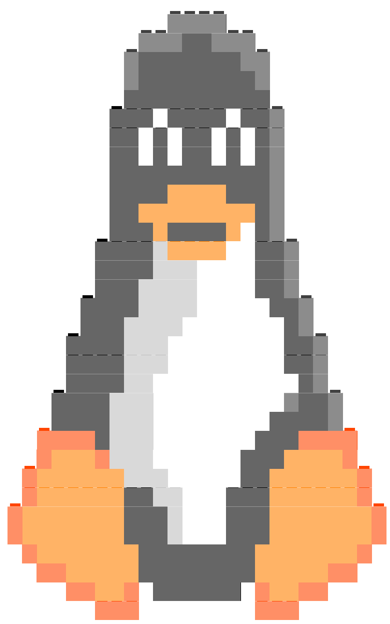
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΦΥΣ 140 Εισαγωγή στην Επιστημονική Χρήση Υπολογιστών
Χειμερινό Εξάμηνο 2023

Φώτης Πτωχός και Αλέξανδρος Αττίκης

Φροντιστήριο 11

21 Νοεμβρίου 2023
15:00 - 17:00



Φροντιστήριο 11

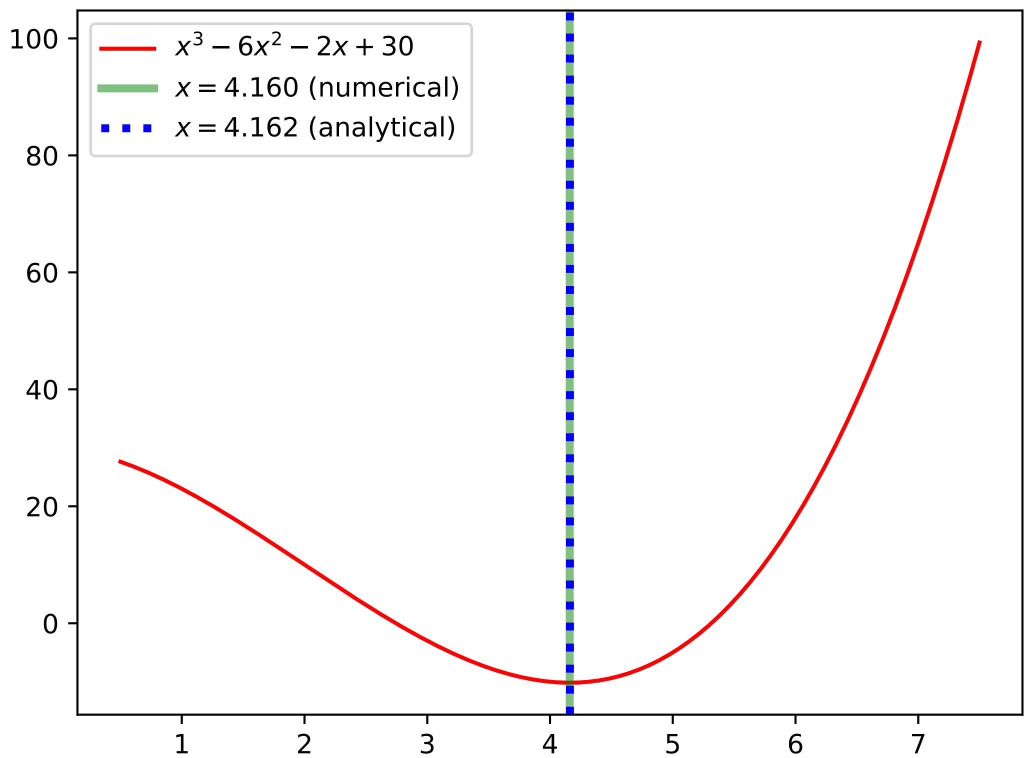
Παράδειγμα 1 Παράδειγμα εύρεσης ακροτάτων της συνάρτησης $f(x) = x^3 - 6x^2 - x + 1$ στο διάστημα $x = [0, 5]$. Η ακριβής λύση είναι $f_{min} = -10.16230$ για $x = 4.16025$:

