1) Random Numbers

Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα το οποίο βγάζει τον μέσο όρο από N τυχαίους αριθμούς οι οποίοι λαμβάνονται από μία ομαλή κατανομή τυχαίων αριθμών. Το πρόγραμμα πρέπει να τρέξει για N=10,100,1000,10000,100000,1000000 τυχαίους αριθμούς. Κάντε την γραφική παράσταση του μέσου όρου ως συνάρτηση του N (όπου καλύτερα ο άξονας N να είναι λογαριθμικός). Περιγράψτε τι συμπεράσματα βγάζετε από τα αποτελέσματα. Ως αρχικό seed χρησιμοποιείστε τον αριθμό μητρώου σας (όπως και σε όλα τα επόμενα προβλήματα).

2) Trapping

a) Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα το οποίο φτιάχνει ένα πλέγμα 1 διάστασης 100000 θέσεων. Στο πλέγμα αυτό βάλτε σε τυχαίες θέσεις έναν αριθμό από μόρια παγίδες, τα οποία θα έχουν συγκέντρωση c. Ακολούθως τοποθετείστε 1 σωματίδιο σε μία τυχαία θέση στο πλέγμα, και αφήσετε το σωματίδιο να εκτελέσει μία τυχαία διαδρομή. Στην διαδρομή αυτή δεν θα βάλετε περιορισμό χρόνο, δηλ. δεν θα δηλώσετε ένα συγκεκριμένο αριθμό βημάτων n. Η διαδρομή θα σταματά όταν το σωματίδιο τύχει κατά την κίνηση του να πέσει μέσα σε μια παγίδα. Ο χρόνος που χρειασθηκε για να γίνει αυτό είναι ο χρόνος παγίδευσης. Κάνετε 100000 runs, κρατείστε τους χρόνους παγίδευσης, και κάνετε την κατανομή των χρόνων αυτών. Από την κατανομή αυτή υπολογίστε ακολούθως την πιθανότητα επιβίωσης Φ(c,n). Τρέξτε το πρόγραμμα για $c=10^{-1}$ 10^{-2} και 10^{-3}. Βάλτε τις 3 πιθανότητες επιβίωσης στην ίδια γραφική παράσταση και συγκρίνετε με την προσέγγιση Rosenstock. Στη συνέχεια κάνετε τη γραφική παράσταση του Φ(c,n) συναρτήσει του συνδιασμού $x=cn^{1/2}$ Τι παρατηρείτε;

b) Όπως στο (a), αλλά χρησιμοποιείστε πλέγμα 2 διαστάσεων με μέγεθος 1000x1000. Υπολογίστε την πιθανότητα επιβίωσης για $c=10^{-2}$ και 10^{-3} και συγκρίνετε με την προσέγγιση Rosenstock.

Προσοχή στις οριακές συνθήκες. Θα πρέπει όταν το σωματίδιο φθάνει στα άκρα του πλέγματος να μην επιτρέπεται να φύγει εκτός πλέγματος, αλλά να παραμείνει μέσα, είτε επιστρέφοντας στην προηγούμενη θέση, είτε να τοποθετείται κυκλικά στην απέναντι πλευρά του πλέγματος.

3) Networks

Σχηματίστε ένα δίκτυο με N κόμβους. Χρησιμοποιήστε N=10000 και N=100000 για:

a) Τυχαία (Random) κατανομή των συνδέσεων. Χρησιμοποιείστε τον κανόνα ότι κάθε δυνατή σύνδεση μεταξύ δύο (2) κόμβων θα υπάρχει με πιθανότητα 1/6. Βρείτε το k κάθε κόμβου, όπου k είναι ο αριθμός των συνδέσεων που έχει ο κόμβος αυτός. Δημιουργείστε την κατανομή P(k) και κάντε τη γραφική παράσταση P(k) vs k.
b) Κατανομή με νόμο δύναμης (power law) που δίνει scale-free δίκτυο. Χρησιμοποιείστε την κατανομή $P(k) \sim k^{-\gamma}$, όπου γ είναι σταθερά. Εδώ βάλτε γ=2,

2.5, 3. Σε μία γραφική παράσταση (σε λογαριθμικούς άξονες) δώστε τις κατανομές P(k) vs k, για τις τρεις τιμές του γ.

