

Projekty, Jarná škola FX

K. Bahyl, M. Badin, B. Fačkovec, P. Vanya

Apríl 2015

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 dôvody 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 ľuďí, 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 FX² alebo fykosí Uvod do programování,³
2. nás, organizátorov, čo vám radi poradíme,
3. kembridžské vysokoškolské skriptá na C++ a trochu Pythonu (na požiadanie),

¹Pre viac informácií použijte komiks: explosm.net/comics/3557

²fks.sk/fx/jarnaskola14.php, zvlášť odporúčame 1. a 2 .problem sheet

³fykos.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 inštalujú nasledovne:

- Matlab, resp. Octave:

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

- C/C++:

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

- Python už je nainštalovaný.

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

1 Difúzia a chemické prechody

Efekt veľkého počtu podobných interakcií často v simuláciách zahrňame pomocou tzv. trenia. Tieto interakcie sú modelované pomocou náhodnej sily a brzdnnej sily, ktorá je priamo úmerná rýchlosti častice. U dostatočne veľkých častíc je trenie také intenzívne, že rýchlosť častice môžeme úplne zanedbať. Polohu častice môžeme potom simulovať náhodnou prechádzkou s vhodným pravdepodobnostným rozdelením dĺžky kroku: Brownovým pohybom.

1. Veselí študenti v piatok o 23:00 UTC opúšťajú Eagle pub. Po každých n krokoch sa zapotácajú, pričom pravdepodobnosť otočenia o 180 stupňov je 50%.
 - (a) Simulujte tento proces (diskretizovaná difúzia v 1D) pre S študentov.
 - (b) Ako sa mení stredná vzdialenosť študentov $\langle \Delta x \rangle$ od dverí Eaglu s časom t ?
 - (c) Rozdeľte ulicu na vhodné krátke úseky a miesto vývoja polohy pre každého študenta sledujte vývoj počtu študentov na každom úseku ulice. Aká funkcia najlepšie popisuje rozloženie študentov na ulici po čase t ? Ktorý spôsob simulácie je výhodnejší?
 - (d) Dvere do Bath House sú N krokov od Eaglu a dvere do King's M krokov od Eaglu (pričom N aj M sú deliteľné n). Po dosiahnutí dverí⁴ sa prechádzka končí. Koľko študentov ide spať a koľko ide na ďalšie pivo?
2. Zrnko peľu s priemerom $1\mu\text{m}$ sa pohybuje Brownovým pohybom vo vode.
 - (a) Spočítajte difúzny koeficient podľa Stokesovho vzťahu a z neho koeficient trenia v redukovaných jednotkách.
 - (b) Simulujte 1 zrnko peľu. Zobrazte niekoľko trajektórií.
 - (c) Simulujte P neinteragujúcich zrníek peľu. Nájdite rozdelenie ich vzájomnej vzdialenosti po čase t . Je výhodné si nádobu rozdeliť na malé objemy, podobne ako sme v minulej úlohe delili ulicu na úseky?
3. Veľmi obľúbeným modelom chemickej reakcie je pohyb Brownovej častice v dvojitej jame:

$$\mathcal{V}(x) = (1 - x^2)^2 + 0.2x$$

- (a) Nájdite rovnovážne rozloženie pre tento proces.
- (b) Z rovnovážneho rozdelenia v čase $t = 0$ "vymažeme" všetky častice v pravej jame. Ako sa bude vyvíjať počet častíc v ľavej jame?
- (c) Vypočítajte rýchlostnú konštantu tejto reakcie pomocou
 - i. fitovania rýchlostnej rovnice na počet častíc v jame získaný v predchádzajúcom bode,
 - ii. teórie tranzitného stavu,
 - iii. únikových časov a vzorca podľa Schultena a Szabóa.
 a porovnajete ich hodnoty pre rôzne kombinácie parametrov.

