

F6060 Programování zkouška – termín 9. 6. 2022

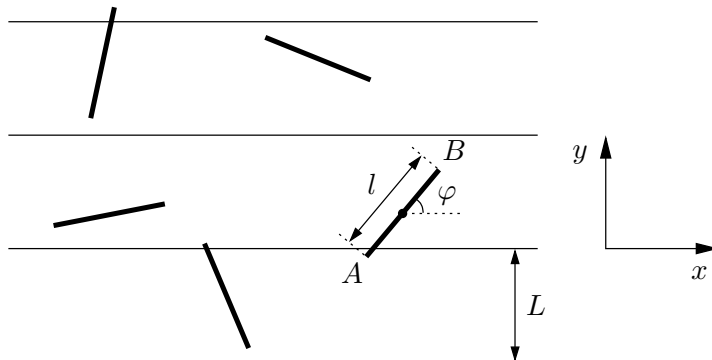
1. Házení jehlou

Hodnotu čísla π lze získat zábavnou experimentální cestou, která spočívá v házení jehly na podlahu pokrytou soustavou rovnoběžných čar. Několik náhodných dopadů jehly je znázorněno na obrázku (poloha jehly po dopadu je zde představována tlustou čarou). Označme délku jehly jako l a rozeztup rovnoběžných čar jako L . Jsou-li dopady jehly zcela náhodné z hlediska polohy v rovině xy , je pravděpodobnost toho, že jehla protne některou z rovnoběžných čar, rovna

$$P(\text{zásah}) = \frac{2l}{\pi L}.$$

Tento výsledek platí v případě $l \leq L$. Vykonáním mnoha hodů a odhadem pravděpodobnosti podle vztahu

$$P(\text{zásah}) \approx \frac{\text{počet zásahů}}{\text{počet hodů}}$$



je možné stanovit přibližnou hodnotu čísla π .

Byť je tento postup získávání hodnoty π krajně

nepraktický, je snadné sestavit počítačový program, který házení simuluje a umožňuje tak zkoumat jeho statistické vlastnosti.

Jeden hod budete simulovat následovně. Vygenerujete dvě náhodná čísla r_1 a r_2 z intervalu $[0, 1)$. První z nich poslouží k „vylosování“ směru jehly prostřednictvím úhlu $\varphi = 2\pi r_1$ (viz obrázek), druhé určí souřadnici y (opět viz obrázek). Souřadnice x je pro posouzení zásahu irelevantní, nemusíme se jí tedy zabývat. Při určování souřadnice y postačí jen relativní poloha mezi dvěma sousedními rovnoběžnými čarami, za souřadnici y středu jehly můžeme tedy vzít $r_2 L$. Koncové body jehly pak budou mít souřadnice y rovny

$$y_A = -\frac{l}{2} \sin(2\pi r_1) + r_2 L \quad \text{a} \quad y_B = +\frac{l}{2} \sin(2\pi r_1) + r_2 L.$$

Zásah nastane, pokud bude splněna některá z podmínek

$$y_A < 0, \quad y_A > L, \quad y_B < 0, \quad y_B > L.$$

Jeden pokus pro nás bude série N hodů, z nichž určíme aproximaci čísla π . Pro zjednodušení počítejme s $l = L = 1$. Prostřednictvím výše uvedených vztahů pak v rámci jednoho pokusu vyčíslíme aproximaci čísla π jako $p = 2N/(\text{počet zásahů})$. Vaším úkolem bude sestavit program, který provede N_{pokus} takovýchto pokusů s předepsaným N a pro každý z nich uchová příslušnou aproximaci čísla π . Z těchto N_{pokus} výsledků pak vypočítá aritmetický průměr a směrodatnou odchylku podle vztahů

$$\langle p \rangle = \frac{1}{N_{\text{pokus}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{pokus}}} p_i, \quad \sigma_p = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{pokus}} - 1} \sum_{i=1}^{N_{\text{pokus}}} (p_i - \langle p \rangle)^2},$$

kde p_i označují výsledky jednotlivých pokusů.

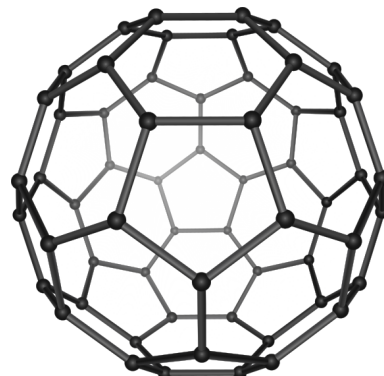
Proveďte konkrétní výpočty s $N_{\text{pokus}} = 10$ a postupně dosazujte $N = 100, 1000$ a nakonec 10000 hodů v pokusu. Mělo by se ukázat, že $\langle p \rangle$ se s rostoucím N čím dál tím lépe blíží hodnotě π a směrodatná odchylka klesá jako $1/\sqrt{N}$, bude tedy přibližně desetkrát menší po zvýšení z $N = 100$ na $N = 10000$.

