة:

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr \, r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2$$

و بعض هذه القيم المتوقعة تعطى بالعلاقات:

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l + 1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l + 1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

- أوجد القيم العددية للقيم المتوقعة المعطاة في العلاقات السابقة و ذلك من أجل:

$$n=1, \quad l=0$$

$$n=2, \quad l=0$$

$$n=2, \quad l=1$$

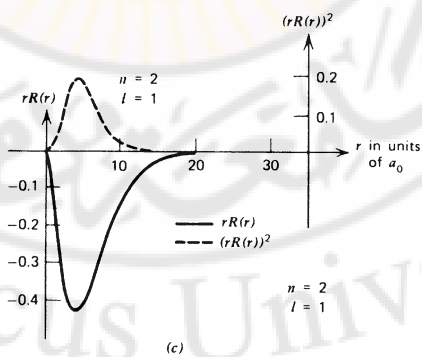
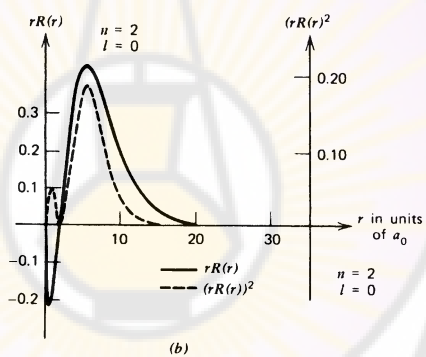
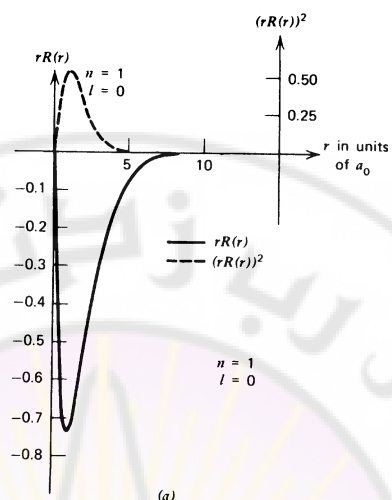
$$n=3, \quad l=0$$

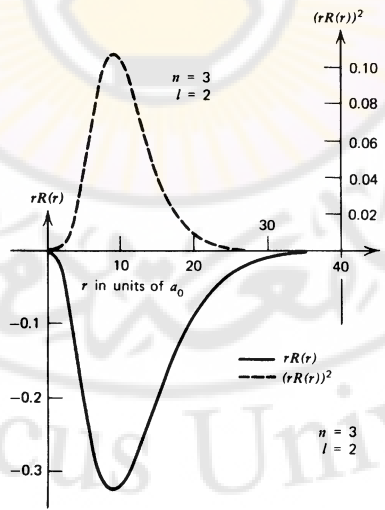
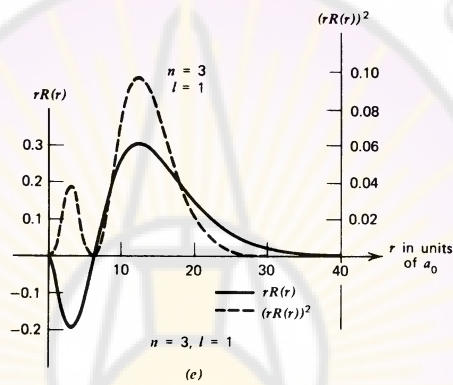
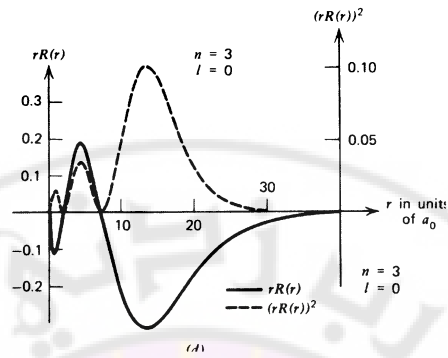
$$n=3, \quad l=1$$

$$n=3, \quad l=2$$

و ضع النتائج في جدول.

الأشكال التالية تعطي رسم التوابع الموجية لذرة الهيدروجين.





(f)







ملحق 1

الفروقات بين الفورتران و لغة الباسكال

Differences between Fortran 77 and Pascal:

- Fortran doesn't use assignments with := or end of statements with ;
- Fortran doesn't have reserved words, it has short identifiers, the identifiers do not have to be specified
- Fortran does not have records, pointers, user-defined types, scalar types, subintervals, but it has COMPLEX and DOUBLE PRECISION
- Fortran 77 does not have WHILE and REPEAT
- Fortran did not get IF THEN ELSE ENDIF until 1978
- A bad CASE in Fortran 77. Fortran 77 is not able to nest functions and subroutines and does not permit recursive calls
- Fortran has very good input and output, but those facilities are very difficult to learn
- Fortran has separate compilation
- Fortran manages national characters in comments and output
- Blanks are not significant (except now in the fixed form of Fortran 90)
- Mixing of integers and floating-point numbers is implemented differently
- Arrays in Fortran 77 have to be assigned values using an explicit loop

- Fortran programs are usually less well structured than Pascal programs
- Argument association is different
- Common data are treated differently



ملحق 2

ملخص بالتعليمات الأساسية في الفورتران

Introduction

Those statements we do not recommend have been indicated with the question mark "?" and in serious cases even with two question marks "??".

