Άσκηση 1 Υπολογιστική Φυσική Ι

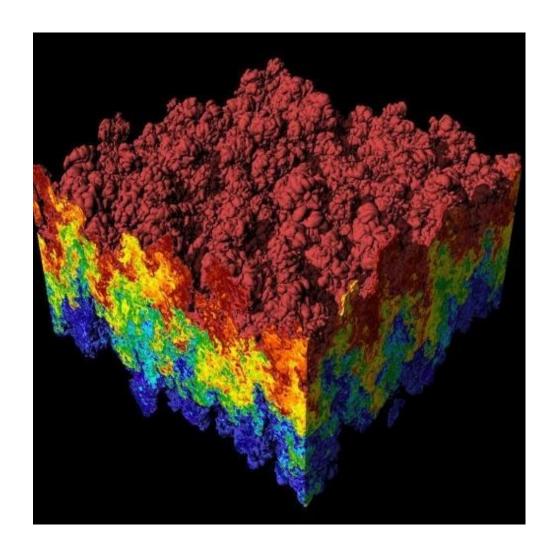
Σχολή: Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

Ονοματεπώνυμο: Κοσμάς Φριτζάλας

Αριθμός Μητρώου Φοιτητή: ge 18015

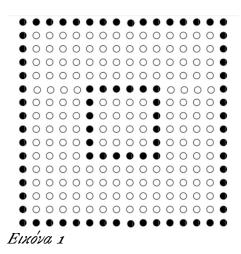
Όνομα Υπεύθυνου Άσκησης: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος

Ημερομηνία Διεξαγωγής Άσκησης: 2 Νοεμβρίου 2023



Ερώτημα 1

Σύμφωνα με τα ζητούμενα της άσκησης, πρέπει να μοντελοποιήσουμε το παρακάτω πρόβλημα ηλεκτροστατικής στον χώρο:



Για την επίλυση του πρώτου ερωτήματος αλλά κ για την μοντελοποίηση του συστήματος της εικόνας 1, αρχικά παίρνουμε τον ήδη έτοιμο κώδικα της διάλεξης 3 του μαθήματος της υπολογιστικής φυσικής κ στην συνέχεια, αφού αλλάξουμε την ακρίβεια των δεκαδικών ψηφίων με το module της intrinsic και της έτοιμης συνάρτησης iso_fortran_env προσθέτουμε στην subroutine initialize Lattice τις παρακάτω εντολές:

!Calculations:

!We taking that every element in potencial V(x,y) has a zero initial value and also that every place in lattice is not occupied:

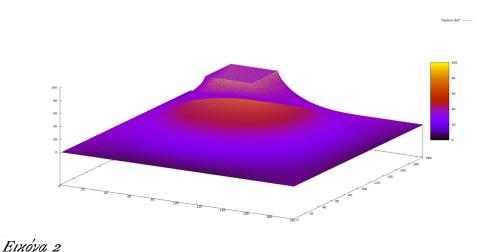
V(:,:)=ZERO !We taking that every element in the matrix has zero value. Also because of contains internal procedure we don't need to declare the variable ZERO again.

isConductor(:,:)=.FALSE. !In most places in our lattice there is not a conductor !-----!
!First we have the outer conductor:

Υπολογιστική Φυσική Ι

```
do i=1,L
    V(\mathbf{1},i)=V\mathbf{1}
    isConductor(1,i)=.TRUE.
    V(i,1)=V_1
    isConductor(i,1)=.TRUE.
    V(i,L)=V_1
    isConductor(i,L)=.TRUE.
    V(L,i)=V_1
    isConductor(L,i)=.TRUE.
end do
!-----
!Next we have tre inner conductor:
do\ i=(2*L/5),(3*L/5)
    V(2*L/5,i)=V_2
    is Conductor(2*L/5,i)=.TRUE.
    V(3*L/5,i)=V_2
    isConductor(3*L/5,i)=.TRUE.
    V(i,2*L/5)=V2
    is Conductor(i, 2*L/5) = .TRUE.
    V(i,3*L/5)=V_2
    isConductor(i,3*L/5)=.TRUE.
end do
!-----
end subroutine initialize lattice
```