tutorial11/ex3.py

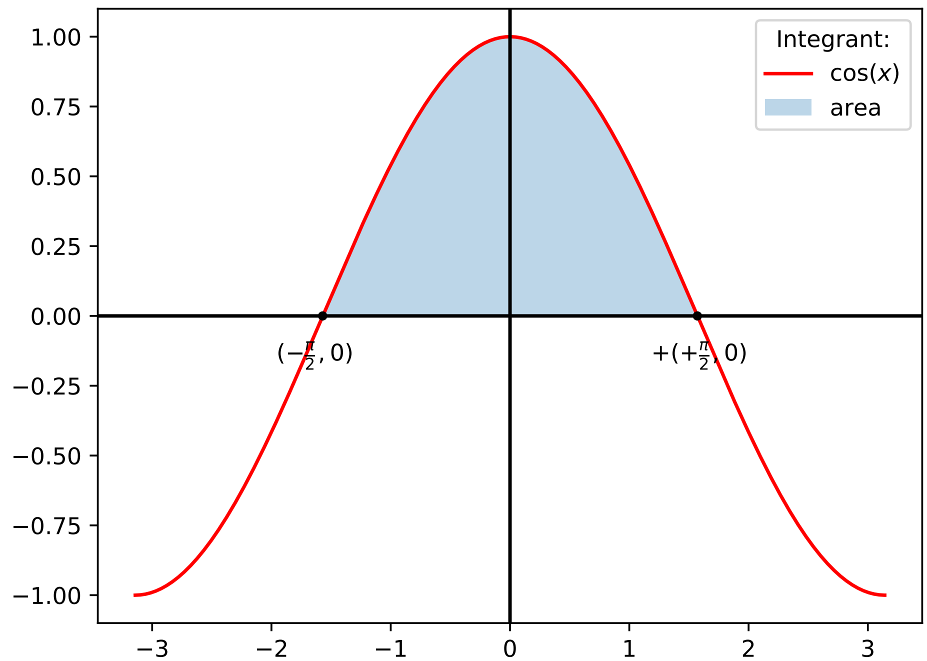
```
#!/usr/bin/python3
import numpy as np
from random import randrange, seed, random
import matplotlib.pyplot as p
import sympy as s

seed(123)
x   = s.Symbol('x')
F   = x**3 - 6*x**2 - 2*x + 30
DF  = s.diff(F, x)
f   = s.lambdify(x, F)
df  = s.lambdify(x, DF)
N   = 1001
xMin  = +1
xMax  = +7
xList = []
yList = []

# Find exact solution with sympy
eqn = s.Eq(DF, 0)
# Find critical points (CPs) & keep only those within range [xMin, xMax]
cpList = [p.evalf() for p in s.solve(eqn, x) if p.evalf() >= xMin and p.evalf()
     <= xMax]

for i in range(N):

    # Get random number in interval
    x = xMin + (xMax-xMin)*random()

    y = f(x)
    xList.append(x)
    yList.append(y)

fMin  = min(yList)
fMax  = max(yList)
fMinX = xList[yList.index(min(yList))]
fMaxX = xList[yList.index(max(yList))]

print("=== Analytical solution:\n\tf(min) = %.5f at x= %.5f" % (f(cpList[0]),
    cpList[0] ) )
print("=== Numerical approximation:\n\tf(min) = %.5f at x= %.5f" % (fMin, fMinX
    ) )

# Plot our function and mark the evaluation minimum
X = np.arange(xMin-0.5, xMax+0.5, 0.001)
Y = [f(x) for x in X]
p.plot( X, Y, "r-", label=r"$%s$" % s.latex(F) )
```

```
p.axvline(cpList, linestyle="-" , color="g", alpha=0.5, lw=3, label=r"$x=%.3f$
    (numerical)" % (cpList[0]) )
p.axvline(fMinX , linestyle=":", color="b", alpha=1.0, lw=3, label=r"$x=%.3f$ (
    analytical)" % (fMinX) )
p.legend()
for ext in [".png", ".pdf"]:
    p.savefig(__file__.split(".")[0] + ext)
p.show()
quit()
```

Αποτέλεσμα:



Παράδειγμα 2 Στο παρακάτω παράδειγμα δείχνουμε πως μπορούμε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα $\int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \cos(x)dx$ χρησιμοποιώντας την μέθοδο του Euler και τη μέθοδο Monte Carlo μέσης τιμής. Για τη μέθοδο Euler θα χρησιμοποιήσουμε βήμα 0.1.