Specification of program units:

PROGRAM - main program

FUNCTION - function, FUNCTION can be preceded by some of the specifications of the variables below, except IMPLICIT

SUBROUTINE - subroutine

??ENTRY - extra entry in subprograms

? BLOCK DATA - common data, usually given initial values

Specification of variables:

IMPLICIT - default IMPLICIT REAL(A-H, O-Z), INTEGER(I-N)

IMPLICIT NONE - not standard, but very useful, it is available in Fortran 90. Gives the "Pascal convention" that all variables have to be specified. For Sun and DEC the same effect can be obtained

with the switch -u in the compilation command

INTEGER
REAL
DOUBLE PRECISION
COMPLEX
LOGICAL
CHARACTER CHARACTER*4

Additional specifications:

DIMENSION - can also be given directly in the type specification,
as well as in a COMMON

? COMMON - common storage area for variables that are in several program units

??EQUIVALENCE - common storage area for several variables in the
same program unit

PARAMETER - makes a variable into a constant with a certain value

EXTERNAL - tells the system that the identifier is an external function or an external subroutine

INTRINSIC - tells the system that the identifier is an intrinsic function (or a subroutine, only in Fortran 90)

SAVE - saves the values between exit or return from one subroutine into the new call of the same subroutine or function

DATA - puts initial values into variables

Executable GOTO statements:

GOTO snr1 - ordinary GOTO statement (jumps to the statement with number snr1)

? GOTO (snr1, snr2, snr3), integer_expression
- conditional GOTO statement. If the integer expression is 1, 2 or 3, execution jumps to statement number snr1, snr2 or snr3 (an arbitrary number of statement numbers snr are permitted).

??GOTO statement_number_variable, (snr1, snr2, snr3)
- an assigned GOTO statement, jumps to the statement number that equals the statement number variable (an arbitrary number of statement numbers snr are permitted).

??GOTO statement_number_variable
- this is an assigned ordinary GOTO statement, it is a combination of the first one, GOTO snr1, and previous one, GOTO statement_number_variable

without
a list of permitted alternatives.

??ASSIGN statement_number TO statement_number_variable
- statement number variables can not be assigned with an ordinary assignment of the type (integer variable = integer expression), it has to be done with the ASSIGN statement. The statement number variable can then be used for an assigned GOTO statement and in the ordinary GOTO statement and also in connection with FORMAT.

? IF (numerical_expression) snr1, snr2, snr3
- arithmetical IF-statement, jumps to statement number snr1 if the expression is negative,

snr2 if the expression is zero,
snr3 if the expression is positive

Other executable statements:

IF(logical_expression) statement

- conditional statement: if the logical expression is true, the statement is performed, in the other case execution jumps directly to the next statement. The statement here is permitted to be an ordinary assignment statement or an ordinary jump statement (GOTO statement) or a call of a subroutine.

IF(logical_expression) THEN ! Complete alternative statement.

...statements... ! Variants without the ELSE-part as well

ELSE ! as with nested ELSE, or with

...statements... ! ELSE replaced by

ENDIF ! ELSE IF (log_expr) THEN

! also exist.

CONTINUE - continuation, does nothing. It is recommended for

clean conclusion of a DO-loop.

STOP - concluding statement, stops execution.

END - concluding statement, stops compilation of the program unit and also execution if it is in the main program.

If END is found during execution of a subprogram, an automatic return to the calling program unit is executed (replaces the explicit RETURN statement).

? PAUSE - pause statement, stops execution temporarily (implementation dependent).

DO statement_number variable = var1, var2, var3

- DO-loop.

Floating-point numbers are permitted as variables in the DO-loop, but they are not recommended.

It is preferable to use integers.

Input/output statements:

OPEN - open a file before the program can use it.

CLOSE - close a file. A file that has not been closed can usually not be read.

READ - input

WRITE - output

PRINT - previously output to line printer, now a synonym to WRITE. It works on a standard unit.

INQUIRE - inquires about file status.

REWIND - rewinds a file to the beginning.

BACKSPACE - rewinds a file one record.

ENDFILE - marks end of file.

FORMAT - Fortran speciality (see below).

Call statements:

CALL sbtrtn - call a subroutine sbtrtn.

fnctn - a function is called by giving the function name fnctn.

RETURN - return from the subprogram (subroutine or function).

FORMAT-letters:

	Example	Comments
Integer	I 15	5 positions reserved
Floating-point number	F 8.3	8 positions, out of which 3 are used for the fractional part

- E E14.6 14 positions of which
 6 are used for the decimals
 4 - for the exponent
 1 - for the sign
 1 - for the starting zero
 1 - for the decimal point
 1 - for a blank character
- D D20.12 as E, but for double precision
- G G14.6 as F, if the number can be given
 within the field, else as E

Complex numbers as a pair of floating-point variables

Logical L L1
 Character A A7 7 characters are available in A7
 string

'' 'Example' Conventional character constant
 nH 7HExample Hollerith constant (obsolete)
 Positioning Tn n positions from the left
 TLn n positions towards left
 TRn n positions towards right
 nX n positions towards right

No new line \$ this is used if you wish to
 do input in direct connection
 with an output, to stay on
 the same line. Not standard!
 Not Fortran 90!

Discontinue : if the list does not contain
 any more elements the
 format is also finished here

New record / normally a new line

Binary B not Fortran 77 but Fortran 90
 Octal O not Fortran 77 but Fortran 90
 Hexadecimal Z not Fortran 77 but Fortran 90

Output SP + is written

SS + is not written
 S standard (normal SS)
 In all alternatives a minus - is written for negative values

Input BZ blanks are interpreted as zeroes
 BN blanks are not regarded as anything (blanks are skipped)

BN is standard using the ULTRIX, when punched cards were used,
 BZ was the standard. Compare with BLANK = "ZERO" and Blank = "NULL" in the OPEN-statement.