Με αυτόν τον τρόπο γίνεται η επιθυμητή μοντελοποιήση του προβλήματός μας. Αφού τρέξουμε τον κώδικα για V1=oV και V2=10oV τότε θα πάρουμε την παρακάτω κατανομή για το δυναμικό του προβλήματος:



Η παραπάνω εικόνα έχει αποθηκευτεί ως test_image.png και παριστάνει την κατανομή του δυναμικού για L1=200 και μας δείχνει ότι έχει γίνει σωστή η μοντελοποιήση του προβλήματος μας μιας κ το δυναμικό στα άκρα του συστήματος παραμένει μηδενικό κ επίσης σχηματίζεται μια τετραγωνική περιοχή με σταθερό δυναμικό V=100V, το οποίο είναι σωστό με βάση την θεωρίας μιας κ το δυναμικό στο εσωτερικό ενός αγωγού παραμένει σταθερό!

Στην συνέχεια για τον υπολογισμό των φορτίων Q1 και Q2 αλλά κ της χωρητικότητας C δημιουργούμε μια νέα subroutine την οποία ονομάζουμε calc_charge_capacity και την καλούμε στο κυρίως πρόγραμμα με την εντολή:

call calc_charge_capacity(V,L1,sigma1,sigma2,Q1,Q2,V1,V2,C)

Επίσης αυτή η subroutine έχει την παρακάτω δομή:

subroutine calc_charge_capacity(V,L,sigma1,sigma2,Q1,Q2,V1,V2,C)

```
implicit none
<u>|-----</u>
!Declaration of variables:
integer
real(dp), dimension(L,L) :: V, sigma1, sigma2
real(dp)
               :: C
            :: V1,V2
real(dp)
real(dp)
           :: Q1,Q2
real(dp),parameter :: ONE=1.0 dp, ZERO=0.0 dp
real(dp), parameter :: PI=atan_2(ZERO, -ONE)
real(dp),parameter
                  :: PI_4=4*PI
integer
             :: i,j
real(dp)
               :: dummy
!Calculations:
!We set initial values for our calculations:
sigma1(:,:)=ZERO !We set all values of the surface density equal to zero because we
```

sigma1(:,:)=ZERO !We set all values of the surface density equal to zero because we have zero charges to the free space

```
sigma2(:,:)=ZERO
```

!Calculate the surface density for the inner conductor and also the charge Q2 with the help of a dummy index:

```
Q_2=Q_2+dummy
    dummy=-(V(3*L/5,i)-V((3*L/5)+1,i))/(PI_4)
    Q_2=Q_2+dummy
    dummy=-(V(i,2*L/5)-V(i,(2*L/5)-1))/(PI_4)
    Q_2=Q_2+dummy
    dummy=-(V(i,3*L/5)-V(i,(3*L/5)+1))/(PI_4)
    Q2=Q2+dummy
  end do
  !Calculate the surface density for the outter conductor and also the charge Q1 with the
help of a dummy index:
  Q_{1}=0.0 dp
  do i=1.L
    dummy=-(V(1,i)-V(2,i))/(PI_4)
    Q_1=Q_1+dummy
    dummy=-(V(i,1)-V(i,2))/(PI_4)
    Q1=Q1+dummy
    dummy=-(V(i,L)-V(i,L-1))/(PI_4)
    Q1=Q1+dummy
```

!-----

!Calculation of the capacity:

 $C=ABS(Q_1/(V_1-V_2))$

Q1=Q1+dummy

end do

end subroutine calc_charge_capacity

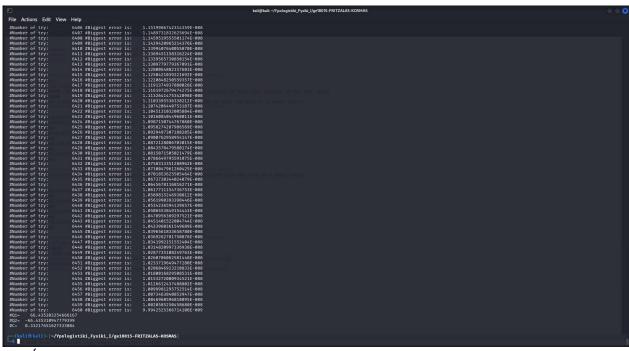
 $dummy=-(V(L,i)-V(L-1,i))/(PI_4)$

Επίσης γράφουμε στο κυρίως πρόγραμμα τις παρακάτω εντολές ώστε να γίνετε η εκτύπωση των φορτίων αλλά κ της χωρητικότητας:

```
print *,'#Q1=',Q1
print *,'#Q2=',Q2
print *,'#C=',C
```

