ΦΥΣ 347 – Χειμερινό Εξάμηνο 2018

Τελική Εξέταση

Τετάρτη, 12 Δεκέμβρη Διάρκεια εξέτασης: **14:30 –18:30**

Θα πρέπει να δουλέψετε όλες τις ασκήσεις μόνοι σας χωρίς να συζητήσετε τα αποτελέσματα και τον κώδικά σας παρά μόνο με τον εαυτό σας και ίσως εμένα αν έχετε απορίες.

Θα πρέπει ο κώδικάς σας να είναι ευανάγνωστος και να περιέχει απαραίτητα σχόλια που εξηγούν τι κάνετε.

Θα πρέπει να κάνετε τις γραφικές που ζητούνται χρησιμοποιώντας το λογισμιμό ROOT και να τις αποθηκεύσετε σε pdf μορφή.

Στο τέλος της εξέτασης θα πρέπει να επιστρέψετε μέσω e-mail (fotis@ucy.ac.cy), το κώδικα που αντιστοιχεί σε κάθε άσκηση, τα σχετικά γραφήματα και dat ή text files που ζητούνται σε ένα tar zipped της μορφής *username_final.tgz,* όπου username είναι το username σας στο e-mail του πανεπιστημίου.

Σημειώστε ότι είναι δική σας ευθύνη να μου στείλετε το tgz file. Σε περίπτωση λάθους και μετά το τέλος της εξέτασης δεν θα γίνουν δεκτές μεταγενέστερες αποστολές ανάλογων αρχείων όπως και οποιεσδήποτε προσθήκες, ή αλλαγές στο tgz file.

Καλή Επιτυχία

1. Γνωρίζουμε ότι ο πληθυσμός ενός είδους ζώων περιγράφεται από μια συνάρτηση $N(t)$ (συνάρτηση του χρόνου, t, όπου t μετράται σε μήνες) η οποία αποτελεί λύση της διαφορικής εξίσωσης: $\frac{dN}{dt} = aN - bN^2$, όπου α και b είναι θετικές σταθερές ποσότητες. Όταν b = 0, ο πληθυσμός αυξάνει εκθετικά, αλλά όταν b > 0 ο δεύτερος όρος εισάγει μια μείωση του πληθυσμού σαν αποτέλεσμα ανταγωνισμού μεταξύ ζευγαριών του πληθυσμού. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Runge-Kutta 4^{ης} τάξης λύστε αριθμητικά το πρόβλημα αυτό για τις ακόλουθες δύο περιπτώσεις: (i) $\alpha = 10$, $b = 3$ και $N(0) = 10$ και (ii) $\alpha = 10$, $b = 0.01$ και $N(0) = 1000$ [**14μ**]. Με βάση τα αποτελέσματά σας να γίνουν οι αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις του πληθυσμού, $N(t)$, συναρτήσει του χρόνου t [**5μ**]. Τα αποτελέσματα εξαρτώνται από το χρονικό βήμα που επιλέγεται. Διαλέξτε ένα κατάλληλο βήμα και συνολικό χρόνο μελέτης της εξέλιξης του πληθυσμού για να εξάγετε τα αποτελέσματά σας. Η παραπάνω διαφορική εξίσωση έχει αναλυτική λύση της μορφής $N(t) = \frac{N_0 a e^{at}}{a - bN_0 + bN_0 e^{at}}$, όπου $N(t = 0) = N_0$ Συγκρίνετε γραφικά τα αποτελέσματά σας με τη θεωρητική αυτή λύση Θα πρέπει το γράφημά σας να έχει κατάλληλα ονοματισμένους άξονες. Σχολιάστε τη γραφική παράσταση στη δεύτερη περίπτωση [**1μ**].