Scaling factor kP:

Input: with an exponent, no action.
 Without exponent, the number is multiplied by $10^{**(-k)}$ before assignment, which means a change of the value.

Output: with exponent, the mantissa is multiplied by 10^{**k} and the exponent is reduced with k, which means no change of the value.
 Without exponent, the number is multiplied by 10^{**k} before the output, which means a change of value.

NB! S, SP, SS, BN, BZ and kP are valid until the end of the FORMAT or until a new one of the same kind appears. To scale with kP is good with E-format on output, because then you avoid that the first digit is zero, and you get more information into less space on the paper. To scale with kP is catastrophic using F-format, but it was of great interest when punched cards were still in use.

A very good and complete description of input and output in Fortran, including the use of the FORMAT-letters, is given in the book by Adams et al (1992).



ملحق 3

حلول تمارين الفورتران

(1) Using fixed form it means LOGICAL L, i.e. the variable L is specified as logical. Using free form you will get a syntax error.

(2) REAL, PARAMETER :: K = 0.75

(3) INTEGER, DIMENSION(3,4) :: PELLE

(4)

INTEGER, PARAMETER :: DP =
SELECTED_REAL_KIND(15,99)

(5) REAL (KIND=DP) :: E, PI

(6)

REAL (KIND=DP), PARAMETER :: E = 2.718281828459045_DP,
PI = 3.141592653589793_DP

(7) No, it is not correct since a comma is missing between REAL and DIMENSION. In the form it has been written, the statement is interpreted as a specification of the old type of the floating-point matrix DIMENSION (with the specified dimensions), and an implicit specification of the new type of a scalar floating-point number AA. Formally, it is a correct specification. The variable name DIMENSION is permitted in Fortran 90, just as the variable name REAL is permitted in both Fortran 77 and Fortran 90, but both should be avoided. The variable name DIMENSION is of course too long in standard Fortran 77.

(8) Yes, it is correct, but it is not suitable since it kills the intrinsic function REAL for explicit conversion of a variable of another type to the type REAL. It is however nothing that prevents you from using a variable of the type REAL with the name REAL, since Fortran does not have reserved words.

(9) No, it is not correct, at COMMON you do not use the double colon at the specification. The correct specification is the old familiar one: COMMON A

(10) Variables A and B are assigned the specified values, but the whole rest of the line becomes a comment.

(11) No, on the second row the blank space after the ampersand (&) is not permitted. It interrupts the identifier ATAN into two identifiers AT and AN. If the blank is removed the two lines become correct. Free form is assumed, since & is not a continuation character in fixed form.

(12) The statement is not permitted, but might not be detected until execution time. You can instead write

```
WRITE(*,*) ' HI '
```

or

```
WRITE(*,'(A)') ' HI '
```

which both write out the text HI on the standard unit for output. If you wish to give the text, which you wish to print, directly where the output format is to be given, this can be done with either apostrophe editing as

```
WRITE(*, '(' HI ')')
```

or with the obsolescent Hollerith editing

```
WRITE(*, '(4H HI )')
```

(13) They write large and small numbers with an integer digit, six decimals and an exponent, while numbers in between are written in the natural way. In this case we thus get

1.000000E-03

1.00000

1.000000E+06

Numbers from 0.1 to 100 000 are written in the natural way and with six significant digits.

(14)

```
SELECT CASE (N)
CASE(-1)
    ! Case 1
CASE(0)
    ! Case 2
CASE(3,5,7,11,13)
    ! Case 3
END SELECT
```

(15)

```
SUMMA = 0.0
DO I = 1, 100
    IF ( X(I) == 0.0) EXIT
    IF ( X(I) < 0.0) CYCLE
    SUMMA = SUMMA + SQRT (X(I))
END DO
```

The English word sum is not suited as the variable name in this case, since this is also an intrinsic function. Summa is the Swedish word for sum.



ملحق 4

البرنامج التالي ينفذ طريقة أصغر المربعات:

```
c-----
c      Program
c      Computational Physics class
c      Damascus University - Physics department
c      -----
c      student Name :
c      Date:
c      -----
c      Least square method
c-----
-----
c THIS PROGRAM IS USED IN FITTING A POLYNOMIAL TO A
c SET OF
c DATA THE PROGRAM READS IN N PAIRS OF X AND Y
c VALUES AND
c COMPUTES THE COEFFICIENTS OF THE NORMAL
c EQUATIONS FOR
c THE LEAST-SQUARES METHOD.
c-----
-----
c PARAMETERS ARE :
c X, Y - ARRAY OF X AND Y VALUES
c N    - NUMBER OF DATA PAIRS
c MS, MF - THE RANGE OF DEGREE OF POLYNOMIALS TO
c BE
c COMPUTED
c      THE MAXIMUM DEGREE IS 9.
c A    - AUGMENTED ARRAY OF THE COEFFICIENTS OF THE
c NORMAL
```

c EQUATIONS

c C - ARRAY OF COEFFICIENTS OF THE LEAST-SQUARES

c POLYNOMIALS.

C-----

REAL*8 X(100),Y(100),C(100),A(10,11),XN(100),SUM
BETA

INTEGER

N,MS,MF,MFP1,MFP2,I,J,IM1,IPT,ICOEF,JCOEF

C READ IN N, THEN THE X AND Y VALUES.

C READ *, N, (X(I),Y(I), I = 1,N)

DATA N/11/

DATA X/0.05,0.11,0.15,0.31,0.46,0.52,0.7,0.74,0.82

* 0.98,1.17,89*0.0/

DATA Y/0.956, 0.89, 0.832, 0.717, 0.571, 0.539, 0.378

* 0.37, 0.306, 0.242, 0.104, 89*0.0/

c READ IN MS,MF. THE PROGRAM WILL FIND
COEFFICIENTS FOR

c EACH

c DEGREE OF POLYNOMIAL FROM DEGREE MS TO
DEGREE MF.

