Απαντήσεις στα προβλήματα, δεκτές ηλεκτρονικά μέσω ηλεκτρονικής αλληλογραφίας:

```
email: compPhysicsEKPA@gmail.com
attachments: *.ipynb .OR. *.txt
```

Η αποστολή ασκήσεων είναι **προαιρετική** και δεν έχει κάποιο βαθμολογικό αντίκτυπο. Το αρχείο κειμένου (∗.txt) πρέπει να περιέχει σχολιασμένο κώδικα σε οποιαδήποτε γλώσσα προγραμματισμού **καθώς και το αποτέλεσμα της εκτέλεσής του (printout)**. (Μη στέλνετε αρχεία τύπου *.doc, *.docx.) Σε περίπτωση που θέλετε να συμπεριλάβετε κάποιο διάγραμμα, προτιμήστε αυτό να το επισυνάψετε ως ξεχωριστό αρχείο τύπου (∗.png, ∗.jpg, ∗.pdf) ή compiled latex (pdf). Εναλλακτικά (**προτιμητέο**) μπορείτε να στείλετε τα αποτελέσματα όλα μαζί (γραφικά, κώδικας και αποτελέσματα) σε μορφή jupyter notebook (∗.ipynb) – για πιο γρήγορη διόρθωση/σχολιασμό από τον διδάσκοντα.

Πρόβλημα 1 (παραδοτέο έως 22.10.2020)

Λαμβάνοντας υπόψη το δείγμα δεδομένων από διαδοχικές ρίψεις ενός ζαριού, που δίνεται στο τέλος της εκφώνησης, να υπολογίσετε:

α) τον αριθμητικό μέσο όρο του δείγματος $\hat{\mu} = N^{-1}\sum x_i$,

β) την τετραγωνική διασπορά του δείγματος $s^2 = (N-1)^{-1}\sum(x_i - \hat{\mu})^2$,

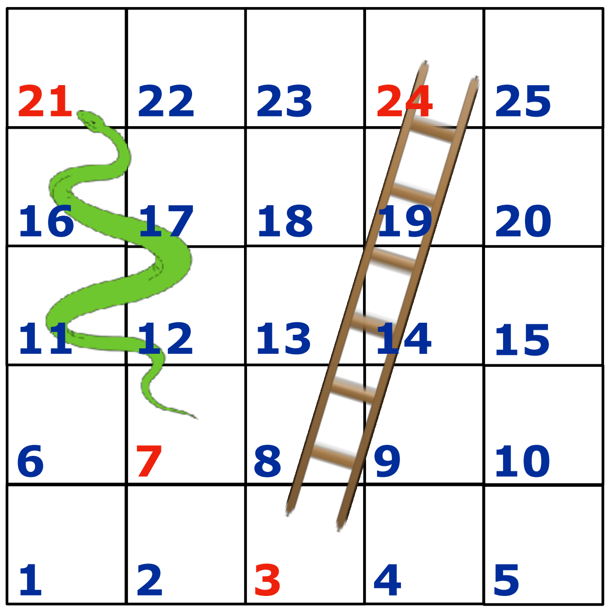
γ) την (προκατειλημμένη) τετραγωνική διασπορά του δείγματος $s_N^2 = N^{-1}\sum(x_i - \hat{\mu})^2$,

θεωρώντας ως ισοπίθανα $p_i = 1/6$ τα αποτελέσματα $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Σχολιάστε αν βρείτε κάτι παράξενο.

```
5, 3, 3, 1, 5, 6, 1, 5, 4, 4, 3, 3, 3, 3, 6, 3, 3, 1, 6, 4, 6, 3,
6, 3, 3, 5, 1, 2, 3, 5, 6, 3, 3, 3, 2, 3, 3, 3, 5, 3, 5, 3, 2, 5,
3, 4, 6, 3, 3, 5, 5, 3, 6, 6, 6, 3, 4, 3, 6, 3, 2, 1, 6, 6, 6, 3,
3, 5, 6, 3, 4, 2, 6, 3, 3, 2, 3, 6, 3, 6, 5, 5, 2, 6, 5, 3, 6, 3,
1, 1, 6, 1, 3, 3, 1, 6, 3, 6, 4, 3, 6, 6, 6, 5, 6, 3, 3, 5, 3, 1,
2, 6, 6, 3, 3, 3, 5, 3, 5, 5, 4, 6, 6, 3, 6, 1, 6, 1, 3, 6, 3, 6,
5, 2, 6, 4, 1, 6, 6, 3, 1, 5, 6, 5, 5, 3, 3, 1, 3, 4, 3, 1, 3, 3,
1, 5, 3, 5, 6, 6, 1, 3, 3, 3, 3, 3, 4, 6, 4, 3, 3, 3, 5, 4, 3, 2,
5, 6, 4, 4
```