Τα δεδομένα θα είναι μέσος όρος από 100 πραγματοποιήσεις.

4) Percolation

Δημιουργείστε ένα πλέγμα δυο διαστάσεων με μέγεθος NxN. Το N θα πρέπει να παίρνει διαφορετικές τιμές και συνήθως θα είναι στο διάστημα $100<N<1000$. Οι θέσεις του πλέγματος θα γίνουν 0 ή 1 με πιθανότητα p να είναι 1 και (1-p) να είναι 0. Ακολούθως εφαρμόστε τον αλγόριθμο CMLT ώστε να βρείτε την πλήρη κατανομή των συσσωματωμάτων (clusters). Μεταβάλετε το p από 0.1 ως 0.8 αρχικά με $\Delta p=0.1$, αλλά κοντά στο κρίσιμο σημείο p_c με $\Delta p=0.01$. Έτσι βρείτε το κρίσιμο σημείο p_c.

Υπολογίστε την ποσότητα:

$$I_{av} = \sum_{m=1}^{m_{\max}} \frac{i_m m^2}{pN^2}$$

Ακολούθως υπολογίστε το I'_{av} που είναι το ίδιο με το I_{av}, αλλά χωρίς το μεγαλύτερο cluster. Κάντε τις γραφικές παραστάσεις I_{av} vs p και I'_{av} vs p

Όλα τα αποτελέσματα πρέπει να είναι μέσοι όροι, άρα χρειάζονται 1000 πραγματοποιήσεις.

Υπολογίστε το $P_{\max}$:

$$P_{\max} = \frac{m_{\max}}{pN^2}$$

και κάντε την γραφική παράσταση $P_{\max}$ vs p.

Από τις σχέσεις

$$I_{av}(p) = k\left|p - p_c\right|^{-\gamma}, \; p < p_c$$

$$I'_{av}(p) = k'\left|p - p_c\right|^{-\gamma'}, \; p > p_c$$

$$P_{\infty}(p) = k^n\left|p - p_c\right|^{-\beta},$$

βρείτε τους κρίσιμους εκθέτες β,γ,γ'.

5) Προβλήματα Μοριακής Δυναμικής

Σε όλες τις ασκήσεις θεωρούμε μονάδες στις οποίες σ = ε = m =1.

1. Δίνεται το δυναμικό Lennard-Jones

$$\varphi(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right],$$

το οποίο περιγράφει το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο ατόμων A και B που βρίσκονται σε απόσταση r. Υποθέτουμε ότι οι αρχικές θέσεις τους είναι (4,2) και (3,1), ενώ οι ταχύτητες τους είναι (1,-2) και (1,-2). α) Ποια είναι η δύναμη που

ασκείται μεταξύ των δύο ατόμων. β) Ποιες θα είναι οι θέσεις των ατόμων τη χρονική στιγμή $t_1=\Delta t$, όπου $\Delta t=0.2$. γ) Ποια θα είναι η ταχύτητά τους τη στιγμή t_1. δ) Να υπολογιστούν τα ζητούμενα των β) και γ) για $t_2=t_1+\Delta t$ και μέχρι $t_{50}=t_{49}+\Delta t$. Να απεικονιστούν οι τροχιές των δύο ατόμων μέχρι το χρόνο t_{50}.
Για τον υπολογισμό των θέσεων και των ταχυτήτων να γίνει χρήση του αλγορίθμου ταχυτήτων Verlet.