C READ *, MS,MF

DATA MS,MF/1,7/

C COMPUTE MATRIX OF COEFFICIENTS AND R.H.S. FOR
MF

C DEGREE

C HOWEVER, FIRST CHECK TO SEE IF MAX DEGREE
REQUESTED

c IS TOO LARGE. IT CANNOT EXCEED N-I. IF IT DOES,
REDUCE TO c EQUAL N-I AND PRINT MESSAGE.

IF (MF.GT. (N-I)) THEN

MF = N - 1

PRINT 200, MF

END IF

5 MFP1 = MF + 1

MFP2 = MF + 2

```

C-----
C
C
C-----
      do 10 I=1,N
        XN(I)=1.0
10  continue
C-----
DO 30 I = 1,MFP1
  A(I,1) = 0.0
  A(I,MFP2) = 0.0
  DO 20 J = 1,N
    A(I,1) = A(I,1) + XN(J)
    A(I,MFP2) = A(I,MFP2) +Y(J)*XN(J)
    XN(J) = XN(J) * X(J)
  20  CONTINUE
  30  CONTINUE
C    COMPUTE THE LAST ROW OF A.
C    I MOVES ACROSS THE COLUMNS,
C    J SUMS OVER THE N VALUES.
  DO 50 I = 2,MFP1
    A(MFP1,I) =0.0
    DO 40 J = 1,N
      A(MFP1,I) = A(MFP1,I) + XN(J)
      XN(J) = XN(J) * X(J)
    40  CONTINUE
  50  CONTINUE

      DO 70 J = 2.MFP1
        DO 60 I = 1,MF
          A(I,J) = A(I+1,J-1)
        60  CONTINUE
      70  CONTINUE

      PRINT '(///)'
      PRINT *, '      THE NORMAL MATRIX IS: '
      PRINT ' (/)'

```

```

      PRINT 201, ((A(I,J), J=1,MFP2), I=1,MFP1)
      PRINT '(/) '
C    NOW CALL A SUBROUTINE TO SOLVE THE SYSTEM. DO
THIS FOR c    EACH DEGREE FROM MS TO MF. GET THE
LU DECOMPOSITION
C    OF A.

      CALL LUDCMQ(A,MFP1,10)
C RESET THE R.H.S. INTO C. WE NEED TO DO THIS FOR
EACH
C DEGREE
      MSP1 = MS + 1
      DO 95 I = MSP1,MFP1
        DO 90 J = 1,1
          C(J) = A(J,MFP2)
90    CONTINUE
        CALL SOLNQ(A,C,I,10)
        IM1 = I - 1
C NOW WRITE OUT THE COEFFICIENTS OF THE LEAST-
SQUARES
c POLYNOMIAL.
C
      PRINT 202, IM1, ( C(J), J=1,I)
C COMPUTE AND PRINT THE VALUE OF BETA = SUM OF
DEV
C SQUARED DIVIDED BY ( N - M - 1 ).
      BETA =0.0
      DO 94 IPT = 1,N
        SUM =0.0
        DO 93 ICOEF =2,1
          JCOEF = I - ICOEF + 2
          SUM = ( SUM + C (JCOEF) ) * X(IPT)
93    CONTINUE
        SUM = SUM + C(I)
        BETA = BETA + ( Y(IPT) - SUM )**2
94    CONTINUE
      BETA = BETA / (N - I)

```

```

        PRINT 203, BETA
95      CONTINUE
200     FORMAT(// ' DEGREE OF POLYNOMIAL CANNOT
EXCEED N - 1.',/
        + ' REQUESTED MAXIMUM DEGREE TOO LARGE -
        ',
        + ' REDUCED TO ',13)
201     FORMAT(1X,9F8.2)
202     FORMAT(' FOR DEGREE OF ',12,' COEFFICIENTS
ARE'//
        + ' ',5X,11F9.3)
203     FORMAT(9X,' BETA IS ',F10.5//)
        STOP
        END

C
        SUBROUTINE LUDCMQ(A,N,NDIM)
C      SUBROUTINE LUDCMQ :
C THIS SUBROUTINE FORMS THE LU EQUIVALENT OF THE
C SQUARE
C COEFFICIENT MATRIX A. THE LU IS RETURNED IN THE A
C MATRIX SPACE. THE UPPER TRIANGULAR MATRIX U HAS
C ONES
C ON ITS DIAGONAL - THESE VALUES ARE NOT INCLUDED
C IN
C THE RESULT.
        REAL*8 A(NDIM,NDIM),SUM
        INTEGER N,NDIM,I,J,JM1,IM1,K
        DO 30 I = 1,N
        DO 30 J = 2,N
        SUM =0.0
        IF ( J .LE. I ) THEN
        JM1 = J - 1
        DO 10 K = 1,JM1
        SUM = SUM + A(I,K)*A(K,J)
10      CONTINUE
        A(I,J) = A(I,J) - SUM
        ELSE

```



```

        IM1 = I - 1
        IF ( IM1 .NE. 0 ) THEN
            DO 20 K = 1, IM1
                SUM = SUM + A(I,K)*A(K,J)
20          CONTINUE
            END IF
        C TEST FOR SMALL VALUE ON THE DIAGONAL

25      IF ( ABS(A(I,I)) .LT. 1.0E-10 ) THEN
            PRINT 100, I
            RETURN
        ELSE
            A(I,J) = ( A(I,J) - SUM ) / A(I,I)
        END IF
    END IF
30  CONTINUE
    RETURN
    FORMAT('reduction not completed because small value',
+         'found in divisor in row ', 3I)
    END
    SUBROUTINE SOLNQ(A,B,N,NDIM)