Πρόβλημα 2 – (άνευ ημερομηνίας παράδοσης)

Βρείτε την κατανομή της τυχαίας μεταβλητής n που χαρακτηρίζει τον αριθμό ρίψεων ενός ζαριού προκειμένου να κερδίσει κάποιος στο παρακάτω ‘φιδάκι’. Παίξτε 200 παιχνίδια, χρησιμοποιώντας



ως δείγμα δεδομένων για τις ζαριές το αρχείο:

`http://theofil.web.cern.ch/theofil/courses/compPhysics/dices/dices.txt`

και συγκρίνετε με τα αποτελέσματα που συζητήσαμε στην τάξη. Είναι συμβατές οι τιμές που παίρνετε; Αν όχι, εξηγήστε γιατί. *Μπορείτε αν θέλετε να ανακυκλώσετε κώδικα από τα υποδείγματα που έχω δώσει.*

Πρόβλημα 3 – (παραδοτέο έως 18.11.2020)

Να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα $I = \int_0^{10} e^x dx$ (και η αβεβαιότητά του) με την μέθοδο της απλοϊκής (crude) Monte–Carlo ολοκλήρωσης, χρησιμοποιώντας $N = 1000$ τυχαίους αριθμούς. Να δομήσετε το πρόγραμμά σας έχοντας ως αφετηρία γεννήτρια τυχαίων αριθμών ομοιόμορφης κατανομής στο $[0, 1]$.

α) Να υπολογιστεί το *σχετικό σφάλμα* $\delta\hat{I}/\hat{I}$ της MC ολοκλήρωσης

β) Να υπολογιστεί (αναλυτικά) το θεωρητικώς αναμενόμενο *σχετικό σφάλμα* $\delta I/I$ της μεθόδου, για το ίδιο πλήθος τυχαίων δειγμάτων ($N = 1000$).

γ) Να υπολογίσετε την τυπική απόκλιση $\sqrt{s^2}$ ενός δείγματος[1] αποτελούμενο από 4×10^4 MC ολοκληρώσεις (με N = 1000 η κάθε μία) και να την συγκρίνετε με το δI και το $\delta\hat{I}$ που υπολογίσατε στα ερωτήματα (α) και (β). Να φτιάξετε ένα ιστόγραμμα που να δείχνει την κατανομή των $\hat{I}$ και να σχολιάσετε την μορφή της.

δ) Εάν χωρίσουμε το διάστημα ολοκλήρωσης στα δύο, έτσι ώστε

$$I = I_1 + I_2 = \int_0^5 e^x dx + \int_5^{10} e^x dx$$

και ‘επενδύσουμε’ στις επιμέρους δύο ολοκληρώσεις τους διαθέσιμους τυχαίους αριθμούς χωρισμένους σε δύο ίσα δείγματα $N = N_1 + N_2 = 500 + 500$, περιμένουμε το σχετικό σφάλμα της απλοϊκής MC ολοκλήρωσης να μεγαλώσει, να μικρύνει ή να μείνει το ίδιο; Να αποδείξετε τον ισχυρισμό σας επαναλαμβάνοντας το ερώτημα (β) για τα επιμέρους ολοκληρώματα I_1, I_2 και υπολογίζοντας την συνολική αβεβαιότητα του αθροίσματός τους.

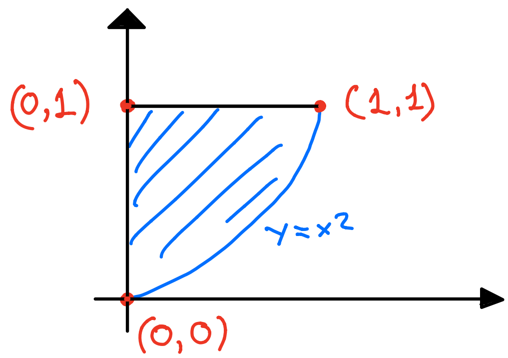
ε) Να επαναλάβετε τα ερωτήματα (α), (β) και (γ) για την ολοκλήρωση με την μέθοδο απόρριψης MC (hit-or-miss) θεωρώντας $N = 1000$ ζευγάρια τυχαίων αριθμών (x, y) που έχουν παραχθεί ομοιόμορφα στο $[0, 1] \times [0, 1]$.