tutorial11/ex2.py

```python
#!/usr/bin/python3
import numpy as np
import random as rndm


def Euler(deriv, y0, dx, xMin, xMax):
    yList = []
    xList = []
    y = y0
    x = xMin

    while x <= xMax:
        yList += [y]
        xList += [x]

        # Euler step
        y = y + deriv(x) * dx
        x = x + dx
    return xList, yList
```

```python

def df(x):
    return np.cos(x)

def f(x):
    return np.sin(x)

def MCIntegrate(f, nMC, a, b):

    mySum = 0.0

    for i in range(nMC):

        # Get random number in interval [a, b]
        xRand = a + (b-a) * rndm.random()

        # Sum the value of the function for this random value of x
        mySum+= f(xRand)

    # Divide by the number of trials to get the mean
    integral = (b-a) * mySum / nMC
    return integral

def main():

    # Define variables
    rndm.seed(12345)
    xMin = -np.pi/2
    xMax = +np.pi/2
    y0   = f(xMin)
    dx   = 0.1

    # Analytic solution of integral in range [xMin, xMax]
    intAnalytic = f(xMax) - f(xMin)

    # Using Euler
    xList, yList = Euler(df, y0, dx, xMin, xMax)
    intEuler = yList[-1] - yList[0]

    # Using MC solution of integral in range [xMin, xMax]
    nTries = 1000000
    intMC  = MCIntegrate(df, nTries, xMin, xMax)

    # Print results
    msg = "Integral of cos(x) in interval [%3.1f, %3.1f]:" % (xMin, xMax)
    msg+= "\n\tEuler Method = %14.10f " % (intEuler)
    msg+= "\n\tMC Mean Value = %14.10f " % (intMC)
    msg+= "\n\tAnalytic Solution = %14.10f"% (intAnalytic)
    print(msg)

main()
quit()
```

Αποτέλεσμα:

```
Integral of cos(x) in interval [-1.6, 1.6]:
  Euler Method =   1.9953898935
  MC Mean Value =   1.9989593864
  Analytic Solution =   2.0000000000
```

Μπορούμε να γράψουμε το ολοκλήρωμα σαν τη λύση μιας διαφορικής εξίσωσης

$$\frac{dy}{dx} = \cos(x) \tag{1}$$

με αρχική συνθήκη $y(x = -\frac{\pi}{2}) = -1$ και η τιμή $y(x = +\frac{\pi}{2})$ θα δώσει την τιμή του ολοκληρώματος. Θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο Euler για την ολοκλήρωση της διαφορικής εξίσωσης. Η αναλυτική τιμή είναι 2 και δίδεται από:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} \cos(x)dx = [\sin(x)]_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} = \sin(+\frac{\pi}{2}) - \sin(-\frac{\pi}{2}) = 1 - (-1) = 2 \tag{2}$$

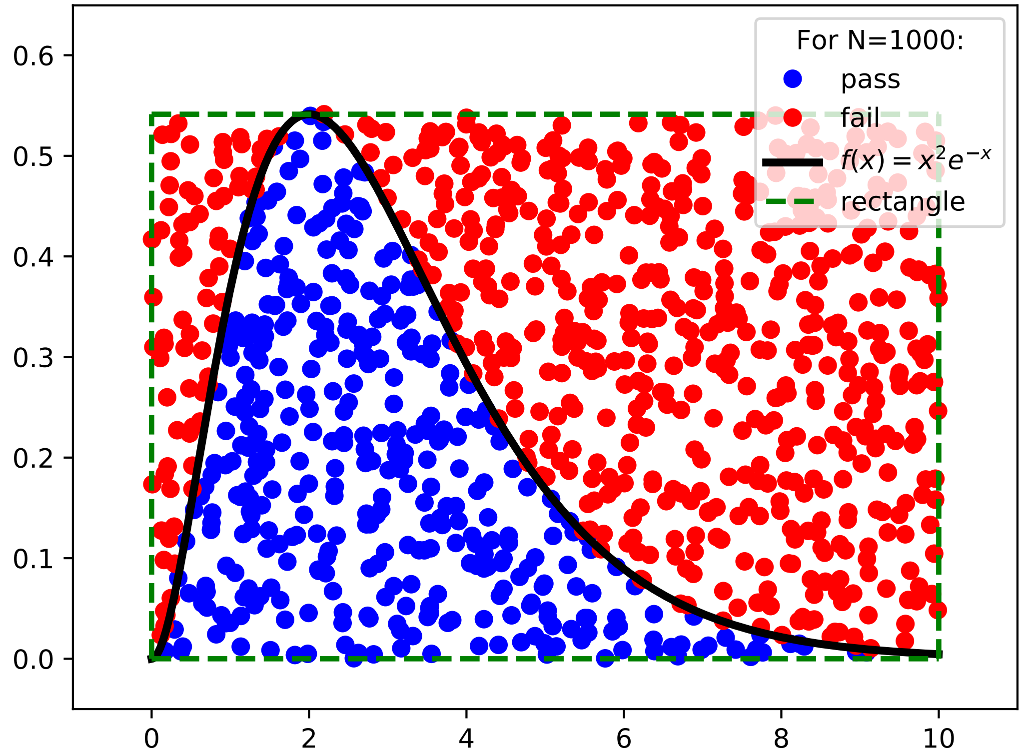
Παράδειγμα 3 Παράδειγμα υπολογισμού του εμβαδού της συνάρτησης $f(x) = x^2 e^{-x}$ (ολοκλήρωμα) στο διάστημα $x = [0, 10]$ με τη μέθοδο δειγματοληψίας.