Pred príslušnou prednáškou si rozmyslite, ktoré vzorce a hodnoty potrebujete.

⁴Bath House ... ide sa na jedno, King's ... ide sa spať

2 Molekulová dynamika

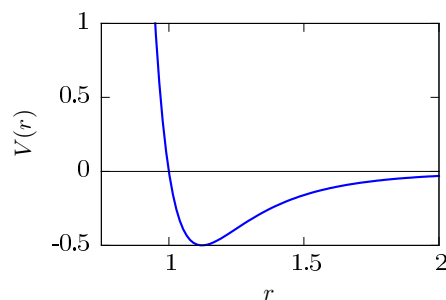
Majme 2D alebo 3D krabicu a v nej niekoľko (N) častíc. V tomto projekte budeme za pomoci newtonovskej mechaniky $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ modelovať ich pohyb. Zameriame sa na dva modely.

2.1 Lennard-Jonesov potenciál

Vlastnosti tekutín pozostávajúcich z nenabitých častíc (atómov, molekúl) prekvapivo veľmi dobre popisuje tzv. Lennard-Jonesov potenciál:

$$\mathcal{V}(\mathbf{r}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

kde potenciálna energia $\mathcal{V}(r)$ najprv strmo klesá (častice sa odpudzujú) pre vzdialenosti medzi jadrami $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ menšie ako $r_{\min} = 2^{1/6}\sigma$ až na hodnotu $\mathcal{V}(r_{\min}) = -\epsilon$ (častice sa priťahujú). Takúto interakciu medzi nenabitými časticami možno vysvetliť pomocou korelácie pohybov elektrónov vo vzdialenostiach väčších ako σ a Pauliho vylučovacím princípom pri malých vzdialenostiach.



Obr. 1: Lennard-Jonesov potenciál

1. Nasimulujte N častíc vzájomne na seba pôsobiacich Lennard-Jonesovým potenciálom s vhodne zvolenými parametrami ϵ a σ v krabici s objemom $V_{\text{box}} = 8N\sigma^3$ za použitia Verletovho algoritmu alebo metódy RK4.
 - (a) Vymyslite spôsob efektívnej inicializácie rýchlostí.
 - (b) Odvod'te vzťah pre gradient potenciálu.
 - (c) Interakciu so stenou krabice modelujte ako pružnú zrážku.
 - (d) Sledujte rozloženie rýchlostí, distribúciu polôh v priestore, korelačné funkcie a tlak (spočítajte pomocou viriálu).
2. Simulujte N Lennard-Jonesových častíc predstavujúcich plyn so známou hustotou (miesto krabice použite periodické okrajové podmienky)
 - (a) Ako sa zmení počet stupňov voľnosti?
 - (b) Prehodnoťte možnosti zahrnutia interakcií s časticami v susednom simulačnom boxe.
 - (c) Nájdite hodnoty potenciálnej energie a hustoty, pri ktorých sú častice v plynnom, kvapalnom a pevnom skupenstve.
3. Plyn interaguje s okolím o teplote T . Teplota je daná kinetickou energiou častíc $mv^2/2 = 3/2k_{\text{B}}T$.
 - (a) Simulujte interakciu s okolím pomocou
 - (b) Ukážte, že termodynamické veličiny vo vašej simulácii majú rovnaké hodnoty ako v prípade Monte Carlo simulácie.

2.2 Pružné zrážky [Advanced]

Teraz uvažujme sférické častice s polomerom a , ktoré sa od seba pružne odrážajú. Nasimulujte tento systém podobne ako predošlý (stačí v 2D). Pozorujte opäť $\langle \mathbf{r}_i \rangle$ a $\Delta \mathbf{r}_i$ a tlak v závislosti od teploty. Zistite, pri akej hustote nastáva *fázový prechod*, teda jedna z veličín sa výrazne začne meniť.

3 Obiehanie planét

Prvých šesť planét ľudstvo pozorovalo od nepamäti, ale Urán bol objavený až v 18. storočí za pomoci ďalekohľadu. Zaujímavejší je príbeh Neptúna. Jeho existenciu najskôr predpovedali (vypočítal) John Adams a Urbain Le Verrier z nečakaných odchýlok (porúch) v dráhe Uránu v roku 1845. Planéta bola objavená o rok neskôr.

Cieľom tohto projektu je nasimulovať pohyb všetkých ôsmich planét naraz a zistiť, ako na seba vplývajú a na základe simulácií predpovedať rôzne javy.

3.1 Simulácie

Na wikipédii nájdite vstupné parametre pre simuláciu planét a slnka: hmotnosti, vzdialenosti od Slnka v perihéliu alebo aféliu a rýchlosti v týchto bodoch. Na simulovanie použijete metódu RK4. Uistite sa, že vaša simulácia vyrába správne dáta, ako napr. periódu obehu.

3.2 Urán

Teraz „vymažte“ Neptún a pozorujte správanie sa Uránu. Skúste prísť na to, ako mohol Adams predpovedať existenciu Neptúnu len z pozorovania Uránu.

3.3 Zem

Ktorá planéta má najväčší vplyv na pohyb Zeme okolo Slna? Ako sa tento vplyv prejavuje?

3.4 Mesiac

Teraz do vašej simulácie pridajte Mesiac. Je známe, že Mesiac sa od zeme postupne vzdaluje rýchlosťou asi 4 centimetre za rok. Ktoré nebeské teleso má na toto vzdáľovanie najväčší vplyv?

4 Chaos

Dvojité kyvadlo je problém analyticky riešiteľný len v prípade, že pre výchylky urobíme určité zanedbania, ako napríklad $\sin x \approx x$. Pre všeobecný prípad treba použiť počítač. Za jeho pomoci odhalíme nový jav – *deterministického chaosu*.

4.1 Teória

Odvoďte pohybové rovnice pre výchylky horné a dolné kyvadla θ_1, θ_2 v prípade, že majú rovnaké hmotnosti m a rovnaké dĺžky lana l .

4.2 Analytické riešenie

Vyriešte systém pre malé počiatočné uhly, t.j. nájdite frekvencie dvoch módov kmitania ω_1, ω_2 . Čo si pod týmito módmami možno predstaviť?

4.3 Numerické riešenie

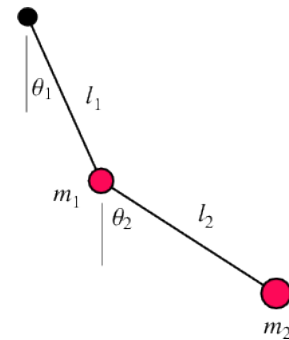
Teraz sa zamerajte na všeobecné uhly. Nasimulujte pohyb takéhoto systému v čase. Ako počiatočné podmienky si zvolte uhol väčší ako 10 stupňov

- Na úvod vyskúšajte základnú Eulerovu metódu:

$$\begin{aligned}v(t + dt) &= v(t) + a(t)dt, \\x(t + dt) &= x(t) + v(t)dt.\end{aligned}$$

Vykreslite celkovú energiu v čase (a predtým sa zamyslite, čo možno očakávať).

- Vyskúšajte metódu RK4 (v prípade, že používate C++, nájdete túto metódu v knižnici GSL). Znova vykreslite funkciu celkovej energie v čase. V čom nastal rozdiel?
- Teraz trochu zmeňte počiatočné podmienky (napr. o 1%) a pozorujte rozdiel vo vývoji systému. Po akom čase nastane výrazná zmena? Vyberte najvhodnejší parameter, ktorý túto zmenu zachytáva a vykreslite jeho vývoj v čase pre rôzne počiatočné podmienky (napr. zmeny o 1,2 alebo 5%).



Obr. 2: Dvojité kyvadlo