

# Χημικό «Πάγωμα» Αδρονίων σε συγκρούσεις Βαρέων Ιόντων

Μ. Βασιλείου, Φ. Διάκονος, Α. Καπόγιαννης

## Περίληψη

Γίνεται χρήση μετρήσεων αδρονικών πληθυσμών από υποθετικά πειράματα συγκρούσεων βαρέων ιόντων. Οι μετρήσεις συγκρίνονται με το θεωρητικό μοντέλο του Αδρονικού αερίου σε απλοποιημένη εκδοχή. Το μοντέλο υποθέτει ότι όλοι οι πληθυσμοί έχουν προέλθει από μία κοινή κατάσταση που βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία, οπότε μεγάλος αριθμός πληθυσμών μπορεί να προβλεφθεί από λίγες θερμοδυναμικές μεταβλητές που σχετίζονται με τη θερμοκρασία και την πυκνότητα. Για κάθε πείραμα εξάγονται αυτές οι θερμοδυναμικές μεταβλητές που επιτρέπουν την τοποθέτησή του στο διάγραμμα φάσης της κβαντικής χρωμοδυναμικής, ενώ παράλληλα ελέγχεται η υπόθεση της θερμοδυναμικής ισορροπίας. Συνολικά από τη μελέτη διαφόρων πειραμάτων αποτυπώνεται η καμπύλη του χημικού «παγώματος» στο διάγραμμα φάσης.

**Αριθμός φοιτητών/τριών:** 4

**Προαπαιτούμενες γνώσεις:** Στατιστική Φυσική, ευχέρεια προγραμματισμού σε οποιαδήποτε γλώσσα.

## Αναλυτική Περιγραφή

Στα πειράματα των βαρέων ιόντων, συγκρούονται πυρήνες με σχετικιστική ενέργεια. Σκοπός είναι να παραχθεί αδρονική ύλη σε μεγάλη θερμοκρασία και ενέργεια που θα αντιστοιχεί σε διαφορετική φάση από τη συνηθισμένη όπου τα κουάρκ είναι εγκλωβισμένα μέσα στα αδρόνια. Έτσι επιχειρείται να παραχθεί ύλη πλάσματος «κουάρκ-γκλουονίων» (Quark-Gluon Plasma-QGP). Στην κατάσταση αυτή τα κουάρκ και τα γκλουόνια (οι φορείς της ισχυρής αλληλεπίδρασης) κινούνται ελεύθερα μεν, αλλά αλληλεπιδρώντας ισχυρά, σε ένα μέσο. Στη συνέχεια η κατάσταση του πλάσματος «κουάρκ-γκλουονίων» ψύχεται και διέρχεται από μία αλλαγή φάσης επιστρέφοντας στον αδρονικό κόσμο. Η κατάσταση αυτή χαρακτηρίζεται από πλήθος αδρονίων (βαρυόνια και μεσόνια) που ανιχνεύονται πειραματικά.

Τα αδρόνια αυτά έχει διαπιστωθεί ότι μπορεί να θεωρηθούν ότι προέρχονται από μία κοινή κατάσταση σε θερμοδυναμική ισορροπία που χαρακτηρίζεται από λίγες θερμοδυναμικές παραμέτρους, όπως η θερμοκρασία,  $T$  και τα χημικά δυναμικά,  $\mu$ , τα οποία εκφράζουν την πυκνότητα του περιβάλλοντος μέσα στο οποίο παράγεται η εν λόγω κατάσταση. Η κατάσταση αυτή καλείται «Αδρονικό Αέριο» (Hadron Gas-HG). Τα χημικά δυναμικά που θα μας απασχολήσουν είναι το χημικό δυναμικό του βαρυονικού αριθμού,  $\mu_B$ , και το χημικό δυναμικό της παραδοξότητας,  $\mu_S$ , που σχετίζονται με αντίστοιχες πυκνότητες. Συνεπώς η κατάσταση στην οποία παράγονται τα αδρόνια μπορεί να περιγραφεί από τρεις θερμοδυναμικές παραμέτρους ( $T, \mu_B, \mu_S$ ). Στην κατάσταση αυτή έχουν σταματήσει οι διαδικασίες που παράγουν νέα αδρόνια και έτσι έχει σταθεροποιηθεί το είδος των σωματίων. Μιλάμε, έτσι, για ένα «χημικό πάγωμα» των παραγόμενων σωματίων.

