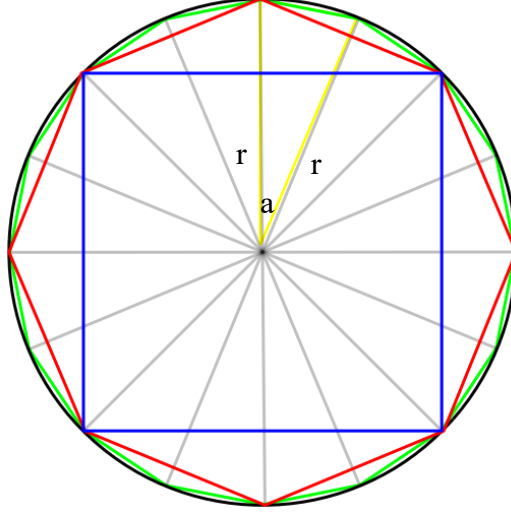


2020 -2021 GÜZ DÖNEMİ
HBM 801 – TBY Arasınay

İsim Soyad:

Öğrenci No:

Soru 1:



Verilen daireyi N eşit parçaya ayırdığımızda, her bir parça kısmen bir üçgene eşit olacaktır. N sayısı büyüdükçe bu üçgenler gitgide küçülecektir ve bu üçgenlerin alanlarının toplamı dairenin alanını daha doğru şekilde ifade etmeye başlayacaktır.

Sinüs teoremine göre sarı renk ile çerçevelemiş üçgenin alanı $\frac{1}{2} \cdot r^2 \cdot \sin(a)$ dır.

Yukarıda verilen bilgileri kullanarak, dairenin alanına $(\pi r^2) \cdot 10^{-4}$ hata payı ile yakınsayacak (Programınızı dairenin gerçek alanı ve hesaplanan alanını kıyaslayarak, bu iki değer arasındaki farkın verilen hata payından daha düşük olacağı N değerine kadar devam edecek şekilde tasarlamamız beklenmektedir.)

(a) (25 puan) Fortran programı yazınız.

(N sayısına 3 verilerek başlanıp, istenilen hata payı ile dairenin alanına ulaşılan kadar N sayısı artırılabilir.)

(b) (5 puan) Kullanılan N sayılarına karşılık gelen hata değerlerini Gnuplot ile görselleştiriniz.

(c) (35 puan) Dairenin alanına verilen hata payı ile yakınsayacak fakat bu yakınsamayı daha az adım sayısı ile yapacak bir fortran programı yazınız.

Bu uygulama için aşağıda verilen golden arama algoritması kullanılabilir.

Golden arama algoritması, basit, genel amaçlı tek değişkenli bir arama yöntemidir. Başlangıçta, bir adet optimum (en büyük ya da en küçük değer) içeren bir aralık seçilir. Daha sonra ikiye bölme (bisection) algoritmasına benzer bir şekilde seçilen aralık içinde bir optimum nokta olup olmadığı denetlenir.

Ancak ikiye bölme algoritmasındakinden farklı olarak iki değil üç nokta gereklidir. Başlangıçta uç noktalar belirlendikten sonra, optimum noktanın seçilen ilk üç fonksiyon değerinde mi yoksa son üç

fonksiyon deęerinde mi oluřtuęu denetlenir. Bu orta iki noktanın seilmesi iin ok eski aęlardan beri bilinen altın oran kullanılır. Bu deęer $\frac{\sqrt{5}-1}{2} = 0.61803..$ olarak verilir. Algoritmanın minimum bulmak iin bir adımlık iřleyiři ařaęıdaki gibi verilebilir:

- Üst sınır x_u ve alt sınır x_a olarak seilmiş olsun.
- Bu durumda ieriden iki nokta altın orana göre:

$$d = 0.61803 * (x_u - x_a)$$
$$x_2 = x_u - d$$
$$x_1 = x_a + d$$

- Eęer mutlakdeęer(GercekAlan-HesaplananAlan(x_1))>HataPayı ise x_a ile x_2 arasında kalan bölgede herhangi bir aranılan N deęeri bulunmaz. Bu durumda bi sonraki adım iin $x_a = x_2, x_2 = x_1$ ve $x_1 = x_a + d$ olur.
- Bu kořul saęlanmıyor ise x_u ile x_1 arasında kalan bölgede herhangi bir aranılan N deęeri bulunmaz. Bu durumda bir sonraki adım iin $x_u = x_1, x_1 = x_2$ ve $x_2 = x_u - d$ olur.
- Bir sonraki adım iin yeni d deęeri hesaplanır.

(Burada alt limit olarak 3, üst limit olarak da 1000 deęeri kullanılabilir ve bu řekilde [3,1000] aralıęında istenen (10^{-4}) hata payı ile dairenin alanına ulařmak iin kullanılacak uygun N deęerine daha az adım atarak ulařmak mümkün olacaktır.)

Soru 2 (35 puan): Verilen DLG dosyasında "DOCKED: USER Estimated Free Energy of Binding" kelime dizisinin getięi satırları bir txt dosyasına yazdırın ve bu dosyadaki her satıra satır numarası verin. Tahmin edilen enerji deęerlerinin bulunduęu sütunu ve satır numarasının bulunduęu ilk sütunu yeni bir txt dosyasına yazdırın. Bu txt dosyasındaki enerji deęerlerini küçükten büyüęe gidecek řekilde sıralayın ve elde ettięiniz bu veri setini Gnuplot ile görselleřtiriniz.

Not: Soruların cevaplarını isimsoyad_arasnav isimli bir dizin altında toplayınız. Cevap dosyalarını yaratırken ařaęıdaki örnekteki isimlendirmeyi kullanınız:

Soru1a.f90 Soru1b.gnu Soru1c.f90 Soru2.sh Soru2.gnu

Sınav sonunda cevaplarınızı ieren dizini ařaęıdaki řekilde paketleyip sıkıřtırarak adem.tekin@be.itu.edu.tr, gozdeinis90@gmail.com, sametdemir@gmail.com adreslerine mail olarak gönderiniz.

tar -zcvf isimsoyad_arasnav.tgz isimsoyad_arasnav