2. Kmitání molekuly fullerenu

Fullereny jsou zvláštní molekuly kulovitěho tvaru tvořené pouze uhlíkovými atomy. Jejich objevitelem je Harold Kroto, který za tento objev získal v roce 1996 Nobelovu cenu. Nejznámějším představitelem fullerenu je tzv. buckminsterfulleren C_{60} složený z šedesáti atomů uhlíku uspořádaných do tvaru připomínajícího fotbalový míč (viz obrázek pocházející z Wikipedie). Tyto atomy utvářejí 20 šestiúhelníků a 12 pětiúhelníků a spojuje je celkem 90 vazeb o dvou různých délkách – 30 vazeb se nachází na rozhraní mezi šestiúhelníky, zbylých 60 vazeb tvoří pětiúhelníky.

V této úloze budete odhadovat frekvenci jednoho ze základních kmitových módů molekuly C_{60} nazývaného v anglické literatuře *radial breathing mode* (RBM). Odpovídá periodickému smršťování a roztahování molekuly, při kterém se zachovává její kulovitý tvar. V rámci analogie s fotbalovým míčem si jej lze představit jako periodické nafukování a vyfukování s malou amplitudou – míč tak „dýchá“. V hrubé aproximaci lze příslušnou frekvenci vyčíslit na základě vztahu

$$f_{\text{RBM}} \approx \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{\frac{B}{A}},$$



kde k je tuhost vazby mezi uhlíky, $m \approx 1.994 \cdot 10^{-26}$ kg hmotnost uhlíkového atomu a veličiny A , B se vypočtou z geometrie molekuly podle vzorců uvedených níže. Tuhost uhlíkové vazby odhadneme jako $k \approx 700 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, což přibližně odpovídá geometrickému průměru hodnot $500 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ a $1000 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ typických pro jednoduché a dvojnásobné vazby, které jsou v C_{60} formálně zastoupeny v poměru 1:1.

Potřebná geometrie molekuly je zachycena ve dvou souborech. Soubor `fulleren1.dat` obsahuje polohy atomů v klidovém stavu molekuly. Na každém z jeho šedesáti řádků se nachází pořadové číslo (index) atomu i a odpovídající trojice souřadnic x_i, y_i, z_i v jednotkách Å (ångström, $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$). Indexy pokrývají rozsah $i = 1, 2, 3, \dots, 60$. Soubor `fulleren2.dat` pak obsahuje informace o vazbách mezi atomy. Každému řádku odpovídá jedna vazba a je tvořen trojicí přirozených čísel: index vazby, index i prvního atomu vazby, index j druhého atomu vazby. Indexy vazby probíhají rozsah $1, 2, 3, \dots, 90$ a nejspíš při vašem snažení nenajdou uplatnění. Podstatné jsou indexy atomů, které odkazují na atomy tvořící vazby ve shodě s očíslováním zavedeným v souboru `fulleren1.dat`. Kdybychom chtěli na základě těchto údajů vytvořit model podobný tomu z obrázku, prošli bychom řádky souboru `fulleren2.dat` a za každý z nich nakreslili v prostoru tyčku spojující body (x_i, y_i, z_i) a (x_j, y_j, z_j) , kde i a j jsou získané z řádku souboru `fulleren2.dat` a souřadnice x, y, z jsou získané z příslušných záznamů v souboru `fulleren1.dat`. Model by pak doplnily kuličky na souřadnicích z `fulleren1.dat`.

Sestavte program, který načte údaje ze souborů `fulleren1.dat` a `fulleren2.dat` a vyčíslí veličiny A a B . První z nich je dána součtem kvadrátů vzdáleností atomů od středu molekuly, to jest sumou přes atomy ve tvaru

$$A = \sum_{\text{atomy}} (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) = \sum_{i=1}^{60} (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2),$$

druhá pak součtem kvadrátů délek vazeb, to jest sumou přes vazby ve tvaru (čítá tedy devadesát příspěvků)

$$B = \sum_{\text{vazby}} [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2].$$

Zde i a j jsou stejně jako dříve indexy dvou atomů tvořících vazbu. Na základě těchto výsledků je pak možné stanovit hledanou frekvenci RBM módu. S našimi odhady k a m je

$$\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \approx 29.8 \text{ THz} \rightarrow 995 \text{ cm}^{-1} \quad (\text{vlnčet ve spektroskopických jednotkách})$$

Tyto hodnoty je třeba vynásobit výrazem $\sqrt{B/A}$ a získáme tak frekvenci f_{RBM} popřípadě odpovídající vlnčet v cm^{-1} . Jen pro úplnost dodejme, že experimentálně lze vyšetřovaný kmitový mód pozorovat např. v Ramanově spektru molekul C_{60} , kde se projeví úzkým píkem na vlnčtu 495 cm^{-1} .