[1] Το s^2 ορίστηκε στο πρόβλημα 1 ως η τετραγωνική διασπορά ενός δείγματος παρατηρήσεων (μετρήσεων).

Πρόβλημα 4 (μη παραδοτέο – λύσεις στο web)

Να υπολογιστεί με την απλοϊκή (crude) Monte-Carlo ολοκλήρωση, η μάζα των παρακάτω αντικειμένων και η αβεβαιότητά τους, για $N = 1000$ γεγονότα.

α) Δισδιάστατη πλάκα που οριοθετείται στην περιοχή $\{x \geq 0, y \leq 1, y \geq x^2\}$ (διαστάσεις μήκους σε μέτρα) με πυκνότητα $\rho(x,y) = \frac{20}{13}(x+y)$ [kg/m^3].



β) Κύβος πυκνότητας $\rho(x,y) = \frac{12}{31}(x^2+yz)$ [kg/m^3] που οριοθετείται στην περιοχή $\{0 \leq x \leq 1, 1 \leq y \leq 2, 1 \leq z \leq 2\}$ με διαστάσεις μήκους μετρημένες σε μέτρα.

Δίνεται, προς σύγκριση, ο ακριβής υπολογισμός της μάζας των δυο σωμάτων είναι $M = 1\,\text{kg}$.

Η άσκηση αυτή είναι λυμένη στο web.

`https://github.com/theofil/CompPhysics/tree/master/problems/2019_2020`

Η διδακτική της αξία ωστόσο παραμένει, υπό την προϋπόθεση ότι κάποιος θα προσπαθήσει να την λύσει δίχως να συμβουλευτεί (εξ αρχής) τις δοσμένες λύσεις.

Πρόβλημα 5 – (άνευ ημερομηνίας παράδοσης)

Χίλια σωματίδια Brown διαχέονται σε ένα δισδιάστατο επίπεδο, έχοντας ως σημείο εκκίνησης την αρχή των αξόνων. Βρείτε την κατανομή της απόστασης που θα διανύσουν μετά από $N = 100$ βήματα μοναδιαίου μήκους (και σε τυχαία κατεύθυνση το καθένα) και υπολογίστε τον μέσο όρο και την τετραγωνική διασπορά αυτής. Μπορείτε, αν θέλετε για ευκολία, να δουλέψετε το πρόβλημα σε τετραγωνικό πλέγμα στο μιγαδικό επίπεδο με ισοπίθανες δυνατές τιμές βήματος $s = \{1, -1, +i, -i\}$ ή να θεωρήσετε ως τύχαιο βήμα το $s = \cos\theta + i\sin\theta$ με την γωνία θ να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη στο $[0, 2\pi)$.

Πρόβλημα 6 (αποστολή μέχρι 25.11.20)

Δίνεται η εξίσωση,

$$\tan x = \frac{x}{1-x^2}. \tag{1}$$

Να απαντηθεί τουλάχιστον ένα εκ των δύο ερωτημάτων:

α) Να λυθεί η εξ.(1) στο διάστημα $x \in [2,4]$ χρησιμοποιώντας:

1) την μέθοδο της διχοτόμησης με 15 επαναλήψεις. *Θεωρήστε σαν τελική εκτίμηση της ρίζας* (ρ) *το μέσο του διαστήματος διχοτόμησης στην 15ή επανάληψη, δηλ.* $\hat{\rho} = 0.5(b_{14} + a_{14}) \approx \rho$, *με* $a_0 = 2$ *και* $b_0 = 4$.

2) την επαναληπτική σχέση[2]

$$x_{\mathrm{n}+1} = x_{\mathrm{n}} - f(x_{\mathrm{n}})/f'(x_{\mathrm{n}})$$

με

$$f(x) = \tan x - \frac{x}{1-x^2}$$

χρησιμοποιώντας $x_0 = 3.0$ και θεωρώντας σαν εκτιμητή της ρίζας το $x_6 = \hat{\rho} \approx \rho$.