```

C SUBROUTINE SOLNQ :
 C THIS SUBROUTINE FINDS THE SOLUTION TO A SET OF N
 C LINEAR
 C EQUATIONS THAT CORRESPONDS TO THE RIGHT-HAND
 C SIDE
 C VECTOR B. THE A MATRIX IS THE LU DECOMPOSITION
 C EQUIVALENT TO THE COEFFICIENT MATRIX OF THE
 c ORIGINAL EQUATIONS, AS PRODUCED BY LUDCMQ. THE
 c SOLUTION VECTOR IS RETURNED IN THE B VECTOR.

```

        REAL*8 A(NDIM,NDIM),B(NDIM),SUM
        INTEGER N,NDIM,I,IM1,K,J,NMJP1,NMJP2
    
```

```

C DO THE REDUCTION STEP
B(I) = B(I) / A(I,I)
    
```

```

DO 20 I = 2,N
    IM1 = I - 1
    SUM =0.0
    DO 10 K = 1.IM1
        SUM = SUM + A(I,K)*B(K)
10  CONTINUE
    B(I) = ( B(I) - SUM ) / A(I,I)
20  CONTINUE

```

C-----

```

    Do 40 J=2,N
        NMJP2=N-J+2
        NMJP1=N-J+1
        SUM=0.0
        Do 30 K=NMJP2,N
            SUM=SUM+A(NMJP1,K)*B(K)
30  continue
        B(NMJP1)=B(NMJP1)-SUM
40  continue
    RETURN
    END

```



ملحق 5

طرق عددية من أجل المعادلات التفاضلية العادية

نبين فيما يلي بعض طرق حل المعادلات التفاضلية العادية ذات القيم الابتدائية و التي تأخذ الشكل:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(x, t) \\ x(t_o) = x_o \end{cases}$$

تستخدم طرق حل هذه المعادلات شبكة من الشكل:

$$t_n = t_o + n.h$$

حيث h بعد هذه الشبكة.

طرق من المرتبة الأول

First order methods

طريقة أولر من المرتبة الأولى:

$$x(t+h) = x(t) + h.f(x(t), t)$$

أو باتجاه عكسي:

$$x(t+h) = x(t) + h.f(x(t+h), t+h)$$

طرق المرتبة الثانية

Second order method

قاعدة النقطة المنصفة Mid point rule

$$\begin{cases} x^* = x(t) + \frac{h}{2} \cdot f(x(t), t) \\ x(t+h) = x(t) + h \cdot f\left(x^*, t + \frac{h}{2}\right) \end{cases}$$

قاعدة شبه المنحرف:

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

طريقة هيون Heun's Method

$$\begin{cases} x^* = x(t) + h \cdot f(x(t), t) \\ x(t+h) = x(t) + \frac{h}{2} \cdot \{f(x(t), t) + f(x^*, t+h)\} \end{cases}$$

طرق من مرتبة أعلى

Single-stage high order methods

طريقة رنج-كوتا من المرتبة الرابعة:

$$x(t+h) = x(t) + \frac{1}{6} [F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4]$$

$$F_1 = h.f(x, t), \quad F_2 = h.f\left(x + \frac{F_1}{2}, t + \frac{h}{2}\right)$$

$$F_3 = h.f\left(x + \frac{F_2}{2}, t + \frac{h}{2}\right) \quad F_4 = h.f(x + F_3, t + h)$$

طرق متعددة الخطوات

Multi-step High order methods

Adam-Bashforth two step method

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot \left(\frac{3}{2} f(x(t), t) - \frac{1}{2} f(x(t-h), t-h) \right)$$

Adam-Bashforth three step method

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot \left(\frac{23}{12} f(x(t), t) - \frac{4}{3} f(x(t-h), t-h) + \frac{5}{12} f(x(t-2h), t-2h) \right)$$

Adam-Bashforth four step method

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot \left(\frac{55}{24} f(x(t), t) - \frac{59}{24} f(x(t-h), t-h) + \frac{37}{24} f(x(t-2h), t-2h) - \frac{9}{24} f(x(t-3h), t-3h) \right)$$

Millen's Method:

$$x(t+h) = x(t-3h) + h \cdot \left(\frac{8}{3} f(x(t), t) - \frac{4}{3} f(x(t-h), t-h) + \frac{8}{3} f(x(t-2h), t-2h) \right)$$

Adam-Moulton two step method

$$x(t+h) = x(t) + h \cdot \left(\frac{5}{2} f(x(t+h), t+h) + \frac{2}{3} f(x(t), t) - \frac{1}{12} f(x(t-h), t-h) \right)$$

Adam-Moulton three step method

$$x(t+h) = x(t) + h \left(\frac{3}{8} f(x(t+h), t+h) + \frac{19}{24} f(x(t), t) - \frac{5}{24} f(x(t-h), t-h) + \frac{1}{24} f(x(t-2h), t-3h) \right)$$

طرق خاصة بالمعادلات التفاضلية الجزئية
طريقة العناصر المحدودة مطبقة على معادلة بواسون