2. Θεωρήστε ότι ένα μικρό χαλίκι εκτεινάσεται κατακόρυφα προς τα πάνω (θεωρήστε την φορά προς τα πάνω σα την $+y$) με αρχική ταχύτητα υ_0. Σε συνθήκες έλειψης αντίστασης του αέρα ξέρουμε ότι η πέτρα θα ανέβει σε ένα ύψος $\frac{\upsilon_0^2}{2g}$, ενώ η ταχύτητα με την οποία επιστρέφει στο έδαφος είναι και ίδια με την αρχική της ταχύτητα υ_0 και ο χρόνος ανόδου είναι ίσος με το χρόνο καθόδου. Πριν κάνετε οποιαδήποτε αριθμητική επίλυση του προβλήματος δώστε μια απλή ποιοτική εξήγηση για το πως νομίζετε ότι θα επηρεαστούν οι ποσότητες αυτές με την παρουσία αντίστασης του αέρα. Ιδιαίτερα εξηγήστε πως θα διαφέρει ο χρόνος ανόδου από το χρόνο καθόδου (μεγαλύτερος, μικρότερος ή ίδιος). Γράψτε τις απαντήσεις σας σαν σχόλιο στο πρόγραμμα που θα επιστρέψετε).
Θα κάνετε τώρα μια αριθμητική επίλυση του προβλήματος για να δείτε αν οι απαντήσεις σας ήταν σωστές. Για την επίλυση του προβλήματος θα χρησιμοποιήσετε τη μέθοδο Runge-Kutta 4^{ης} τάξης. Για το πρόβλημα που έχετε να επιλύσετε υποθέστε ότι η αντίσταση του αέρα είναι ανάλογη του τετραγώνου της ταχύτητας, υ^2. Θεωρήστε ότι η μάζα της πέτρας είναι 10^{-2} kg, η ακτίνας της $0.01m$ με αποτέλεσμα η σταθερά αντίστασης να είναι $D = 10^{-2}$ kg οπότε η δύναμη της αντίστασης του αέρα δίνεται από την σχέση $F_D = -mD\upsilon^2$. Θεωρήστε ότι

η πέτρα ρίχνεται με αρχική ταχύτητα $\upsilon_0 = 50\, m/s$. Το πρόγραμμά σας θα πρέπει να υπολογίσει το χρόνο ανόδου και το χρόνο καθόδου, το μέγιστο ύψος στο οποίο φθάνει η πέτρα και να κάνει τη γραφική παράσταση της συνισταμένης δύναμης συναρτήσει της ταχύτητας υ. Θα πρέπει να αποθηκεύσετε το γράφημα αυτό σε μορφή pdf με όνομα *stone.pdf*. Θα πρέπει να γράψετε σε ένα διαφορετικό file (*stone.dat*) τα αποτελέσματα που σας ζητούνται (χρόνος ανόδου, καθόδου και μέγιστο ύψος).

3. Θεωρήστε ένα κουτί χωρισμένο σε 2 ίσα μέρη χωρισμένα με ένα τοίχωμα. Τη χρονική στιγμή t = 0 υπάρχουν N σωματίδια στο αριστερό μέρος του κουτιού. Στο τοίχωμα υπάρχει μια μικρή τρύπα από την οποία μπορεί να περάσει 1 σωματίδιο ανά μονάδα χρόνου. Μετά από κάποιο χρονικό διάστημα το σύστημα έρχεται σε ισορροπία όπου ο ίδιος αριθμός σωματιδίων, N/2, υπάρχει και στα 2 μέρη του κουτιού. Για να προσομοιώσουμε το σύστημα αυτό, το οποίο μπορεί να αποτελείται από $N >> 1$ σωματίδια, υποθέτουμε ότι όλα τα σωματίδια στο αριστερό μέρος του κουτιού έχουν την ίδια πιθανότητα να περάσουν στο δεξί μέρος. Εισάγουμε το συμβολισμό n_L που δείχνει τον αριθμό σωματιδίων στο αριστερό τμήμα του κουτιού σε κάθε χρονική στιγμή, ενώ $n_R = N - n_L$ είναι ο αριθμός των σωματιδίων στο δεξί τμήμα του κουτιού. Η πιθανότητα για να μετακινηθεί ένα σωματίδιο στο δεξί μέρος το χρονικό διάστημα Δt είναι n_L / N. Ο αλγόριθμος για να προσομοιώσουμε το πρόβλημα αυτό είναι ο ακόλουθος:

(i) Επιλέγουμε τον αριθμό των σωματιδίων N στο κουτί.

(ii) Εκτελούμε ένα loop ως προς το χρόνο, όπου ο μέγιστος χρόνος πρέπει να είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό, N, των σωματιδίων.

(iii) Για κάθε χρονικό βήμα, Δt, υπάρχει πιθανότητα n_L / N για να κινηθεί κάποιο σωματίδιο προς τα δεξιά. Η πιθανότητα αυτή θα πρέπει να συγκριθεί με κάποιο τυχαίο νούμερο, x.

(iv) Αν $x \le n_L / N$ τότε ελαττώνουμε τον αριθμό των σωματιδίων n_L που βρίσκονται στο αριστερό τμήμα του κουτιού κατά 1 σωματίδιο, οπότε: $n_L = n_L - 1$. Διαφορετικά θα πρέπει να μετακινήσουμε ένα σωματίδιο από δεξιά προς τα αριστερά και να αυξήσουμε τον αριθμό n_L κατά ένα σωματίδιο, δηλαδή $n_L = n_L + 1$.