tutorial11/ex4.py

```python
#!/usr/bin/python3
import random as rndm
import matplotlib.pyplot as p
import sympy as s
import numpy as np

rndm.seed(123456)
x  = s.Symbol('x')
F  = x*x * s.exp(-x)
DF = s.diff(F, x)
f  = s.lambdify(x, F)
df = s.lambdify(x, DF)

# Find maximum  by solving df/dx = 0 and finding x. Then evaluate f at this x.
eq     = s.Eq(DF, 0)
xDF0   = [float(x) for x in s.solve(eq, x)]
yDF0   = [float(f(x)) for x in xDF0]
yMax   =  max(yDF0) #  = 0.55
yMin   =  0.0
xMin   =  0.0
xMax   = 10.0
nPass  =  0
nTries = 1000
x1List = []
x2List = []
y1List = []
y2List = []


for i in range(nTries):

    # Get random number in interval [0, 1]
    x = rndm.random()
    # Transform random number to interval [xMin, xMax]
    x = xMin + (xMax-xMin)*x

    # Get random number in range [0, yMax]
    y = yMin + yMax * rndm.random()

    # Our random point lies within the width 'x' (by construction) and height 'y' of rectangle
    if f(x) > y:
        nPass+=1
        x1List.append(x)
        y1List.append(y)
    else:
        x2List.append(x)
        y2List.append(y)

```

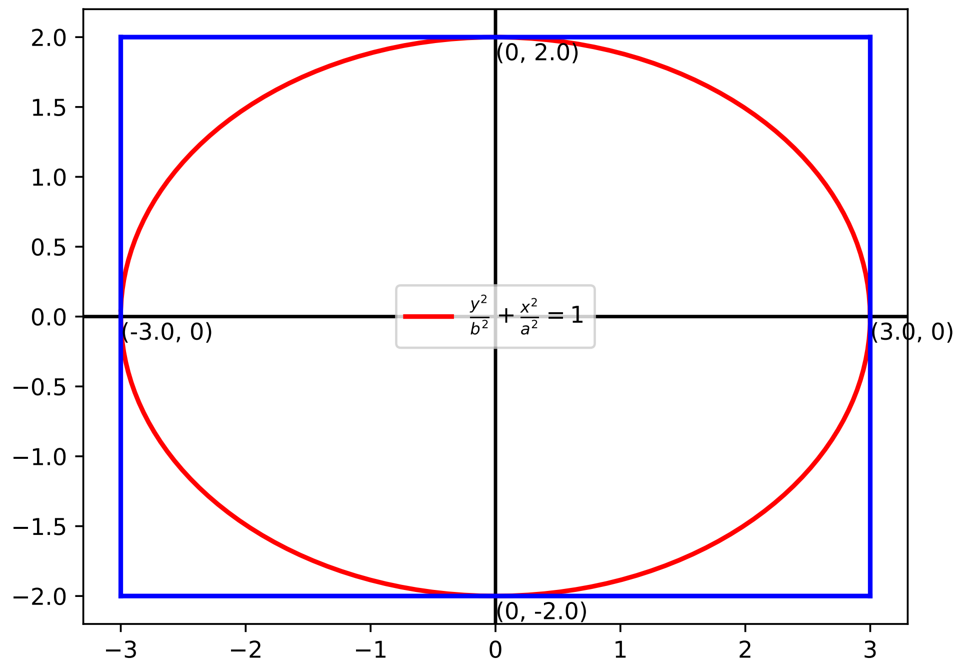
```python

dy = yMax-yMin
dx = xMax-xMin
rArea = dy * dx
fArea = rArea* (nPass/nTries)
print("The area of the rectangle is:\n\tA(rectangle) = %.3f\nThe area of the function is:\n\tA(f) = %.3f" % (rArea, fArea) )

X = np.arange(xMin, xMax, 0.001)
Y = [f(x) for x in X]

# Plot the sampling points enclosed by function
p.plot( x1List, y1List, "bo", label="pass")

# Plot the sampling points not enclosed by function
p.plot( x2List, y2List, "ro", label="fail")

# Plot the function curve
p.plot( X, Y, "k-", lw=3, label=r"$f(x)=%s$" % s.latex(F) )

# Draw the rectangle enclosing the curve
p.plot( [xMin, xMax], [yMax, yMax], "g--", lw=2, label="rectangle")
p.plot( [xMin, xMin], [0, yMax], "g--", lw=2)
p.plot( [xMax, xMax], [0, yMax], "g--", lw=2)
p.plot( [xMin, xMax], [0, 0], "g--", lw=2)

# Set axes limits
p.ylim(-0.05, yMax*1.2)
p.xlim(xMin-1, xMax+1)

#p.axvline(fMinX, linestyle=":", color="k", label=r"$x=%s$" % (fMinX) )
p.legend(title="For N=%s:" % nTries)
for ext in [".png", ".pdf"]:
    p.savefig(__file__.split(".")[0] + ext)
p.show()

quit()
```