المعادلة التالية هي معادلة بواسون

$$\nabla^2 u = f$$

و الشروط الحدية:

$$u(x, y) = g(x, y), \quad \text{for } x = a, b \quad \text{or} \quad y = c, d$$

و تتم الحسابات على الشبكة:

$$x_i = a + i\Delta x \quad \text{for } i = 0, 1, \dots, n$$

$$y_j = a + j\Delta y \quad \text{for } j = 0, 1, \dots, m$$

حيث

$$\Delta x = (b - a) / n$$

$$\Delta y = (d - c) / m$$

معادلة الفروقات من المرتبة الثانية

$$(D_x^2 + D_y^2)u(x_i, y_j) = f(x_i, y_j)$$

$$D_x^2 u(x_i, y_j) = \frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i-1}, y_j))}{\Delta x^2}$$

$$D_y^2 u(x_i, y_j) = \frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1}))}{\Delta y^2}$$

و الشروط الحدية تعطى بالعلاقات الحسابية:

$$u(x_o, y_o) = g(a, y_j), \quad u(x_n, y_j) = g(b, y_j) \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, m$$

$$u(x_i, y_o) = g(x_i, c), \quad u(x_i, y_m) = g(x_i, d) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n$$

طريقة العناصر المحدودة مطبقة على معادلة انتشار الحرارة

معادلة انتشار الحرارة تعطى بالشكل:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u$$

و الشروط الحدية:

$$u(x, y, t) = g(x, y) \quad \text{for } x = a, b \quad \text{or} \quad y = c, d$$

و الشروط الابتدائية:

$$u(x, y, 0) = u_o(x, y)$$

و الشبكة التي تتم الحسابات باستخدامها:

$$x_i = a + i\Delta x \quad \text{for } i = 0, 1, \dots, n$$

$$y_j = c + j\Delta y \quad \text{for } j = 0, 1, \dots, m$$

$$t_k = k\Delta t \quad \text{for } k = 0, 1, \dots,$$

حيث

$$\Delta x = (b - a) / n$$

$$\Delta y = (d - c) / m$$

و الشروط الحدية:

$$u(x_0, y_j) = g(a, y_j), u(x_n, y_j) = g(b, y_j) \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, m$$

$$u(x_i, y_0) = g(x_i, c), u(x_i, y_m) = g(x_i, d) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n$$

و الشروط الابتدائية:

$$u(x_i, y_j, 0) = u_0(x_i, y_j) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, \dots, m$$

طريقة أولر لحل المعادلة:

$$u(x_i, y_j, t_{k+1}) = u(x_i, y_j, t_k) + \Delta t(D_x^2 + D_y^2)u(x_i, y_j, t_k)$$

$$\frac{2\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{2\Delta t}{\Delta y^2} \leq 1$$

طريقة أولر باتجاه عكسي

$$u(x_i, y_j, t_{k+1}) = u(x_i, y_j, t_k) + \Delta t(D_x^2 + D_y^2)u(x_i, y_j, t_{k+1})$$

طريقة كرانك-نيكلسون

$$u(x_i, y_j, t_{k+1}) = u(x_i, y_j, t_k) + \Delta t(D_x^2 + D_y^2)\{u(x_i, y_j, t_k) + u(x_i, y_j, t_{k+1})\}/2$$

طريقة العناصر المحدودة مطبقة على معادلة الموجة

تأخذ معادلة الموجة الشكل:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = A^2 \nabla^2 u$$

الشروط الحدية:

$$u(x, y, t) = g(x, y) \quad \text{for } x = a, b \text{ or } y = c, d$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y), \quad \frac{\partial u}{\partial t} u(x, y, 0) = u_1(x, y)$$

الشروط الابتدائية

$$x_i = a + i\Delta x \quad \text{for } i = 0, 1, \dots, n$$

$$y_j = c + j\Delta y \quad \text{for } j = 0, 1, \dots, m$$

$$t_k = k\Delta t \quad \text{for } k = -1, 0, 1, \dots$$

تقريب الفروقات المحدودة من المرتبة الثانية:

$$u(x_i, y_j, t_{k+1}) = 2u(x_i, y_j, t_k) - u(x_i, y_j, t_{k-1}) + \Delta t^2 A^2 (D_x^2 + D_y^2) u(x_i, y_j, t_k)$$

الشروط الحدية المستخدمة في الحسابات:

$$u(x_0, y_j) = g(a, y_j), \quad u(x_n, y_j) = g(b, y_j) \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, m$$

$$u(x_i, y_0) = g(x_i, c), \quad u(x_i, y_m) = g(x_i, d) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n$$

الشروط الابتدائية المستخدمة في الحسابات:

$$u(x_i, y_j, t_0) = u_0(x_i, y_j) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, \dots, m$$

$$u(x_i, y_j, t_{-1}) = u_0(x_i, y_j) + \Delta t^2 u_1(x_i, y_j) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, \dots, m$$

شرط الاستقرار

$$\Delta t \leq A \min(\Delta x, \Delta y)$$

طرق حل جمل المعادلات الخطية

طريقة تكرار من أجل حل معادلة بواسون

تقريب الفروقات المحدودة لمعادلة بواسون:

$$\begin{cases} u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} = f_{i,j} & \text{for } i, j = 1, 2, \dots, n-1 \\ u_{0,j} = u_{n,j} = 0 & \text{for } j = 1, 2, \dots, n-1 \\ u_{i,0} = u_{i,n} = 0 & \text{for } i = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

ثلاث طرق تكرارية لحل معادلة بواسون:

طريقة جاكوبي

$$u_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k - f_{i,j})$$

طريقة غاوص-سيدل:

$$u_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{4}(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^{k+1} + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^{k+1} - f_{i,j})$$

طريقة الأسترخاء المتتالي:

$$\begin{cases} u_{i,j}^* = \frac{1}{4}(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k + u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k - f_{i,j}) \\ u_{i,j}^{k+1} = (1 - \omega)u_{i,j}^k + \omega u_{i,j}^* \end{cases}$$

طريقة تكرار من أجل جمل من المعادلات

ليكن لدينا جملة خطية

$$Ax = b$$

حيث A مصفوفة $(n \times n)$ ، نقسم المصفوفة A كالتالي:

$$A = D - L - U$$

حيث $D = \text{diag}(A)$ هو الجزء المثلثي الأدنى من المصفوفة مضروب بإشارة سالب، و U هو الجزء المثلثي الأعلى من المصفوفة مضروب بإشارة سالب.