(v) Αυξάνουμε τον χρόνο κατά μια μονάδα και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία.
Στην περίπτωση αυτή ένα δείγμα Monte Carlo αντιστοιχεί σε μια χρονική μονάδα Δt.

Γράψτε ένα πρόγραμμα το οποίο χρησιμοποιεί τον παραπάνω αλγόριθμο για την περίπτωση του προβλήματος που περιγράφηκε. Θεωρήστε σαν μέγιστο χρόνο $10 \times N$ και αρχικό αριθμό σωματιδίων, N=1000. Θα πρέπει να βρείτε ότι μετά από περίπου 2000 βήματα το σύστημα έχει φθάσει σε ισορροπία. Να κάνετε το γράφημα του $n_L(t)$ συναρτήσει του χρόνου.

Το πρόβλημα αυτό έχει αναλυτική λύση την οποία μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε για να συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας. Αν $n_L(t)$ είναι ο αριθμός των σωματιδίων στο αριστερό μέρος του κουτιού μετά από *t* κινήσεις, η αλλαγή στο $n_L(t)$ το χρονικό διάστημα Δt είναι:

$$\Delta n_L = \left(\frac{N - n_L(t)}{N} - \frac{n_L(t)}{N} \right) \Delta t$$

Υποθέτοντας ότι τα $n_L(t)$ και *t* είναι συνεχείς μεταβλητές, καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\frac{dn_L(t)}{dt} = 1 - \frac{2n_L(t)}{N}$$

Η λύση αυτής της διαφορικής εξίσωσης είναι: $n_L(t) = \frac{N}{2}\left(1 + e^{-2t/N}\right)$ με αρχική συνθήκη, $n_L(t=0) = N$.

4. Η μέθοδος Metropolis αποτελεί μία μέθοδο δημιουργίας ακολουθίας τυχαίων αριθμών που κατανέμονται σύμφωνα με μια γενική συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (pdf), $f(x)$. Η μέθοδος δημιουργεί μια ακολουθία τυχαίων αριθμών $x^{[0]}$, $x^{[1]}$, $x^{[2]}$,…, που ασυμπτωτικά κατανέμονται σύμφωνα με την συνάρτηση $f(x)$. Για να το κατορθώσουμε αυτό, ξεκινάμε με μια αρχική κατάσταση $x^{[0]}$ (στην περίπτωση δημιουργίας ακολουθίας τυχαίων αριθμών με κάποια αρχική τιμή που θα αποτελέσει και τον σπόρο (seed) της ακολουθίας), και λαμβάνουμε από αυτή μία νέα προτεινόμενη κατάσταση $x^{[1]}$, η οποία μπορεί να γίνει δεκτή ή να απορριφθεί ως αποδεκτή κατάσταση της ακολουθίας ή της αλυσίδας Markov με βάση κάποια συγκεκριμένη πιθανότητα. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται όσες φορές χρειάζεται. Σε κάθε *i*-βήμα, η τιμή $x^{[i+1]}$, προκύπτει από την $x^{[i]}$, χρησιμοποιώντας κάποιον απλό αλγόριθμο: $x^{[\mathrm{test}]} = x^{[i]} + q(x)$, όπου $q(x)$ μια προτεινόμενη συνάρτηση αλλαγής. Στην απλούστερη περίπτωση θα μπορούσαμε να είχαμε $q(x) = \zeta \Delta x$, όπου ζ είναι ένας τυχαίος αριθμός στο διάστημα [-1,1) και Δx είναι τυχαίο διάστημα. Στην τελευταία αυτή περίπτωση θεωρούμε ότι το σύστημα ή η ακολουθία μπορεί να κινηθεί με την ίδια πιθανότητα δεξιά ή αριστερά της τιμής $x^{[i]}$. Η *προτεινόμενη* αυτή κατάσταση ή νέα τιμή γίνεται αποδεκτή σαν μια νέα κατάσταση στην αλυσίδα Markov (ή ακολουθία των τυχαίων αριθμών), με πιθανότητα $r = \frac{pdf\left(x^{[test]}\right)}{pdf\left(x^{[i]}\right)} = \frac{f\left(x^{[test]}\right)}{f\left(x^{[i]}\right)}$. Αυτό σημαίνει ότι παίρνουμε έναν τυχαίο αριθμό $\xi \in [0,1)$ τέτοιον ώστε: $\begin{cases} x^{[i+1]} = x^{[test]} & \alpha\nu \;\; r > \xi \\ x^{[i+1]} = x^{[i]} & \alpha\nu \;\; r < \xi \end{cases}$. Θα πρέπει ωστόσο να λάβουμε υπόψη ότι:

(α) Η μέθοδος δημιουργεί τυχαίους αριθμούς σύμφωνα με την pdf $f(x)$ μόνο ασυμπτωτικά. Θα χρειαστούμε επομένως, να «προθερμάνουμε» τον αλγόριθμο ώστε να έχουμε φθάσει στην ασυμπτωτική περιοχή και κατόπιν να αρχίσουμε να αποδεχόμαστε αριθμούς της ακολουθίας.

(β) Η τιμή του διαστήματος Δx συνήθως λαμβάνεται με τέτοιο τρόπο ώστε το 50% των εξεταζόμενων αριθμών είναι αποδεκτό. Αυτό βοηθά σε γρήγορη σύγκλιση στην ασυμπτωτική περιοχή.

(γ) Η μέθοδος βασίζεται μόνο στον λόγο $r = f\left(x^{[test]}\right) \big/ f\left(x^{[i]}\right)$. Ειδικότερα, το r δεν εξαρτάται από την κανονικοποίηση της συνάρτησης κατανομής και αυτή η ιδιότητα κάνει τον αλγόριθμο Metropolis ιδιαίτερα χρήσιμο στην στατιστική φυσική.

(δ) Ο αλγόριθμος Metropolis μπορεί να επεκταθεί και σε περισσότερες από μια τυχαίες μεταβλητές $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, x_3,\ldots)$. Στην περίπτωση αυτή λαμβάνουμε μια ακολουθία διανυσμάτων $\boldsymbol{x}^{[0]}, \boldsymbol{x}^{[1]},\ldots$, ενώ δημιουργούμε διανύσματα test: $\boldsymbol{x}^{[\mathrm{test}]}=\boldsymbol{x}^{[i]} + \zeta\Delta\boldsymbol{x}$, όπως και πριν.

Με βάση τα παραπάνω θα πρέπει να γράψετε ένα πρόγραμμα το οποίο θα κατασκευάζει τυχαίους αριθμούς σύμφωνα με τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f\left(x\right) \propto e^{-x^4}$ στο διάστημα $\left(-\infty,+\infty\right)$. Οι μέθοδοι ολοκλήρωσης ή παραγωγής τυχαίων αριθμών που ξέρετε δεν δουλεύουν στην περίπτωση αυτή ή είναι ιδιαίτερα μή αποδοτικές. Θεωρήστε ότι έχετε την περίπτωση $f\left(x\right) = ce^{-x^4}$ με σταθερά c τέτοια ώστε $\int_{-\infty}^{+\infty} f\left(x\right)dx = 1$. Η τιμή της σταθεράς c δεν παίζει ρόλο στη μέθοδο Metropolis. Ωστόσο μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή της για να συγκρίνουμε με την κανονικοποιημένη συνάρτηση κατανομής. Το κανονικοποιημένο ολοκλήρωμα μπορεί να εκφραστεί συναρτήσει της συνάρτησης Γ κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $t = x^4$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^4}\, dx = 2\int_0^{+\infty} e^{-x^4}\, dx = \frac{1}{2}\int_0^{+\infty} t^{-3/4} e^{-t}\, dt = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 1.8218$$

Το πρόγραμμά σας θα πρέπει να περιέχει ένα στάδιο προθέρμανσης παραγωγής τυχαίων αριθμών αλλά και το στάδιο στο οποίο επιλέγεται το βήμα Δx ώστε το ποσοστό αποδοχής να είναι γύρω στο 50%. Αυτό θα πρέπει να πραγματοποιηθεί κατά τη διάρκεια της περιόδου προθέρμανσης υπολογίζοντας τον ρυθμό αποδοχής κατά την διάρκεια της προσομοίωσης και αλλάζοντας το Δx ανάλογα με το πως αλλάζει ο ρυθμός αποδοχής: αν λιγότερο από 50% τότε το Δx θα πρέπει να ελαττωθεί, αυξάνοντας τον ρυθμό αποδοχής, ή το ανάποδο. Θα πρέπει να κάνετε το γράφημα της συνάρτησης κατανομής πιθανότητας που λαμβάνετε για την ακολουθία των τυχαίων αριθμών που παράγετε με το πρόγραμμά σας. Δείξτε την κατανομή που λαμβάνετε για 3 διαφορετικές τιμές συνολικών Monte Carlo δοκιμών (10^3, 10^5, 10^7).