Επίσης στην subroutine print_results τις προσθέτουμε τις καινούργιες μεταβλητές Q1,Q2 και C και στην συνέχεια αποθηκεύονται για λόγους χρήσιμους που θα δούμε σε επόμενο ερώτημα, σε ένα αρχείο με τίτλο charge_capacity.dat

Αφού τρέξουμε το πρόγραμμά μας για L1=100 και για μια τυχαία διαφορά δυναμικού ίση με 200, τότε έχουμε τα εξής αποτελέσματα:

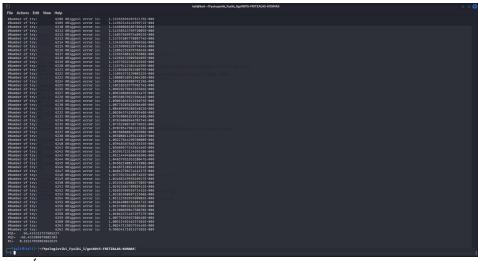


Εικόνα 3

Τώρα θα τρέξουμε τον κώδικά μας για τις παρακάτω τιμές του δυναμικού στους αγωγούς:

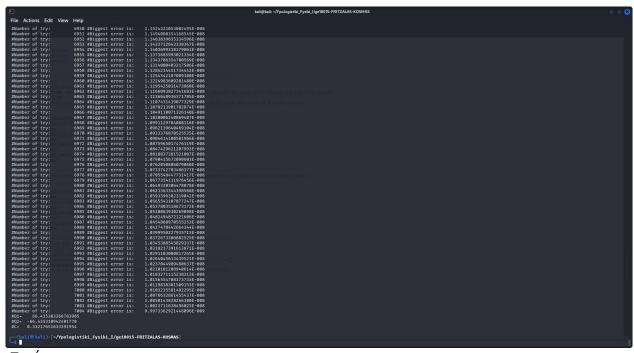
a.
$$V1 = 0$$
, $V2 = 200$
b. $V1 = -100$, $V2 = 100$
c. $V1 = 200$, $V2 = 400$

Έτσι για την περίπτωση α παίρνουμε τα αποτελέσματα της εικόνας 2. Για την περίπτωση β έχουμε τα εξής αποτελέσματα:



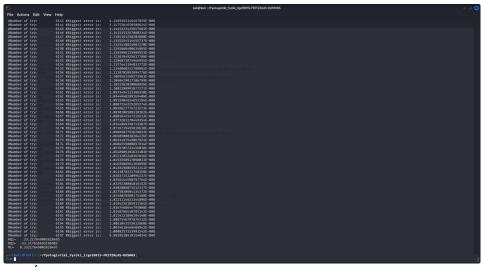
Εικόνα 4

Για την περίπτωση γ έχουμε τα εξής αποτελέσματα:



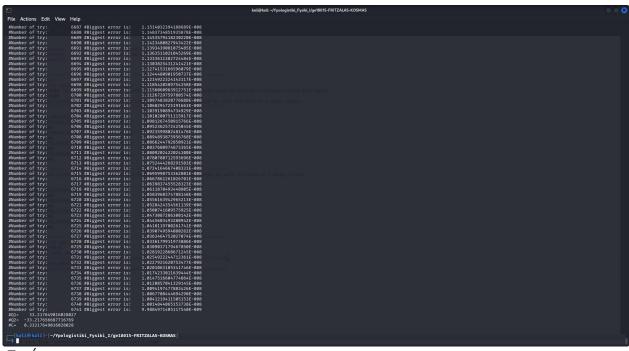
Εικόνα 5

Παρατηρούμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις που πήραμε ισχύει ότι Q1=-Q2. Επίσης τα θετικά φορτία είναι συγκεντρωμένα στον αγωγό με το μικρότερο αριθμητικά δυναμικό, δηλαδή στις παραπάνω τρεις περιπτώσεις στον εξωτερικό τετράγωνο αγωγό. Αυτό οφείλεται κατά γνωστά στην ροή του ηλεκτρικού πεδίου από το υψηλότερο δυναμικό στο χαμηλότερο (δηλαδή τα θετικά φορτία ρέουν από το υψηλό δυναμικό στο χαμηλό) με αποτέλεσμα, γνωρίζοντας ότι το ηλεκτρικό πεδίο κινείται προς το χαμηλότερο δυναμικό, η συγκέντρωση του αρνητικού φορτίου θα είναι στην πλευρά με υψηλότερο δυναμικό. Επίσης ας πάρουμε ότι V1=0 και V2=100 ως πρώτη περίπτωση κ ως δεύτερη περίπτωση ότι V1=100 και V2=200. Για την πρώτη περίπτωση έχουμε τα εξής αποτελέσματα:



Εικόνα 6 Υπολογιστική Φυσική Ι

Για την δεύτερη περίπτωση έχουμε τα εξής αποτελέσματα:



Εικόνα 7

Παρατηρούμε πάλι ότι τα φορτία παρότι είναι διαφορετικά από τις προηγούμενες τρεις περιπτώσεις, δεν αλλάζουν αφού παραμένει σταθερή η διαφορά δυναμικού. Έτσι ανεξάρτητα από τα δυναμικά V1 και V2, έχουμε ότι τα φορτία Q1 και Q2 αλλά κ η χωρητικότητα C του συστήματος, εξαρτώνται μόνο από την διαφορά δυναμικού V1-V2.

BONUS Σχετικά με το ερώτημα 1 χ 2

Παρότι "δείξαμε" εν μέρη ότι ισχύει Q1=-Q2 και ότι τόσο τα φορτία όσο κ η χωρητικότητα C του συστήματος εξαρτώνται μόνο από την διαφορά δυναμικού, καλό θα ήταν να δοκιμάζαμε για ένα εύρος τιμών της διαφοράς δυναμικού, ώστε να δούμε την παραπάνω συμπεριφορά. Έτσι δίνουμε την παρακάτω εντολή φλοιού, ώστε να τρέξει το κυρίως πρόγραμμά μας για διάφορες τιμές της διαφοράς δυναμικού:

```
# Loop for 'a-V1' from o to 1000 with a step of 100

for a in $(seq o 100 1000); do

# Loop for 'b' from 100 to 1000 with a step of 100

for b in $(seq 100 100 1000); do

if [ "$a" != "$b" ]; then

(echo $a; echo $b; echo 1e-8; echo 100;)|./laplace; mv charge_capacity.dat

charge_capacity_{$a}_{$b}.dat;

# You can perform your desired operations here using 'a' and 'b'

fi

done

done
```

Έτσι το πρόγραμμα μας τρέχει για πολλές διαφορές δυναμικού κ κατασκευάζει τα αρχεία με όνομα charge_capacity_{V1}_{V2}.dat με V1=0,100,200,...,1000 και V2=100,200,300,...,1000 (φυσικά έχουμε πάρει τον περιορισμό V1!=V2). Έτσι φτιάχνονται τα παρακάτω αρχεία μας, τα οποία τα έχουμε σε ξεχωριστό φάκελο για να μην υπάρξει σύγχυση στον διδάσκοντα. Έτσι:



Εικόνα 8

Με βάση τις αλλαγές που έχουν γίνει στην subroutine print_results, τα αρχεία που τυπώνονται έχουν μια γραμμή κ 4 στήλες, όπου περιέχουν τα φορτία Q1,Q2, την χωρητικότητα C και την διαφορά δυναμικού ABS(V1-V2). Ο σκοπός μας είναι να τα ενώσουμε σε ένα κοινό αρχείο κ μετά να γίνει το plot στο Gnuplot. Για αυτόν τον λόγο, εκμεταλλευόμενοι την εύκολη χρήση της βιβλιοθήκης Pandas της Python, μπορούμε να κάνουμε Inner Join τα αρχεία μας με το παρακάτω Script:

import os

import pandas as pd

Specify the directory where your DAT files are located

directory = "/home/kali/Ypologistiki Fysiki I/ge18015-FRITZALAS-KOSMAS"