يمكن حل جملة المعادلات بأحد الطرق الأربعة:

طريقة ريتشاردسون:

$$x^{k+1} = (I - A)x^k + b$$

طريقة جاكوبي:

$$D.x^{k+1} = (L + U)x^k + b$$

طريقة غاوص-سيدل

$$(D - L)x^{k+1} = Ux^k + b$$

طريقة الاسترخاء المتتالي:

$$(D - \omega L)x^{k+1} = \omega(Ux^k + b) + (1 - \omega)Dx^k$$



ملحق 6

تحويلات فورييه

البرنامج التالي بلغة الفورتران ينفذ تحويل فورييه السريع:

```
c-----  
c      Program 17  
c      Computational Physics class  
c      Damascus University - Physics department  
c      -----  
c      student Name :  
c      Date:  
c      -----  
c      -----  
c      Just a program to check FFT.  
c  
c      Complex*16 a(8)  
c      Integer i, k, inv, N  
c      k = 3  
c      N = 2**k  
c      DO i = 1, N  
c         a(i) = 0  
c      END DO  
c      a(3) = 1  
c      inv = 0  
c      call FFT( a, k, inv )  
c      write(*,*)a  
c      end
```

Subroutine FFT(A,m,INV)

```
C-----
C This subroutine performs the Fast Fourier Transform by
C the method of Cooley and Tukey --- the FORTRAN code
C was
C adapted from
C Cooley, Lewis, and Welch, IEEE Transactions E-12
C
C The array A contains the complex data to be transformed,
C 'm' is log2(N), and INV is an index = 1 if the inverse
C transform is to be computed. (The forward transform is
C evaluated if INV is not = 1.)
C-----
C
C      Complex*16 A(1), u, w, t
C      Double precision ang, pi
C      Integer N, Nd2, i, j, k, l, le, le1, ip
C      Parameter (pi = 3.141592653589793d0)
C
C This routine computes the Fast Fourier Transform of the
C input data and returns it in the same array. Note that
C the k's and x's are related in the following way:
C
C      IF   K = range of k's    and    X = range of x's
C
C      THEN delta-k = 2 pi / X   and   delta-x = 2 pi / K
C
C When the transform is evaluated, it is assumed that the
C input data is periodic. The output is therefore periodic
C (you have no choice in this). Thus, the transform is
C periodic in k-space, with the first N/2 points being
C 'most significant'. The second N/2 points are the same
C as the Fourier transform at negative k!!! That is,
C
C      FFT(N+1-i) = FFT(-i) , i = 1,2,....,N/2
C
C      N  = 2**m
```

```

Nd2 = N/2
j = 1
DO i = 1, N-1
  IF( i .lt. j ) THEN
    t = A(j)
    A(j) = A(i)
    A(i) = t
  ENDIF
  k = Nd2
100  IF( k .lt. j ) THEN
    j = j-k
    k = k/2
    goto 100
  ENDIF
  j = j+k
END DO
le = 1
DO l = 1, m
  le1 = le
  le = le + le

  u = ( 1.D0, 0.D0 )
  ang = pi / dble(le1)
  W = Dcmplx( cos(ang), -sin(ang) )
  IF(inv .eq. 1) W = Dconjg(W)

  DO j = 1, le1
    DO i = j, N, le
      ip = i+le1
      t = A(ip)*u
      A(ip) = A(i)-t
      A(i) = A(i)+t
    END DO
    u=u*w
  END DO

```


END DO

```
IF(inv .ne. 1) THEN
  DO i = 1, N
    A(i) = A(i) / dble(N)
  END DO
ENDIF
```

End



ملحق 7

C++ بعض البرامج بلغة

طريقة القاطع:

```
#include<iostream>
#include<cmath>
using namespace std;

void bisection(double,double,double,int);
double f(double);

int main()
{
    int imax;
    double a,b;
    double epsilon;

    cout<<"Enter the limits of the original search interval, a and b : \n";
    cin>>a>>b;
    cout<<"Enter the convergence criteria : \n";
    cin>>epsilon;
    cout<<"Enter the max number of iterations allowed : \n";
    cin>>imax;

    bisection(a,b,epsilon,imax);

    return 0;
}
```

```

void bisection(double a,double b,double epsilon,int imax)
{
double x1=a,x2=b,x3;
double f1 = f(a),f2 = f(b);

for (int i = 1;i<=imax;i++)
{
    x3=x2-f(x2)*(x2-x1)/(f(x2)-f(x1));
    if (fabs(f(x3))<epsilon)
    {
        cout<<"There is a root at x = "<<x3<<" with function
value of "<<f(x3)<<endl;
        return;
    }
    else
    {
        x1=x2;
        x2=x3;
        f1=f2;
        f2=f(x3);
    }
}

    cout<<"After "<<imax<<" iterations, no roots was found
within the convergence criterion"<<endl;
}

double f(double x)
{
    const double pi=2 * asin(1);
    return (exp(-x)-sin(0.5*pi*x));
}

```

```
#include<iostream>
#include<cmath>
using namespace std;

void bisection(double,double,double,int);
double f(double);

int main()
{
    int imax;
    double a,b;
    double epsilon;

    cout<<"Enter the limits of the original search interval, a and b : \n";
    cin>>a>>b;
    cout<<"Enter the allowed error : \n";
    cin>>epsilon;
    cout<<"Enter the max number of iterations allowed : \n";
    cin>>imax;

    bisection(a,b,epsilon,imax);

    return 0;
}

void bisection(double a,double b,double epsilon,int imax)
{
    double x1 = a,x2,x3 = b;
    double f1 = f(a),f2,f3 = f(b);
    double width = a - b;
```

```

if (f1*f3 > 0)
    cout<<"No roots in the interval [a,b] \n";
else
{
    for (int i = 1; i<=imax; i++)
    {
        x2=(x1+x3)/2;
        f2=f(x2);
        if (f1*f2<=0)
        {
            f3 = f2;
            x3 = x2;
        }
        else
        {
            f1 = f2;
            x1 = x2;
        }
        if ( fabs(f2) <= epsilon )
        {
            cout<<"There is a root at x = "<<x2<<" with
function value of "<<f2<<endl;
            return;
        }
    }
    cout<<"After "<<imax<<" iterations, no roots was found
within the convergence criterion"<<endl;
}

double f(double x)
{
    const double pi=2 * asin(1);
    return (exp(-x)-sin(0.5*pi*x));
}

```

طريقة نيوتن:

```
#include<iostream>
#include<cmath>
using namespace std;

void newton(double,double,int);
double f(double);
double df(double);

int main()
{
    int imax;
    double a;
    double epsilon;

    cout<<"Enter the limits of the start point : \n";
    cin>>a;
    cout<<"Enter the allowed error : \n";
    cin>>epsilon;
    cout<<"Enter the max number of iterations allowed : \n";
    cin>>imax;

    newton(a,epsilon,imax);

    return 0;
}

void newton(double a,double epsilon,int imax)
{
    double x = a,y;

    for (int i = 1;i<=imax;i++)
```

```

{
    y = f(x);
    x = x - (y/df(x));
    if ( fabs(y) <= epsilon )
    {
        cout<<"There is a root at x = "<<x<<" with function
value of "<<y<<endl;
        return;
    }
}

    cout<<"After "<<imax<<" iterations, no roots was found
within the convergence criterion"<<endl;
}

double f(double x)
{
    const double pi=2 * asin(1);

    return (exp(-x)-sin(0.5*pi*x));
}

double df(double x)
{
    const double pi=2 * asin(1);

    return (-exp(-x)- 0.5 * pi * cos(0.5*pi*x));
}

```

التكامل بطريقة شبه المنحرف:

```
#include<iostream>
#include<cmath>

using namespace std;

void trap(double,double,double);
double f(double);
int main()
{
    double a,b,step;
    int res;
    cout<<"Enter the integration limits :\n";
    cin>>a>>b;
    cout<<"Enter the step's number : ";
    cin>>res;
    step = (b-a)/res;
    trap(a,b,step);

    return 0;
}

void trap(double a,double b,double step)
{
    double integ=step*(f(a)+f(b))/2;
    for (double i = a + step ;i < b ;i = i + step)
        integ = integ + step*f(i);
    cout<<"the integration Value is : "<<integ<<endl;
}

double f(double x)
{
    return 1/x;
}
```



```
#include<iostream>
#include<cmath>
#include <cstdlib>
using namespace std;

void monte(double,double,int);
double f(double);
int main()
{
    double a,b;
    int point_num;
    cout<<"Enter the integration limits :\n";
    cin>>a>>b;
    cout<<"Enter the points number : ";
    cin>>point_num;
    monte(a,b,point_num);

    return 0;
}

void monte(double a,double b,int point_num)
{
    double x,mean = 0;
    double integ;

    for (double i = 1 ;i <= point_num ;i++)
    {
        x = a+((double(rand())/RAND_MAX)*(b-a));
        mean = mean + f(x);
    }
    mean = mean / point_num;
```

```
    integ = mean;  
    cout<<"the integration Value is : "<<integ<<endl;  
}  
  
double f(double x)  
{  
    return 1/x;  
}
```





المراجع

- 1- Computational Physics, Koonin, 1989.
- 2- Computational Physics, Devries, John-Wiley 1999.
- 3- Computational Physics, Thijessin, Cambridge 2000.
- 4- Computational Physics, Landau and Paez, John-Wiley 2007.
- 5- Introduction to computational physics, T. Pang, Cambridge 2006.
- 6- Applied Numerical Analysis, Curtis and Weatly, Pearson 2003.
- 7- Handbook of Mathematical Functions, Abramowitz and Stegun, Dover1972.
- 8- Mathematical Handbook of Formulas and Tables, schaum's outlines, McGraw Hill 1999.
- 9- Tables of integrals series and products, I. S. Gradshteyn and I.M. Ryzik, Academic press1980.
- 10- Numerical recipes; Fortran edition, Cambridge, 1992.
- 11- Numerical recipes; Fortran 90 edition, Cambridge, 1996.
- 12- Numerical recipes; C edition, Cambridge, 1992.
- 13- Numerical recipes; C++ edition, Cambridge, 1999.
- 14- The Art of Molecular Dynamics, Cambridge, 1999.
- 15- Projects in Scientific Computing, R. Crandall, Springer 1996.
- 16- Numerical Methods, N. S. Bakhlov, Mir 1977.



اللجنة العلمية:

- 1- أ.د. مُحمَّد قعقع
- 2- د. مُحمَّد نوار العوا
- 3- د. مُحمَّد جمال اللّبن

المدقق اللغوي:

د. مُحمَّد موعّد

" حقوق الطبع و الترجمة و النشر محفوظة لمديرية الكتب و المطبوعات "