2. Θεωρούμε υγρό με πυκνότητα $\rho=0.7$. Προσομοιώνουμε σύστημα $N=256$ ατόμων. Οι αρχικές θέσεις των ατόμων είναι σε πλέγμα με μικρές τυχαίες μετατοπίσεις. Ο προσδιορισμός αρχικών ταχυτήτων γίνεται με τυχαίο τρόπο, ώστε το μέτρο των αρχικών ταχυτήτων να κυμαίνεται από 0 μέχρι 0.5 [εναλλακτικά όλες οι ταχύτητες μπορεί να είναι $v_i(t=0)=0$]. Υπολογίζουμε αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων μόνο αν η απόστασή τους είναι $r<R_c=2.5\sigma$. Ισχύουν κυκλικές οριακές συνθήκες. α) Να υπολογιστεί η δυναμική ενέργεια του συστήματος, η κινητική ενέργεια $K(t) = (1/2) \Sigma m_i [v_i(t)]^2$, καθώς και η ολική ενέργεια $E(t)=V(t)+K(t)$, ως συνάρτηση του χρόνου. β) Ακολούθως, να γίνει το διάγραμμα της θερμοκρασίας ως συνάρτηση του χρόνου για το ίδιο χρονικό διάστημα, κάνοντας χρήση της σχέσης $K = 3/2\ Nk_BT$. γ) Να υπολογιστεί η μέση τετραγωνική μετατόπιση των ατόμων ως συνάρτηση του χρόνου $<R^2(t)>$.

3. Μοριακή Δυναμική υπό σταθερή θερμοκρασία. Χρησιμοποιούμε τις συνθήκες της προηγούμενης άσκησης, αλλά τώρα η θερμοκρασία είναι σταθερή. Υπολογίστε την κινητική, δυναμική, και ολική ενέργεια ως συνάρτηση του χρόνου, καθώς και τη θερμοκρασία. Ξεκινήστε με $T=0.2$, και επαναλάβετε για $T=0.5$ και $T=1.0$.

6. Πίνακας Συντελεστών Συσχέτισης από τις τιμές μετοχών.

Η ανάλυση του πίνακα συντελεστών συσχέτισης είναι βασικής σημασίας σε πολλούς επιστημονικούς τομείς που μελετάνε χρονοσειρές πολλών μεταβλητών. Ένας τέτοιος τομέας είναι και αυτός της Οικονοφυσικής. Στο αρχείο "prices.zip" θα βρείτε τις τιμές κλεισίματος $P_i(t)$ ενός συνόλου 20 μετοχών που διαπραγματεύονταν στο Χρηματιστήριο Αξιών Αθηνών το 2004. Θα έχετε λοιπόν 253 τιμές κλεισίματος για κάθε μετοχή. Από τις τιμές αυτές υπολογίστε:

- Τις λογαριθμικές αποδόσεις, χρησιμοποιώντας τη σχέση $r(t) = \ln P_i(t) - \ln P_i(t-1)$.

  Hint: Το αποτέλεσμα θα είναι ένα διάνυσμα με 252 τιμές, για κάθε μετοχή.
- Τον πίνακα των συντελεστών συσχέτισης, όπου το κάθε στοιχείο i, j του πίνακα θα υπολογίζεται από τον τύπο της γραμμικής συσχέτισης $\rho_{ij} = \dfrac{\langle r_i r_j \rangle - \langle r_i \rangle \langle r_j \rangle}{\sqrt{\left(\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2\right)\left(\langle r_j^2 \rangle - \langle r_j \rangle^2\right)}}$, όπου με $\langle ... \rangle$ συμβολίζουμε τον χρονικό μέσο όρο για όλη την περίοδο που εξετάζουμε.

  Hint : Το αποτέλεσμα θα είναι ένας 20x20 πίνακας με τιμές μέσα στο διάστημα [-1, 1].
- Τον πίνακα των αποστάσεων που προκύπτει εφαρμόζοντας το μετασχηματισμό $d_{ij} = \sqrt{2(1-\rho_{ij})}$ σε όλα τα στοιχεία του πίνακα των συντελεστών συσχέτισης.

  Hint : Το αποτέλεσμα θα είναι ένας 20x20 πίνακας με τιμές μέσα στο διάστημα [0, 2].