Initialize an empty DataFrame to store the data

combined_data = pd.DataFrame()

```
# Loop through all DAT files in the directory

for filename in os.listdir(directory):

    if filename.endswith(".dat"):

        file_path = os.path.join(directory, filename)

        # Read the DAT file into a DataFrame without changing columns

        data = pd.read_csv(file_path, sep='\t', header=None)

        # Append the data to the combined_data DataFrame

        combined_data = pd.concat([combined_data, data])

# Reset the index of the combined data

combined_data.reset_index(drop=True, inplace=True)

# Specify the path for the new DAT file

output_dat_file = "combined_data.dat"

# Save the combined data to a new DAT file

combined_data.to_csv(output_dat_file, sep='\t', header=False, index=False)

print(f"Combined data saved to {output_dat_file}")
```

Έτσι σαν αποτέλεσμα μετά την εκτέλεση του στο φλοιό (python3 plot.py), να δημιουργηθεί ένα αρχείο με όνομα combined_data.dat. Με μια γρήγορη ματιά παρατηρούμε ότι έχει γίνει πετυχημένα το Inner Join και επίσης, όπως φαίνεται κ στην παρακάτω εικόνα, περιέχει σωστά 100 γραμμές (λόγω της διαμέρισης στα V1 και V2):

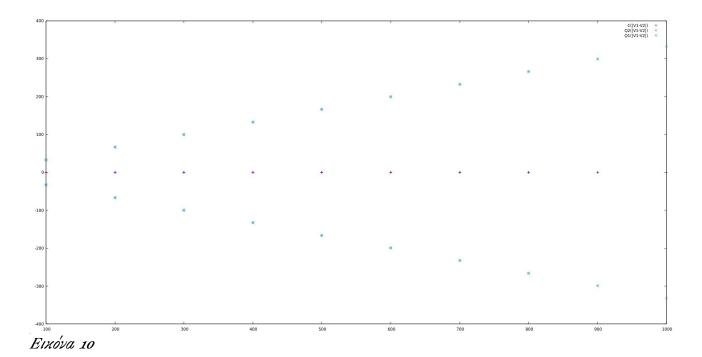
```
En Actions Edit View Holp

File Actions (Edit View Holp

File Acti
```

Εικόνα 9

Τώρα μπορούμε να κάνουμε σε κοινό διάγραμμα τα φορτία Q1,Q2 και την χωρητικότητα του συστήματος C συναρτήσει της διαφοράς δυναμικού |V1-V2|. Έτσι θα έχουμε σχηματικά ότι:



Παρατηρούμε όντως ανεξάρτητα από τα δυναμικά V1 και V2, έχουμε ότι τα φορτία Q1 και Q2 αλλά κ η χωρητικότητα C του συστήματος, εξαρτώνται μόνο από την διαφορά δυναμικού V1-V2. Βέβαια καταλήξαμε κ στην απάντηση του επόμενου ερωτήματος, διότι η σταθερή καμπύλη που περνάει από το σημείο 0.33 περίπου είναι η καμπύλη για την χωρητικότητα του συστήματος, γεγονός που δείχνει ότι η χωρητικότητα μάλιστα είναι ανεξάρτητη της διαφοράς δυναμικού. Τέλος εύκολα καταλήγουμε ότι ισχύει Q1=-Q2.

Ερώτημα 2

Σε αυτό το ερώτημα θα τρέξουμε τον κώδικά μας για διαφορές δυναμικού $\delta V=|V_1-V_2|$ ίσες με 100, 200, 500, 1000 κ 2000 κ ταυτόχρονα θα κρατάμε τις τιμές των φορτίων Q1 και Q1 αλλά και της χωρητικότητας C του συστήματος. Για να το κάνουμε αυτό μπορούμε να δώσουμε την παρακάτω εντολή στον φλοιό:

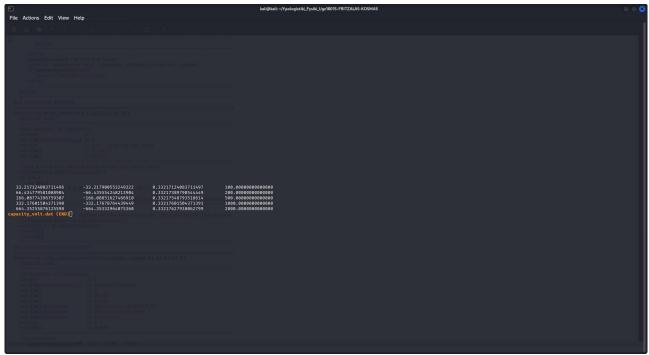
for e in 100 200 500 1000 2000; do (echo o; echo \$e; echo 1e-6;echo 100)|./laplace;mv charge_capacity.dat charge_capacity_\$e.dat; done

Έτσι θα τρέξει ο κώδικας για τις αντίστοιχες τιμές της διαφοράς δυναμικού κ θα παράξει κάθε φορά για την εκάστοτε τιμή, το αντίστοιχο αρχείο με όνομα charge capacity δV.dat. Στην

συνέχεια θέλουμε να ενώσουμε όλα τα παραπάνω αρχεία μας σε ένα. Η αντίστοιχη εντολή στον φλοιό είναι η παρακάτω:

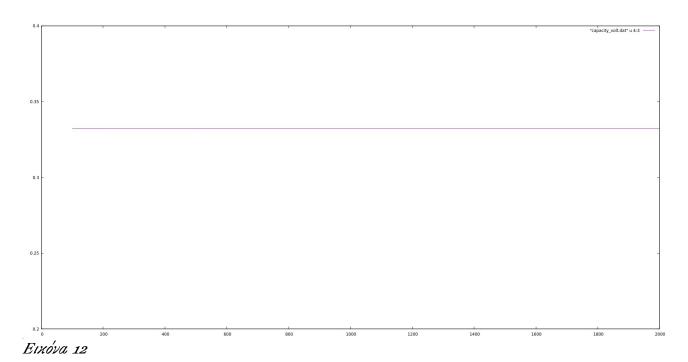
for e in 100 200 500 1000 2000; cat charge_capacity_\$e.dat >> capacity_volt.dat

Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να φτιαχτεί ένα ενιαίο αρχείο με τις αντίστοιχες τιμές των φορτίων, της χωρητικότητας κ της διαφοράς δυναμικού. Έτσι έχουμε τις παρακάτω τιμές:



Εικόνα 11

Παρατηρούμε ότι κ πάλι, όπως κ στο ερώτημα 1, υπάρχει εξάρτηση των φορτίων Q1 και Q2 από την διαφορά δυναμικού, αλλά κ ισχύει ότι Q1=-Q2. Ωστόσο αυτό που παρατηρούμε επίσης είναι ότι η χωρητικότητα C του συστήματος είναι ανεξάρτητη από την διαφορά δυναμικού, αφού παραμένει σταθερή μέχρι το 5ο δεκαδικό ψηφίο. Τώρα άμα κάνουμε την γραφική παράσταση C(V=|V1-V2|) θα έχει την παρακάτω μορφή:



Ερώτημα 3

α) Τώρα μας δίνεται από την εκφώνηση ότι η χωρητικότητα C του συστήματος είναι συνάρτηση του L1 που εκφράζει κατά τα γνωστά την διαμέριση του τετραγωνικού πλέγματος του προβλήματός μας. Θέλουμε να φτιάξουμε έναν κώδικα που να υπολογίζει τις τιμές της χωρητικότητας για μια τυχαία διαμέριση του αριθμού L1 και στην συνέχεια να εκτυπώνει σε ένα αρχείο τύπου .dat τους αριθμούς L1 με τους αντίστοιχους αριθμούς της χωρητικότητας C. Αυτό θα γίνει χρησιμοποιώντας τον ήδη υπάρχοντα κώδικα που έχουμε αλλά κάνοντας μια τροποποίηση στην subroutine print_results. Αυτό που θα κάνουμε είναι να προσθέσουμε ένα αρχείο με όνομα C_L.dat το οποίο θα αποθηκεύει απλά την τιμή της χωρητικότητας κ το μήκος L1. Έτσι θα έχουμε τον παρακάτω κώδικα:

```
!Have a file with the capacity of the system of conductors and the length of our system: open(unit=13,file="C_L.dat") write(13,*) L,C close(13)
```