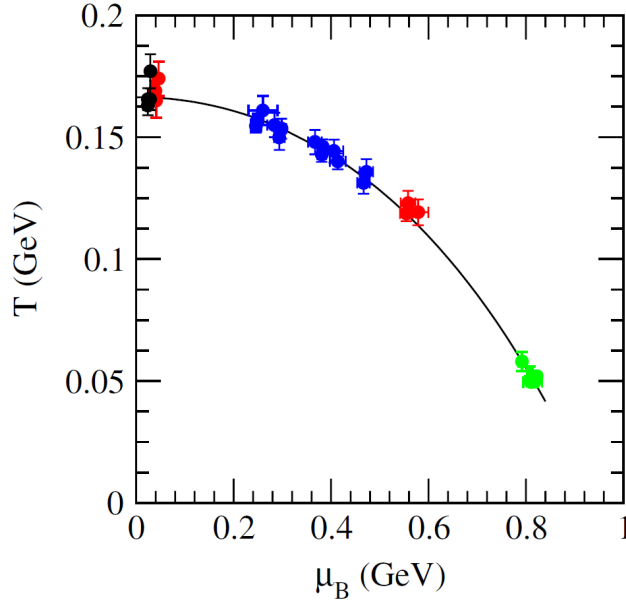
Έχει διαπιστωθεί [1] ότι ανάλογα με τις συνθήκες των πειραμάτων οι θερμοδυναμικές μεταβλητές ( $T, \mu_B$ ) σχηματίζουν μία καλά καθορισμένη καμπύλη, όπως στο Σχ. 1 [1]. Η μαύρη γραμμή μπορεί να παραμετροποιηθεί από μία πολυωνυμική προσαρμογή της μορφής:

$$T(\mu_B) = a - b\mu_B^2 - c\mu_B^4, \quad (1)$$

όπου  $a=0.166 \text{ GeV}$ ,  $b=0.139 \text{ GeV}^{-1}$  και  $c=0.053 \text{ GeV}^{-3}$ .

Για να εξαχθούν τα πειραματικά σημεία που απεικονίζονται στο Σχ. 1 χρησιμοποιούνται οι μετρούμενοι πληθυσμοί διαφόρων αδρονίων. Στη συνέχεια συγκρίνονται με το θεωρητικό μοντέλο που περιγράφει την κατάσταση της θερμοδυναμικής ισορροπίας, δηλαδή το μοντέλο του HG [2]. Στην πιο απλή προσέγγιση το μοντέλο αυτό κάνει χρήση της μεγαλοκανονικής συλλογής, όπου τα αδρόνια θεωρούνται ότι είναι σημειακά, απουσιάζουν οι μεταξύ τους αλληλεπιδράσεις και ακολουθούν προσεγγιστικά τη στατιστική Boltzmann (δηλαδή δεν γίνεται χρήση της ορθής στατιστικής Fermi-Dirac για τα βαρυόνια που είναι φερμιόνια και Bose-Einstein για τα μεσόνια που είναι μποζόνια). Η προσέγγιση αυτή δεν έχει σημαντική επίδραση στις υψηλές θερμοκρασίες και χαμηλές πυκνότητες, ωστόσο η επίδραση καθίσταται σημαντική

στην αντίθετη περίπτωση. Επίσης θα θεωρήσουμε ότι τα αδρόνια αποτελούνται από μόνο 3 είδη κουάρκ, τα  $u$ ,  $d$  και  $s$ . Περαιτέρω τα  $u$  και  $d$  θα τα θεωρήσουμε όμοια, χαρακτηρίζοντάς τα ως  $q$ , αγνοώντας έτσι το ηλεκτρικό φορτίο  $Q$  και θεωρώντας τον βαρυονικό αριθμό,  $B$  και την παραδοξότητα,  $S$  ως τους μόνους κβαντικούς αριθμούς που χαρακτηρίζουν το σύστημά μας. Με αυτές τις απλοποιήσεις το μοντέλο HG μπορεί να περιγραφεί από μία συνάρτηση επιμερισμού της μορφής:



Σχ. 1. Χημικό «πάγωμα» αδρονίων από διάφορα πειράματα σχετικιστικών συγκρούσεων βαρέων ιόντων και προσαρμογή (μαύρη γραμμή).