Αποτέλεσμα:



Για να περικλείσουμε τη συνάρτηση στο διάστημα της ολοκλήρωσης απαιτείται η εύρεση της μέγιστης ή ελάχιστης τιμής της συνάρτησής μας. Για να το επιτύχουμε αυτό χρησιμοποιούμε την *sympy* για να βρούμε την παράγωγο της συνάρτησης, να λύσουμε την εξίσωση $\frac{df}{fx} = 0$, και έπειτα να υπολογίσουμε τη συνάρτηση στο σημείο του ακρώτατου.

Παράδειγμα 4 Μια έλλειψη ορίζεται από την εξίσωση $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$, όπου a και b ο μεγάλος και μικρός άξονάς της. Θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο του Monte Carlo με $N = 10$, 100, 1000, $10\,000$, και $100\,000$ προσπάθειες για να βρούμε το εμβαδό της έλλειψης A_{MC} του παρακάτω σχήματος που έχει $a = 3$ και $b = 2$. Η αναλυτική τιμή είναι το εμβαδό της έλλειψης υπολογιζόμενο θεωρητικά και που είναι ίσο με $A_{\varepsilon\lambda} = \pi \cdot a \cdot b$. Τέλος, μπορούμε να υπολογίσουμε τη τιμή του π εξισώνοντας τα δύο εμβαδά $A_{\text{MC}} = A_{\varepsilon\lambda}$.