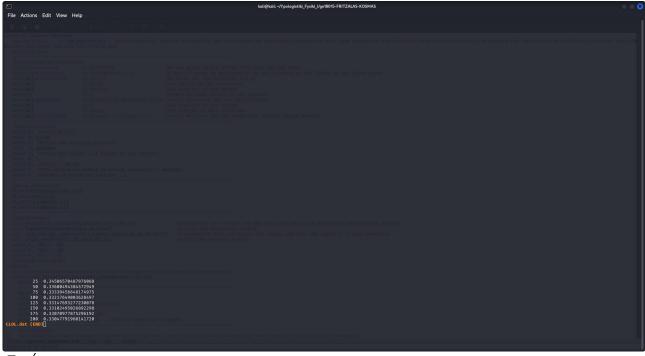
Στην συνέχεια θα τρέξουμε την διαμέριση για τα μήκη L1 στον φλοιό με την παρακάτω εντολή:

```
for e in $(seq 25 25 200); do (echo o; echo 100; echo 1e-8;echo $e)|./laplace; mv C_L.dat C_L_$e.dat; done
```

Με αυτόν τον τρόπο θα μας προκύψουν αρχεία με όνομα C_L_L1.dat τα οποία, όπως έχουμε δει και πριν θα πρέπει να τα ενώσουμε σε ένα κοινό αρχείο. Έτσι με την παρακάτω εντολή στο φλοιό, μπορούμε να τα ενώσουμε:

for e in \$(seq 25 25 200); cat C_L_\$e.dat >> CLOL.dat

Έτσι τελικά θα μας προκύψει ένα αρχείο που ονομάζεται CLOL.dat και περιέχει τις ζητούμενες τιμές. Μια επισκόπησή του φαίνεται στην παρακάτω εικόνα:

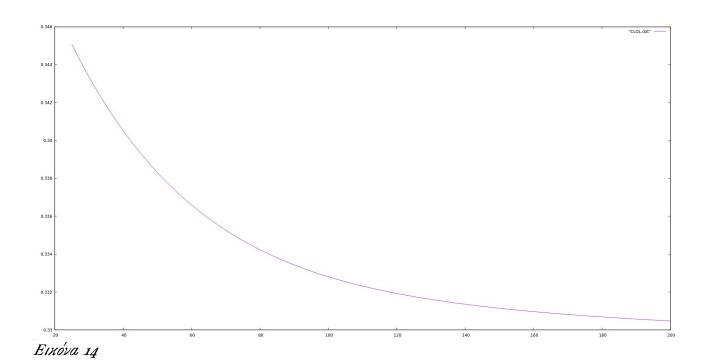


Εικόνα 13

β) Με βάση το αρχείο CLOL.dat που προέκυψε από τον κώδικα, αφού δώσουμε την παρακάτω εντολή στο gnuplot:

plot "CLOL.dat" smooth sbezier

Προκύπτει η παρακάτω γραφική παράσταση για το C(L1):



Παρατηρούμε ότι με την αύξηση του L1, έχουμε μια εκθετική μείωση της χωρητικότητας C, το οποίο είναι σύμφωνο με το ερώτημα γ, όπως θα δούμε παρακάτω.

γ) Για να γίνει η προσαρμογή των δεδομένων από το αρχείο set1.dat στην θεωρητική συνάρτηση που μας δίνετε στο ερώτημα, δίνουμε τις παρακάτω εντολές στο gnuplot:

```
gnuplot> f(x) = C - a * exp(-b * x)
gnuplot> C=0.33; a = 1; b = 0.01
gnuplot> fit [75:200] f(x) "set1.dat" using 1:2 via a,b,C
gnuplot> plot "set1.dat" using 1:2, f(x)
```

Με την εκτέλεση των παραπάνω εντολών, προκύπτουν τα εξής αποτελέσματα:



Εικόνα 15

Με βάση τα παραπάνω αποτελέσματα, η συνάρτηση $C(L_1)$ συγκλίνει στην παρακάτω χωρητικότητα:

C = 0.33017

Επίσης η θεωρητική καμπύλη σε κοινό διάγραμμα με τα δεδομένα φαίνεται παρακάτω:

