Projekty, Jarná škola FX

K. Bahyl, M. Badin, P. Vanya

Marec 2016

Prinášame zoznam projektov, ktorým sa budete venovať popri prednáškach.

Prečo

Vedecký výskum sa nedeje podľa skrípt a prednášok. Vyžaduje si samostatný prístup, boj s frustráciou a nepochopením a neustále nachádzanie riešení pokusom a omylom, pýtaním sa správnych otázok a gúglením.[1]

Okrem toho, súčasná veda sa do robí nielen s perom a papierom v ruke alebo s drahými experimentálnymi prístrojmi, ale na počítačoch. Práci s počítačom sa však na stredných aj vysokých školách venuje neadekvátne málo času.

A práve pre tieto dôvodody sme pre vás pripravili samostatné počítačové projekty.

Pretože v realite treba vedieť programovať vo viacerých jazykoch (Fortran, C, Python, Matlab). Veľká väčšina vedy beží v prostredí Linuxu, čo znamená používanie príkazového riadku (jazyk nazývaný `bash`) a v ňom programov `sed` a `awk`. Nebojte sa, všetko sa časom naučíte. Čím skôr začnete, tým skôr budete môcť dobýjať svet svojimi vedeckými myšlienkami.

Čo je cieľom

- Priblížiť reálny výskum a radosti/starosti s ním spojené; zažiť samostatnú prácu s otvoreným koncom bez dokonale jasného cieľa a v obmedzenom čase,
- *dokončiť* niečo (aspoň sa pokúsiť) a mať z toho dobrý pocit,
- vyskúšať si prezentovanie a obhajovanie výsledkov pred publikom (k prezentáciám si ešte časom povieme viac).

Ako na to

K dispozícii máte štyri až päť poobedí po 3-4 hodinách, čo dokopy dáva asi 20 hodín času. Jeden projekt je na troch ľudí, čo dokopy robí 60 hodín.

Programovať budete v prostredí Linuxu. Ak ste ešte moc neprogramovali, vyberte si jazyk, ktorý už trochu viete. Ak zatiaľ žiadny neviete, vyberte si taký, ktorý sa za pár hodín naučíte. Tiež sa môžete poradiť s kamarátom alebo organizátormi.

Ak stále neviete, ako začať, máte k dispozícii:

1. literatúru, ako napr. prednášky z minuloročnej Jarnej školy FX[2] alebo fykosí Uvod do programování,[3]
2. nás, organizátorov, čo vám radi poradíme,
3. kembridžské vysokoškolské skriptá na C++ a trochu Pythonu (na požiadanie),

[1] Pre viac informácií použime komiks: `explosm.net/comics/3557`
[2] `fks.sk/fx/jarnaskola14.php`, zvlášť odporúčame 1. a 2. problem sheet
[3] `fykos.cz/rocnik21/serial/fykos_uvod_do_programovani.pdf`

4. gúgl. Gúgl je váš kamarát. Ak niečo neviete spraviť na počítači, je obrovská šanca, že niekto tento problém už riešil pred vami. Existuje portál `stackoverflow.com`, kde sa združujú otázky a odpovede ohľadom programovania.

Výber textového editoru je na vás, pre začiatok postačí Gedit, Jedit alebo Sublime. Programovacie jazyky sa (na Linuxe) inštalujú nasledovne:

- Matlab, resp. Octave:

```
$ sudo apt-get install octave
```

- C/C++:

```
$ sudo apt-get install gcc
$ sudo apt-get install g++
```

- Python máte predinštalovaný, veľmi ešte pomôžu nasledovné knižnice:

```
$ sudo pip3 install numpy scipy matplotlib
```

Ak niečo neviete, pýtajte sa, sme tu pre vás. Držíme palce!

1 Numerika v skúmavke

[FX úloha z roku 2008.] Voda sa nachádza v skúmavke s polomerom 1 cm. Nájdite kontaktný uhol medzi povrchom a sklom, a prevýšenie hladiny vody na kraji a v strede skúmavky. Vykreslite tvar povrchu.

1.1 Ako na to

1. Zamyslite sa, ako reprezentovať „krivosť“ hladiny.
2. Odvoďte vzťah pre objem s danou „krivosťou“ a povrchovú energiu vody. Naprogramujte relevantné funkcie.
3. Minimalizujte energiu vzhľadom na konštatný objem. Nájdite vhodné funkcie z knižnice Scipy a aplikujte ich.

Energia voda-vzduch je 70 mJ/m^2, voda-sklo 40 mJ/m^2 a vzduch-sklo 100 mJ/m^2.

2 Isingov model na trojuholníkovej mriežke

Isingov model je dobre známy z FX. Popisuje systém interagujúcich spinov na mriežke v závislosti od teploty. Je to najjednoduchší model, kde možno pozorovať feromagnetizmus (spontánnu magnetizáciu systému).

Energia systému je definovaná ako

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j,$$

kde $S_i = \pm 1$, a značenie $\langle\rangle$ znamená, že sčítavame len cez najbližších susedov. Magnetizácia (magnetický moment na objem) je

$$M = \langle S_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i S_i.$$

V tomto projekte si najskôr vyriešime dvojrozmerného Isinga na rôznych mriežkach.

2.1 Štvorcová mriežka

Na začiatok skúsime niečo ľahšie – model na štvorcovej mriežke.

Položte $J = 1$ a nasimulujte vývoj energie a magnetizácie v závislosti od teploty. Začneme s náhodne rozmiestnenými spinmi, a pre každú teplotu spravíme veľa (10 000) krokov v súlade s **Metropolisovým algoritmom**:

1. Otočme jeden spin, $\pm 1 \to \mp 1$. Zmerajme zmenu energie mriežky v dôsledku otočenia δE.
2. Ak $\delta E < 0$, zmenu prijmime,
3. Ak $\delta E > 0$, zmenu prijmime s pravdepodobnosťou $\exp(-\delta E/T)$, kde T je teplota. (Vidno, že pre vyššie teploty budeme prijímať viac a viac pozitívnych energetických zmien, čo je simulácia teplotných fluktuácií.)

Ako zvyšujeme teplotu (z 0 na 3), magnetizácia by mala polynomiálne ustupovať:

$$M \sim |T_\mathrm{c} - T|^\nu.$$

Zistite exponent ν.

2.2 Trojuholníková mriežka

Keď zmeníme mriežku, zmení sa počet najbližších susedov (ako?), a tak môžeme pozorovať rozdielne správanie. ustupovať podľa Zopakujte postup ako v prípade štvorcovej mriežky. V čom budú rozdiely? Porovnajte kritickú teplotu a nástup magnetizácie.

3 Dynamické systémy a chaos

3.1 Chaos

V 40. rokoch 20. storočia sa znudený pán Feigenbaum v Los Alamos hral s kalkulačkou. Zistil, ze postupnosť definovaná ako

$$r_n = ar_{n-1}(1 - r_{n-1}),$$

kde $r(0)in[0,1]$, sa pre zvysujuce sa $ain[3,3.5]$ začne správať chaoticky. Tento objav možno považovať za medzník v teórii chaosu.

3.2 Dynamický systém

Ako možno modelovať vývoj populácie zvierat v čase? Prestavme si systém predátor-obeť (napr. zajac a rys kdesi na Aljaške). Lotka a Volterra na začiatku 20. storočia navrhli nasledovný systém rovníc pre vývoj populácií obete x a predátora y:

$$\frac{dx}{dt} = ax - bxy,$$
$$\frac{dy}{dt} = dxy - cy,$$

kde parametre a, b, c, d (vsetky pozitívne) popisujú interakciu medzi obeťou a predátorom.

Úlohou je namodelovať takýto systém a zistiť, ako sa vyvíja v čase pre rôzne hodnoty parametrov. Ak je systém nejakým spôsobom periodický, odmerajte periódu.

3.3 Lorenzov atraktor

Pán Lorenz sa v 60. rokoch na meteorologickom ústave na MIT snažil nasimulovať nasledovný systém diferenciálnych rovníc ako model atmosférického prúdenia:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(x - y),$$
$$\frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y,$$
$$\frac{dz}{dt} = xy - \beta z,$$

kde σ, ρ, β sú parametre. Lorenz na začiatku použil hodnoty 10, 8/3, 28.

1. Numericky vyriešte tieto rovnice a preskúmajte, čo sa stane pri týchto hodnotách pre rôzne počiatocné podmienky x, y, z.

2. Čo sa stane pre $\rho = 1$?

3. Preskúmajte rôzne hodnoty σ, ρ, β, teda celý fázový priestor, na logaritmickej škále (po násobkoch 10) a zistite, kde systém konverguje do nejakých bodov, kde osciluje a kde diverguje. Na základe týchto pozorovaní vytvorte fázový diagram.

4 Kyvadlo hore nohami

[FX úloha z roku 2013.] Majme matematické kyvadlo o hmotnosti m na paličke o dĺžke l. Palička je pripevnená na motorček, ktorý vykonáva perodické kmity s výchylkou $x(t)$:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t).$$

Pre jednoduchosť uvažujme len prípady, kedy $x_0 \ll L$. Ak je frekvencia motorčeka ω dostatočne veľká a kyvadlo je hore nohami, kyvadlo nespadne nadol, ale bude zvláštne kmitať okolo zvislej polohy.

1. Pokúste sa analyticky odvodiť vzťah pre periódu oscilácií paličky okolo zvislej polohy, za priblíženia $q \gg 1/\sqrt{x_0}$.

2. Preskúmajte, pre aké hodnoty bezrozmerných parametrov $p = x_0/L$ a $q = \omega/\omega_0$ (kde definujeme $\omega_0 = \sqrt{g/l}$), je poloha kyvadla hore nohami stabilná.