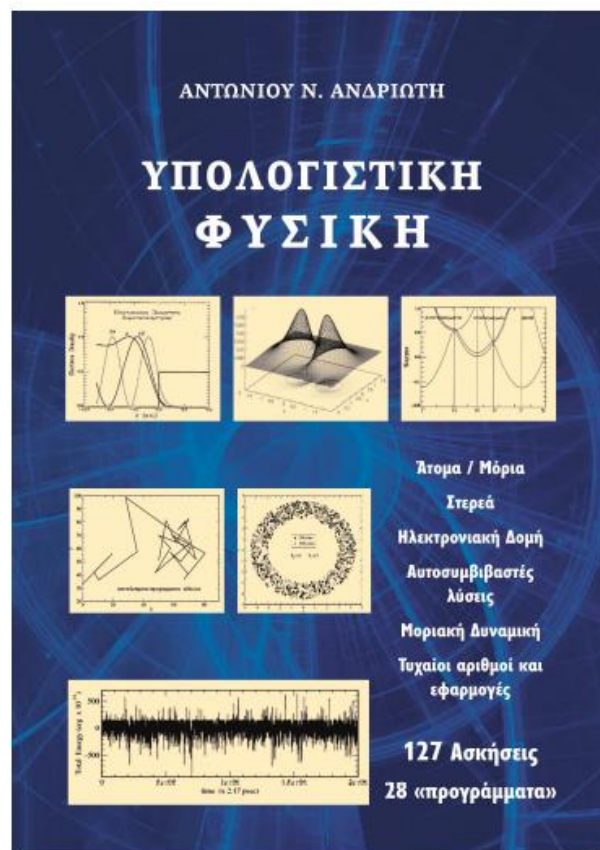


ΜΟΛΙΣ
ΚΥΚΛΟΦΟΡΗΣΕ



ISBN: 978-960-93-7889-5

Απαγορεύεται η ανατύπωση μέρους ή ολοκλήρου του παρόντος έργου χωρίς την γραπτή συγκατάθεση του συγγραφέα

Copyright: ΑΝΤΩΝΗΣ Ν. ΑΝΔΡΙΩΤΗΣ

Αθήνα, 2016

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

		Σελίδα
	ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΠΡΩΤΟ	
	ΒΑΣΙΚΕΣ ΠΡΑΞΕΙΣ ΤΗΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ	1
1.1	ΕΥΡΕΣΗ ΤΩΝ ΡΙΖΩΝ ΕΝΟΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ	2
1.1.1	Εύρεση περιοχών στις οποίες η $f(x)$ αλλάζει πρόσημο	2
1.1.2	Μέθοδος των Newton-Raphson	3
1.2	ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΛΥΣΕΩΣ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ: ΕΜΜΕΣΕΣ Ή ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ	5
1.2.1	Μεθοδος Jacobi	6
1.2.2	Μέθοδος των Gauss-Seidel	7
1.3	ΕΥΡΕΣΗ ΣΥΜΠΤΩΤΙΚΟΥ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ ΚΑΙ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗΣ	8
1.3.1	Εύρεση συμπτωτικού πολωνύμου με την βοήθεια λύσης γραμμικών συστημάτων	9
1.3.2	Εύρεση του συμπτωτικού πολωνύμου με την μέθοδο Lagrange	11
1.3.3	Εύρεση του συμπτωτικού πολωνύμου με την μέθοδο Newton προς τα εμπρός (Newton's forward method)	13
1.3.4	Περιγραφή δεδομένων με πολωνύμο προσέγγισης: Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων	15
1.3.5	Πολωνύμο προσέγγισης πρώτου βαθμού	16
1.4	ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ	19
1.4.1	Σφάλμα αποκοπής αριθμητικών ολοκληρωμάτων	22
1.5	ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΟΣ ΚΥΡΙΑΣ ΤΙΜΗΣ (principal value integrals) – Υπολογισμός ολοκληρώματος τύπου Kramer-Krönig	24
	1Π.1 Πρόγραμμα: newton_raphson	27
	1Π.2 Πρόγραμμα: newton Εύρεση συμπτωτικού πολωνύμου με την μέθοδο Newton (προς τα εμπρός)	30
	1Π.3 Πρόγραμμα: linear_fit	35
	1Π.4 Πρόγραμμα: parabolic_fit	37
	1Π.5 Πρόγραμμα : green0	39
1.6	Υπολογισμός ολοκληρώματος τύπου Kramer-Krönig ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΤΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΚΙΝΗΣΗΣ ΤΟΥ NEWTON	42
1.6.1	Ο αλγόριθμος του Euler	43
1.6.2	Ο αλγόριθμος των Feynman και Newton	44
1.6.3	Ο αλγόριθμος του Verlet	44
1.6.4	Ο αλγόριθμος των Runge-Kutta (για βαθμωτές συναρτήσεις)	44
1.6.5	Σχεδιασμός προγραμμάτων επίλυσης της εξίσωσης κίνησης	45
	1.6.5.1 Αρχικός σχεδιασμός	45
	1.6.5.2 Δεύτερος σχεδιασμός	47
	1.6.5.3 Σχεδιασμός προγράμματος με χρήση αλγορίθμου Runge-Kutta	49
1.6.6	Αριθμητική επίλυση διαφορικής εξίσωσης πίνακα	50
	1Π.6 Πρόγραμμα: RK_matrix	52
	1Π.7 Πρόγραμμα: shooting1	56
1.6.7	Ο αλγόριθμος του Numeron	61
1.7	ΕΛΕΓΧΟΣ ΑΚΡΙΒΕΙΑΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΛΥΣΕΩΝ ΚΑΙ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	64
	Ασκήσεις A1.1 - A1.20	67

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΔΕΥΤΕΡΟ

	Απλά προβλήματα από την κλασική και κβαντική φυσική	74
2.1	ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΚΙΝΗΣΗΣ ΣΩΜΑΤΟΣ ΠΟΥ ΠΕΦΤΕΙ ΕΛΕΥΘΕΡΑ ΣΤΟΝ ΑΕΡΑ	74
2.2	ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΚΙΝΗΣΗΣ ΣΤΟ ΧΩΡΟ 2-	

	ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΝ	76
2.3	ΜΕΛΕΤΗ ΚΙΝΗΣΗΣ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟΥ ΣΤΕΡΕΩΜΕΝΟΥ ΣΕ ΕΛΑΤΗΡΙΟ	77
	Test Program : spring	80
	Test program : spring1	81
2.4	ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΟΥ ΕΚΚΡΕΜΟΥΣ	83
	Test Program : pendulum	86
2.5	ΚΥΚΛΩΜΑ ΜΕ ΠΥΚΝΩΤΗ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗ	88
2.6	ΙΔΙΟΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΩΝ ΣΕ ΠΗΓΑΔΙ ΣΤΑΘΕΡΟΥ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ ΜΙΑΣ ΔΙΑΣΤΑΣΗΣ	91
	Test program: pwell_plot	93
2Π.1	Πρόγραμμα pwell Εύρεση ιδιοκαταστάσεων ηλεκτρονίου σε μονοδιάστατο πηγάδι σταθερού δυναμικού	95
2Π.2	Πρόγραμμα: shooting2	99
2.7	ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ LAPLACE ΚΑΙ POISSON	107
2.7.1	Ανάπτυξη αλγορίθμου : Αυτοσυμβιβαστή μέθοδος	108
2Π.3	Πρόγραμμα : laplace	110
2.8	ΜΟΝΟΔΙΑΣΤΑΤΟ ΦΡΑΓΜΑ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ : ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΜΕΤΑΛΛΙΚΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ	116
2Π.4	Πρόγραμμα : msurface	122
2.9	ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΜΕΤΑΛΛΙΚΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΣΤΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΤΗΣ ΤΟΠΙΚΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ	128
	Ασκήσεις A2.1 - A2.23	134

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΤΡΙΤΟ

Εξοικείωση με τα κρυσταλλικά πλέγματα

3.1	ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ : ΑΝΥΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΠΙΠΕΔΑ	147
3.2	ΠΛΕΓΜΑΤΑ ΧΩΡΟΥ : ΠΛΕΓΜΑΤΑ BRAVAIS	148
3.3	ΑΝΥΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΠΙΠΕΔΑ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ	149
3.4	ΤΟ ΑΝΑΣΤΡΟΦΟ ΠΛΕΓΜΑ	150
3.5	ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗΣ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ - ΣΕΙΡΕΣ FOURIER	152
3Π.1	Πρόγραμμα : vectors Υπολογισμός ανυσμάτων ευθέος και αναστρώφου πλέγματος και εφαρμογές	154
3Π.2	Πρόγραμμα : madelung Υπολογισμός της σταθεράς Madelung : Μέθοδος απλής άθροισης	164
3Π.3	Πρόγραμμα : ewald Υπολογισμός της σταθεράς Madelung: Μέθοδος Ewald	169
3Π.4	Υποπρόγραμμα : FUNCTION fmch Υπολογισμός του ολοκληρώματος $\int_0^1 e^{-Wt^2} t^{2M} dt$, $M \in \mathbb{I}$, $W \in \mathbb{R}$	179
3Π.5	Πρόγραμμα : sound Υπολογισμός της θερμοκρασίας Debye από τις ελαστικές σταθερές	184
3Π.6	Υποπρόγραμμα : subroutine cubeqn(a1,a2,a3,x1,x2,x3) Λύση τριτοβάθμιας αλγεβρικής εξίσωσης	201
	Ασκήσεις A3.1 - A3.20	204

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΤΕΤΑΡΤΟ

Υπολογισμός της δομής των ηλεκτρονιακών ζωνών κρυσταλλικών συστημάτων

4.1	ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ΤΩΝ KRÖNIG – PENNEY	215
4.1.1	Μέθοδος 1: Λύση στην μοριακία κυψελίδα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες	216

4.1.2		Μέθοδος 2: Λύση με ανάπτυξη σε επίπεδα κύματα	219
	4Π.1	Πρόγραμμα : krönig	
		Υπολογισμός της δομής των ενεργειακών ζωνών κατά το πρότυπο των Krönig-Penney	222
4.2		ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΩΝ ΖΩΝΩΝ ΣΕ ΜΕΤΑΛΛΑ ΜΕ ΣΧΕΔΟΝ ΕΛΕΥΘΕΡΑ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ	229
	4.2.1	Χρήση υποπρογραμμάτων διαγωνοποίησης πίνακα	232
	4.2.2	Χαρακτηριστικά σημεία της δομής των ενεργειακών ζωνών	234
	4Πρ1	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 4Πρ1	
		Υπολογισμός συντελεστών Fourier του ιοντικού δυναμικού	236
	4Π.2	Πρόγραμμα : ashcroft	
		Υπολογισμός της δομής των Ενεργειακών ζωνών στη προσέγγιση τοπικού ψευδοδυναμικού Ashcroft	237
4.3		ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΥ ΑΤΟΜΙΚΩΝ ΤΡΟΧΙΑΚΩΝ (ΓΣΑΤ)	244
	4Πρ2	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 4Πρ2	
		Επίλυση της εξίσωσης Schrodinger στην προσέγγιση της ισχυρής σύζευξης	255
	4Π.3	Πρόγραμμα : tightb1	
		Υπολογισμός δομής ηλεκτρονιακών ζωνών ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή απλού κυβικού πλέγματος	256
	4Π.4	Πρόγραμμα : tightb2	
		Υπολογισμός δομής ηλεκτρονιακών ζωνών ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή απλού διαμαντιού	260
	4Π.5	Πρόγραμμα : tightb3	265
		Υπολογισμός δομής ηλεκτρονιακών ζωνών ημιαγωγών με κρυσταλλική δομή κυβικού θειούχου ψευδαργύρου	
4.4		ΠΥΚΝΟΤΗΤΑ ΤΩΝ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ	270
		Ασκήσεις A4.1 - A4.19	272

ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΠΕΜΠΤΟ

		Ατομικοί και μοριακοί υπολογισμοί	279
5.1		ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ HARTREE ΓΙΑ ΑΤΟΜΑ	280
	5.1.1	Διάγραμμα ροής λύσης με τη μέθοδο Hartree	283
5.2		ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ – ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ ΛΥΣΕΩΣ	284
5.3		ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ HARTREE-FOCK (HF)	287
	5Πρ1	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 5Πρ1 : Η λαπλασιανή σε σφαιρικές συντεταγμένες	290
	5Πρ2	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 5Πρ2 : Υπολογισμός μονοηλεκτρονιακών ολοκληρωμάτων	291
	5Πρ3	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 5Πρ3 : Υπολογισμός των ολοκληρωμάτων Coulomb και ανταλλαγής	292
	5Π.1	Πρόγραμμα : hartree	
		Λύση της εξίσωσης Schrodinger στην προσέγγιση Hartree-Fock για άτομα με κυματοσυναρτήσεις τύπου-s	293
5.4		ΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ HARTREE-FOCK ΜΕ ΤΗ ΘΕΩΡΙΑ ΤΩΝ ΜΕΤΑΒΟΛΩΝ	309
5.5		ΜΕΘΟΔΟΣ ROOTHAAN ΓΙΑ ΑΤΟΜΑ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑ ΜΕ ΚΛΕΙΣΤΟΥΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΟΥΣ ΦΛΟΙΟΥΣ	310
	5.5.1	Υπολογισμός του πίνακα $S^{-1/2}$	315
	5.5.2	Υπολογισμός και αποθήκευση ολοκληρωμάτων	316
	5.5.3	Διάγραμμα ροής αλγορίθμου λύσεως με τη μέθοδο Roothaan	321
5.6		ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΒΟΗΘΗΜΑ ΓΙΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥΣ ΣΕ ΜΟΡΙΑ	322
	5Π.2	Πρόγραμμα : h_molecule	
		Το μόριο H ₂ στην προσέγγιση Roothaan-Hartree-Fock	327
		Ασκήσεις A5.1 - A5.17	349

	ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΕΚΤΟ	356
	Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής	
6.1	ΑΡΙΘΜΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΜΙΑΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	357
6.2	ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΚΙΝΗΣΗΣ	358
6.3	ΣΥΝΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ	359
6.3.1	Προβλήματα με μεγάλο αριθμό ατόμων/μορίων: Περιοδικές συννοριακές συνθήκες	359
6.3.2	Προβλήματα με μικρό αριθμό ατόμων : Πάγωμα και απόσβεση κίνησης	362
6.4	ΤΟ ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΩΝ ΑΤΟΜΩΝ ΣΕ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΚΛΑΣΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ	363
6.5	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΜΕ ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ LENNARD-JONES	365
6Π.1	Πρόγραμμα : molecdyn Προσομοίωση συστήματος με δυναμικό αλληλεπίδρασης τύπου Lennard-Jones	367
	6Π.1.1 Στοιχεία εισόδου του προγράμματος molecdyn	368
	6Π.1.2 Μονάδες μέτρησης	369
	6Π.1.3 Περιγραφή υποπρογραμμάτων του προγράμματος molecdyn	372
	6Π.1.4 Δεδομένα εξόδου του προγράμματος molecdyn	372
	6Π.1.5 Αξιολόγηση αποτελεσμάτων	373
	6Π.1.6 Περαιτέρω αξιοποίηση των αποτελεσμάτων	377
6.6	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΕΙΣ ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ	391
6.7	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ ΤΗΣ ΙΣΧΥΡΗΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ: Αλληλεπίδραση δύο ατόμων	393
6Π.2	Πρόγραμμα cluster Προσομοίωση ομάδας ατόμων σε προσέγγιση ισχυρής σύζευξης	395
	6Π.2.1 Ο Ελκτικός όρος	396
	6Π.2.2 Ο Απωστικός όρος	399
	6Π.2.3 Υπολογισμός δυνάμεων	399
	6Π.2.4 Ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας	401
	6Π.2.5 Στοιχεία εισόδου του προγράμματος cluster	401
	6Π.2.6 Εκτέλεση του προγράμματος cluster	402
6.8	ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ	403
	Ασκήσεις A6.1 - A6.10	418
	ΚΕΦΑΛΑΙΟ ΕΒΔΟΜΟ	
	Προσομοιώσεις Monte-Carlo	422
7.1	ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ POISSON ΚΑΙ GAUSS: Σύντομη ανασκόπηση	422
7.1.1	Διωνυμική κατανομή	425
7.2	ΤΥΧΑΙΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ ΚΑΙ ΓΕΝΝΗΤΟΡΕΣ ΤΟΥΣ	425
7.3	ΒΑΣΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ MONTE-CARLO	427
7.3.1	Παραδείγματα εφαρμογής του αξιώματος συσχέτισης	428
7.4	ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΗ ΤΗΣ ΣΧΕΣΗΣ $r=f(p(x))$	437
7.5	Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΗΣ ΑΠΟΡΡΙΨΗΣ ΤΟΥ von NEUMANN	438
7.6	ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΑΤΩΝ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ MONTE CARLO	441
7.61	Παραδείγματα υπολογισμού ολοκληρωμάτων με τη μέθοδο Monte Carlo	443
7.7	ΧΡΗΣΗ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ ΒΑΡΟΥΣ	445
7.8	ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΟΥ ΤΥΧΑΙΟΥ ΠΕΡΙΠΑΤΟΥ ΣΕ ΜΙΑ ΔΙΑΣΤΑΣΗ: ΕΝΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ MONTE CARLO	446
7Π.1	Πρόγραμμα drunk : Περίπατος (τυχαίος) μεθυσμένου	448
7.9	ΔΙΑΧΥΣΗ ΜΕ ΣΚΕΔΑΣΗ ΤΥΠΟΥ ΣΚΛΗΡΗΣ ΣΦΑΙΡΑΣ	451
7.9.1	Ανάλυση του προτύπου	451