tutorial11/ex1.py

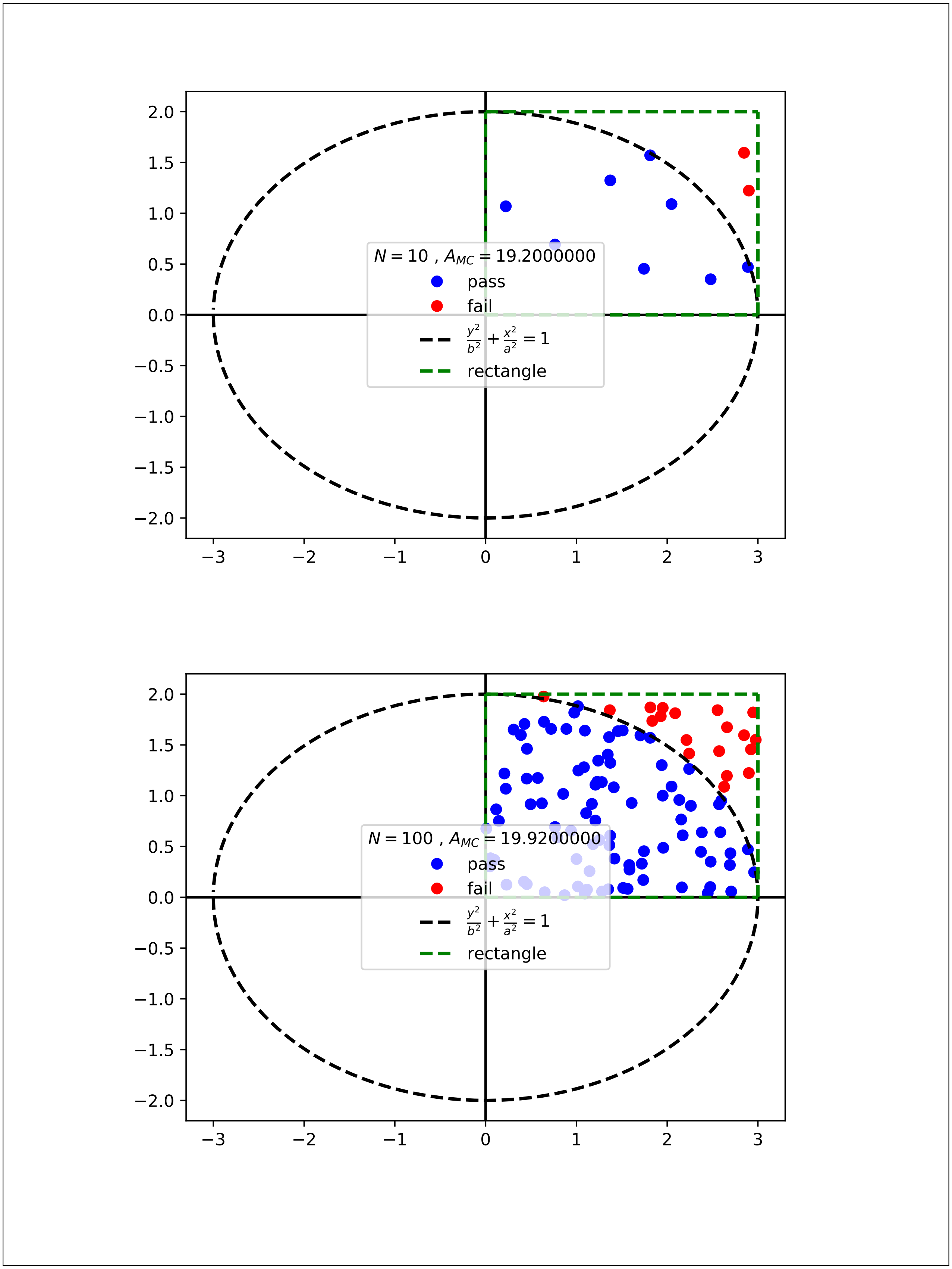
```python
#!/usr/bin/python3
import numpy as np
import random as rndm
import matplotlib.pyplot as p
import sympy as s

# Define ellipse dimensions
a = 3.0  # major axis
b = 2.0  # minor axis
r = 1.0  # radius
nList  = [10**i for i in range(1, 6, 1)]
x1List = []
y1List = []
x2List = []
y2List = []
rndm.seed(1234567)

```

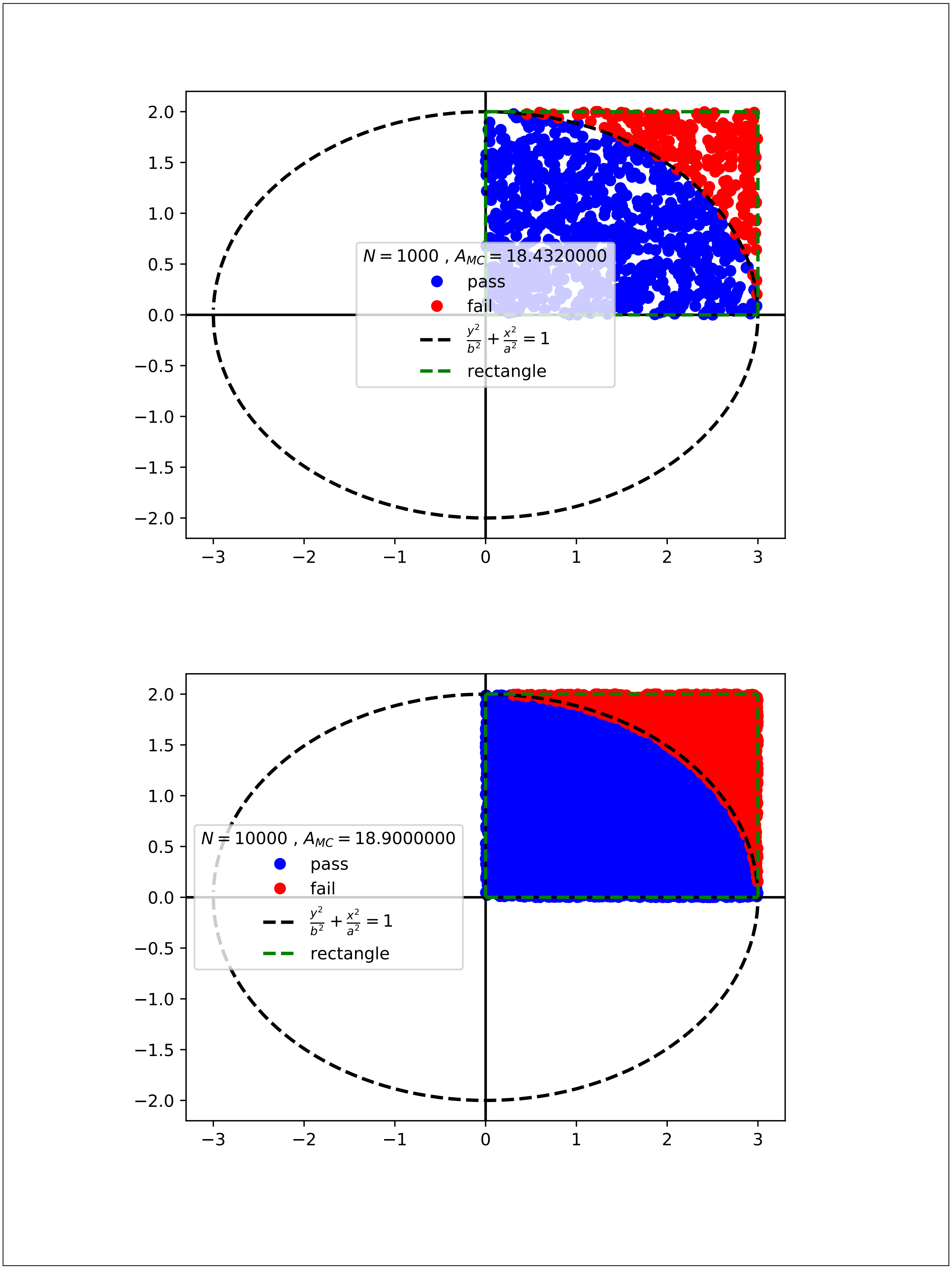
```python

# For plotting the ellipse use sympy
x, y, aa, bb = s.symbols('x y a b')
# Define the equation of the ellipse
ellipseEq = s.Eq(x**2 / aa**2 + y**2 / bb**2, 1)
# Solve for y in terms of x
ellipseY  = s.solve(ellipseEq, y)
# Lambdify the ellipse equation for numerical evaluation
ellipseF  = s.lambdify((x, aa, bb), ellipseY)


# Loop over various values of experiments N
for i, N in enumerate(nList, 1):
    nPass = 0
    if N == 10:
        print("%11s %14s %14s %12s %15s" % ("N","A (MC)", "A (Theory)", "dA", "
        Pi Estimate"))

    # Loop over [0, N] to evaluate the random numbers for each experiment
    for itry in range(N):

        # Generate random number for x in range [0, a]
        xRand = a * rndm.random()

        # Generate random number for y in range [0, b]
        yRand = b * rndm.random()

        # Evaluate radius of ellipse
        rRand = (xRand/a)**2 + (yRand/b)**2

        # Check if
        if rRand <= r**2:
            nPass += 1
            x1List.append(xRand)
            y1List.append(yRand)
        else:
            x2List.append(xRand)
            y2List.append(yRand)

    # Evaluate integral estimate for given N
    integral   = nPass / N
    areaMC     = 4 * integral * a * b
    areaTheory = np.pi * a * b
    piEstimate = 4*integral
    print( "%10i %14.6f %14.6f %14.7f %13.7f"% (N, areaMC, areaTheory, abs(
    areaMC-areaTheory), 4*integral) )
    # areaMC = areaTheory
    # => 4 * integral * a * b = pi * a * b
    # => pi = 4 * integral

    # Plot the sampling points enclosed/not enclosed by function
    p.plot( x1List, y1List, "bo", label="pass")
    p.plot( x2List, y2List, "ro", label="fail")
```

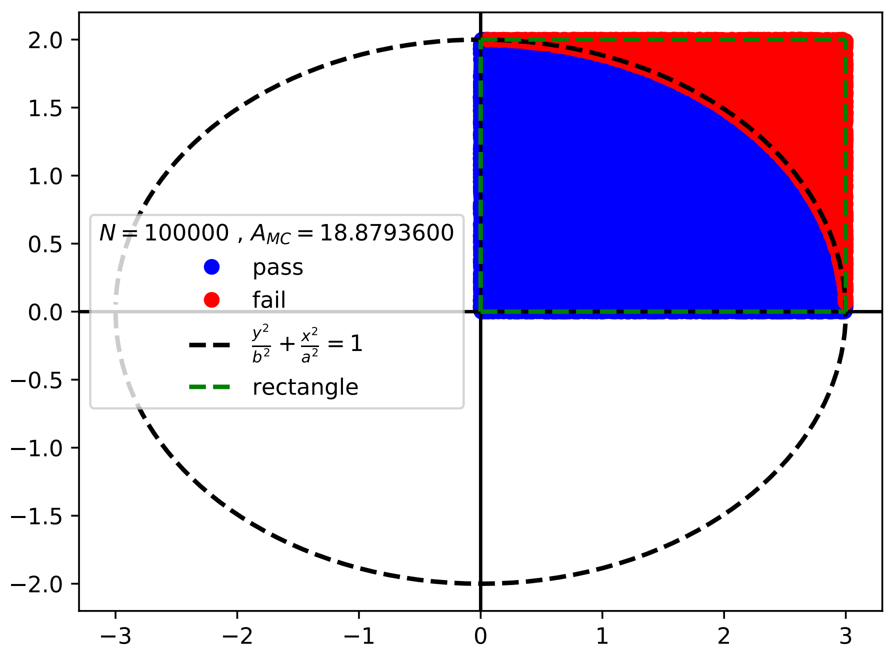
```python

    # Set axes limits & draw axes lines
    p.ylim(-b*1.1, +b*1.1)
    p.xlim(-a*1.1, +a*1.1)
    p.axhline(0, color="k")
    p.axvline(0, color="k")

    # Plot the function curve
    X = list(np.arange(-a, +a, 0.001))
    # Y = [ellipseF(x, a, b) for x in X] # this causes duplicate label!
    Y1 = [ellipseF(x, a, b)[0] for x in X]
    Y2 = [ellipseF(x, a, b)[1] for x in X]
    Y  = []
    Y.extend(Y1)
    Y.extend(Y2)
    X.extend(reversed(X))
    p.plot(X, Y, "k--", lw=2, label=r"$%s$" % s.latex(ellipseEq) )

    # Draw the rectangle enclosing the curve
    p.plot( [0, a], [b, b], "g--", lw=2, label="rectangle")
    p.plot( [0, a], [0, 0], "g--", lw=2)
    p.plot( [0, 0], [0, b], "g--", lw=2)
    p.plot( [a, a], [0, b], "g--", lw=2)

    # Draw the legend
    p.legend(title=r"$N=%d$ , $A_{MC}=%.7f$" % (N, areaMC) )
    for ext in [".png", ".pdf"]:
        p.savefig(__file__.split(".")[0] + "_N" + str(N) + ext)
    p.show()

quit()
```

Αποτέλεσμα:

```
         N          A (MC)       A (Theory)            dA       Pi Estimate
        10       19.200000       18.849556      0.3504441       3.2000000
       100       19.920000       18.849556      1.0704441       3.3200000
      1000       18.432000       18.849556      0.4175559       3.0720000
     10000       18.900000       18.849556      0.0504441       3.1500000
    100000       18.879360       18.849556      0.0298041       3.1465600
```


$N = 10$, $A_{MC} = 19.2000000$
pass
fail
$\frac{y^2}{b^2} + \frac{x^2}{a^2} = 1$
rectangle
$N = 100$, $A_{MC} = 19.9200000$
pass
fail
$\frac{y^2}{b^2} + \frac{x^2}{a^2} = 1$
rectangle


$N = 1000$, $A_{MC} = 18.4320000$
pass
fail
$\frac{y^2}{b^2} + \frac{x^2}{a^2} = 1$
rectangle
$N = 10000$, $A_{MC} = 18.9000000$
pass
fail
$\frac{y^2}{b^2} + \frac{x^2}{a^2} = 1$
rectangle



Ορίζουμε ένα παραλληλόγραμμο με μήκος πλευράς $a = 3$ και $b = 2$, το οποίο περικλείει το ένα τέταρτο της έλλειψης. Το εμβαδόν του παραλληλογράμμου αυτού είναι $A_{\pi\alpha} = a \cdot b$. Επιλέγουμε τυχαία σημεία x στο διάστημα $x = [0, 3]$ και τυχαία σημεία y στο διάστημα $y = [0, 2]$ τα οποία ζητούμε να ικανοποιούν την εξίσωση της έλλειψης:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \leq 1. \tag{3}$$

Το εμβαδό της έλλειψης θα είναι τότε:

$$A_{\text{MC}} = a \cdot b \cdot \frac{N_{\varepsilon\lambda}}{N} \tag{4}$$

όπου N είναι ο συνολικός αριθμός τυχαίων σημείων (x, y) και $N_{\varepsilon\lambda}$ είναι ο αριθμός των τυχαίων σημείων (x, y) που ικανοποιούν την Εξ. (3) και άρα βρίσκονται εντός της έλλειψης.