Να εκτυπωθούν οι τιμές $\hat{\rho}$ και $f(\hat{\rho})$ για τις δυο περιπτώσεις. Ποια μέθοδος έδωσε $f(\hat{\rho})$ που να είναι περισσότερο συμβατό με το 0 ;

β) Να διερευνηθεί η ύπαρξη ριζών στο διάστημα $x \in [4,10]$.
– *θέμα ελεύθερης ανάπτυξης* ;-)

Υπόδειγμα κώδικα:

```
/*   C/C++   */
#include "math.h"
double f(double x){return tan(x) - x/(1 - x*x);}
double df(double x){/* implement f'(x) */}
int main()
{
  double a = 2;
  double b = 4;
  double n = 0;
  double x = 3;
  while( n < 15 )
  {
    // ... implement  bisection logic
```

[2] Η σχέση αυτή είναι διάσημη με το όνομα Newton-Raphson.

```
        double c = 0.5*(a + b);

        // ... implement newton-raphson
        if ( n < 6 )
        {
           // x = x - f(x)/f'(x)
           // if (n == 5) ektypwsi twn x, f(x)
        }
        n = n + 1;
      }
    }

### /*   Python   */ ###
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt # for exploratory graphics ;-)
def f(x): return np.tan(x) - x/(1-x**2)
def df(x): return 0. # implement here the derivative

# first: plot f(x) to get an idea how it varies
x = np.linspace(-10,10,100)  # an array with 100 steps for x [-10, 10]
y = f(x)
ax, fig = plt.subplots(figsize=(10,10))
plt.plot(x, y)               # plots f(x)
plt.plot(x, [0. for i in x]) # plots y = 0, i.e., x-axis
plt.show()

# logic for bisection/newtwon similar as for the C/C++ example
```

Πρόβλημα 7 (μη παραδοτέο)

Απαντήσεις στην επομένη σελίδα.

α) Να υπολογιστούν οι τρεις πρώτες επαναλήψεις των μεθόδων Gauss-Seidel και Jacobi για το συστήμα $AX = b$, με

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

και

$$b = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

έχοντας σαν αρχική εκτίμηση το $X^{\mathrm{T}} = [0, 0, 0]^{\mathrm{T}}$. Να διερευνηθεί η συμπεριφορα των Gauss-Seidel και Jacobi για το ίδιο πρόβλημα και $n = 200$ επαναλήψεις.

β) Να λυθεί το σύστημα[3] $AX = b$, με

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

και

$$b = [4, -1, -5, -2, \quad 2, \quad 2, -1, \quad 1, \quad 6]^{\mathrm{T}}$$

Να επαληθευθεί η ορθότητα των λύσεων υπολογίζοντας τη συμβατότητα του $AX - b$ με το μηδενικό διάνυσμα (πίνακα-στήλη) για τα ερωτήματα α) και β).

[3] Πίνακες της μορφής A προκύπτουν κατά την διακριτοποίηση της εξίσωσης Poisson σε τετραγωνικό πλέγμα στις δυο διαστάσεις, βλέπε σημειώσεις μαθήματος – παράδειγμα με $\nabla^2\phi(x, y) = -\rho(x, y)/\epsilon$.

Απαντήσεις:

α) Για $n = 3$ παίρνουμε
$$X = [1.347, -1.116, \quad 0.884]^{\mathrm{T}}$$
για την Gauss-Seidel και
$$X = [2.917, -1.389, \quad 0.167]^{\mathrm{T}}$$
για την Jacobi. Για $n = 200$ παίρνουμε
$$X = [1, -1, \quad 1]^{\mathrm{T}}$$
για την Gauss-Seidel και
$$X = [\sim 10^{37}, \sim 10^{37}, \sim 10^{37}]^{\mathrm{T}}$$
για την Jacobi (δε συγκλίνει). Εκτελώντας τον πολλαπλασιασμό AX επαληθεύουμε ότι πράγματι το διάνυσμα που συγκλίνει η Gauss-Seidel αποτελεί την λύση του συστήματος.

β) Η λύση του συστήματος είναι η
$$X = [1, \quad 0, -1, \quad 0, \quad 1, \quad 1, \quad 0, \quad 1, \quad 2]^{T}.$$
Εκτελώντας τον πολλαπλασιασμό AX επαληθεύουμε ότι πράγματι το διάνυσμα αυτό αποτελεί λύση του συστήματος.