7.9.2	Σχεδιασμός προγράμματος	453
7.9.3	Περιγραφή αλγορίθμου	454
7Π.2	Πρόγραμμα: diffusion	
	Πρόβλημα διάχυσης σε διδιάστατο χώρο κατά το πρότυπο σκέδασης της σκληρής σφαίρας (§7.9)	456
7.10	ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΤΟΥ METROPOLIS	460
7.11	ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ ISING	461
7Π.3	Πρόγραμμα mc_ising	461
	Ασκήσεις A7.1 - A7.18	471
	ΑΛΦΑΒΗΤΙΚΟ ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ	479

Πρόλογος Β' εκδόσεως

Η επανέκδοση της Υπολογιστικής Φυσικής (Υ/Φ) (πρώτος τόμος) θεωρήθηκε επιβεβλημένη λόγω εξαντλήσεως της πρώτης έκδοσης και της συνεχιζόμενης ζήτησής της. Με την ευκαιρία της επανέκδοσης έγιναν συμπληρωματικές προσθήκες σχεδόν σε κάθε κεφάλαιο, δώσαμε έμφαση σε γραφικές απεικονίσεις λύσεων και πλουτίσαμε τη συλλογή των ασκήσεων κάθε Κεφαλαίου.

Ο επανεκδιδόμενος πρώτος τόμος της Υ/Φ διατηρεί την φυσιογνωμία της αρχικής έκδοσης. Δίδει έμφαση σε λύσεις της εξίσωσης του Schrodinger (για άτομα, μόρια και στερεά), που ανάγονται σε προβλήματα γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων και ιδιοτιμών (διαγωνοποίηση πίνακα). Αντίθετα, αποφεύγει την παράθεση λύσεων που βασίζονται στην απ' ευθείας αριθμητική ολοκλήρωση, οι αντίστοιχες μεθοδολογίες των οποίων περιγράφονται διεξοδικά στον δεύτερο τόμο, στο βιβλίο μου «Υπολογιστική Φυσική II». Η επιλογή αυτή επιτρέπει τη σταδιακή εισαγωγή του φοιτητή/ερευνητή στα «μυστικά» της Υ/Φ, στις μεθοδολογίες και τις δυνατότητες που μας προσφέρει, εμβαθύνοντας στην κατανόηση των προβλημάτων και στην ανάλυση και αξιολόγηση των αριθμητικών αποτελεσμάτων.

Η παρούσα έκδοση περιλαμβάνει 28 κύρια προγράμματα υπολογισμού και 127 ασκήσεις με υποδείξεις και επεξηγήσεις που συμπληρώνουν το θεωρητικό μέρος κάθε κεφαλαίου.

Πιστεύω ότι η αναβαθμισμένη νέα αυτή έκδοση θα αποτελέσει ένα χρήσιμο οδηγό και βοήθημα διδασκαλίας του μαθήματος Υ/Φ σε προπτυχιακό επίπεδο.

Ηράκλειο Κρήτης, Φεβρουάριος 2016

Αντώνης Ν. Ανδριώτης

Πρόλογος (πρώτης εκδόσεως)

Με την ανάπτυξη των Υπολογιστικών συστημάτων, το μέρος της φυσικής έρευνας, που ήτο επικεντρωμένο στην ανάπτυξη και εκτέλεση των αριθμητικών λύσεων ενός ερευνητικού προγράμματος, διηύρυνε τους ορίζοντές του και εξελίχθηκε σ' ένα ιδιαίτερο κλάδο της Φυσικής Επιστήμης παράλληλο με εκείνων της Πειραματικής και Θεωρητικής Φυσικής. Ο νέος αυτός κλάδος της φυσικής είναι η Υπολογιστική Φυσική, της οποίας στόχος είναι η ανάπτυξη και επεξεργασία αριθμητικών λύσεων προβλημάτων της Φυσικής με την βοήθεια των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και των μεθόδων της αριθμητικής ανάλυσης.

Οι κώδικες των αριθμητικών λύσεων, που αναπτύσσονται σήμερα, απαιτούν αφ' ενός μεν μια πολύ καλή γνώση των δυνατοτήτων του ηλεκτρονικού μας υπολογιστή και αφ' ετέρου γνώση σε βάθος του προβλήματος φυσικής του οποίου επιδιώκουμε την αριθμητική λύση. Η καλή γνώση των δυνατοτήτων του υπολογιστή μας επιτρέπει χαμηλότερο κόστος λύσεως, (σε χρόνο CPU και χώρο μνήμης), ενώ η σε βάθος γνώση του προβλήματος μας επιτρέπει να βρούμε και να σχεδιάσουμε τη σωστότερη προσέγγιση της λύσης του με αριθμητική μέθοδο. Είναι αυτονόητο, ότι ουσιώδεις γνώσεις προγραμματισμού και αριθμητικής ανάλυσης πρέπει να αποτελούν τη βασική υποδομή γνώσεων και εμπειρίας του ερευνητή, που θέλει να ασχοληθεί σοβαρά με την Υπολογιστική Φυσική.

Στα σύγχρονα προγράμματα υπολογισμού έχουν συσσωρευθεί πολυετείς προσπάθειες και εμπειρίες, πολλές ανθρωποώρες δουλειάς και έχουν αναπτυχθεί ειδικές μεθοδολογίες λύσεων για συγκεκριμένα προβλήματα. Για το λόγο αυτό, η χρησιμοποίηση των προγραμμάτων αυτών και η ανάπτυξη νέων μεθοδολογιών απαιτούν πολυετή εμπειρία σε προγραμματισμό και χρήση του ηλεκτρονικού υπολογιστή. Απ' την άλλη πλευρά, οι μεγάλες απαιτήσεις της σύγχρονης φυσικής σε θεωρητικούς υπολογισμούς υψηλής ακρίβειας σε συνδυασμό με την μακροχρόνια διαδικασία που απαιτείται για την κατάρτιση των ερευνητών και την μύησή τους στα μυστικά των υπολογιστικών τεχνικών, έδωσαν το έναυσμα για την ανάπτυξη του νέου μαθήματος Υπολογιστικής Φυσικής και την ένταξή του στα προπτυχιακά προγράμματα σπουδών πολλών πανεπιστημίων.

Το Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας και το Φυσικό Τμήμα του Πανεπιστημίου Κρήτης βλέποντας την διεθνή τάση στην ανάπτυξη της Υπολογιστικής Φυσικής και συνεπικουρούμενο από ένα δικό τους ευέλικτο Υπολογιστικό Κέντρο με πρωτοποριακή υποστήριξη δικτύων υπολογιστών, έδωσε έμφαση στην
α