$$\ln Z^{HG} = \frac{VT}{2\pi^2} \sum_i \lambda_i \sum_j g_{ij} m_{ij}^2 K_2 \left( \frac{m_{ij}}{T} \right) \equiv \frac{VT}{2\pi^2} \sum_i \lambda_i F_i(T) \quad (2)$$

Στην (2),  $V$  είναι ο όγκος του συστήματος,  $T$  η θερμοκρασία του, ενώ ο δείκτης  $i$  διατρέχει τις διάφορες «οικογένειες» των αδρονίων (ελαφρά άγευστα μεσόνια (L.U.M.),  $K$ ,  $\bar{K}$ ,  $N$  &  $\Delta$ ,  $\bar{N}$  &  $\bar{\Delta}$ ,  $\Lambda$  &  $\Sigma$ ,  $\bar{\Lambda}$  &  $\bar{\Sigma}$ ,  $\Xi$ ,  $\bar{\Xi}$ ,  $\Omega$  και  $\bar{\Omega}$ ). Ο δείκτης  $j$  διατρέχει όλους τους συντονισμούς που υπάρχουν σε κάθε οικογένεια,  $m_{ij}$  είναι η μάζα του κάθε συντονισμού και  $g_{ij}$  είναι ο παράγοντας εκφυλισμού που μετρά πόσες καταστάσεις αντιστοιχούν σε κάθε συντονισμό, λόγω σπιν και ισοτοπικού σπιν. Η συνάρτηση  $K_2$  είναι η τροποποιημένη συνάρτηση Bessel 2<sup>ου</sup> είδους. Αθροίζοντας σε όλους τους συντονισμούς κάθε οικογένειας υπολογίζουμε τις ποσότητες  $F_i(T)$  που είναι συνάρτηση μόνο τις θερμοκρασίας, γράφοντας τη (2) με πιο συνοπτικό τρόπο. Επιπρόσθετα οι ποσότητες αυτές είναι ίδιες για σωματάρια και αντισωματάρια. Κάθε μία οικογένεια χαρακτηρίζεται από διαφορετικό περιεχόμενο κουάρκ και επομένως συνδέεται με διαφορετική «τάση φυγής» (fugacity):

$$\begin{aligned} \lambda_i &= \exp\left(\frac{\mu_i}{T}\right) = \exp\left(\frac{B_i \mu_B + S_i \mu_S}{T}\right) = \exp\left(\frac{B_i \mu_B}{T}\right) \exp\left(\frac{S_i \mu_S}{T}\right) = \\ &= \left[ \exp\left(\frac{\mu_B}{T}\right) \right]^{B_i} \left[ \exp\left(\frac{\mu_S}{T}\right) \right]^{S_i} \equiv \lambda_B^{B_i} \lambda_S^{S_i} \quad (3) \end{aligned}$$

Στην (3)  $B_i$  και  $S_i$  είναι αντίστοιχα ο βαρυονικός αριθμός και η παραδοξότητα που μεταφέρει ένα αδρόνιο που ανήκει σε συγκεκριμένη αδρονική οικογένεια. Τα  $\lambda_i$  και τα χαρακτηριστικά των οικογενειών αποτυπώνονται στον Πίνακα 1. Αναπτύσσοντας ως προς τις οικογένειες, η συνάρτηση επιμερισμού (1) μπορεί να γραφτεί ως:

$$\begin{aligned} \ln Z^{HG} &= \frac{VT}{2\pi^2} \left[ F_0(T) + (\lambda_S + \lambda_S^{-1}) F_1(T) + (\lambda_B + \lambda_B^{-1}) F_2(T) + (\lambda_B \lambda_S^{-1} + \lambda_B^{-1} \lambda_S) F_3(T) + \right. \\ &\quad \left. + (\lambda_B \lambda_S^{-2} + \lambda_B^{-1} \lambda_S^2) F_4(T) + (\lambda_B \lambda_S^{-3} + \lambda_B^{-1} \lambda_S^3) F_5(T) \right] \quad (4) \end{aligned}$$

Οικογένεια	$i$	Περιεχόμενο	$B_i$	$S_i$	$\mu_i$	$\lambda_i$
L.U.M.	0	$q\bar{q}$	0	0	0	1
K	1	$q\bar{s}$	0	1	$\mu_S$	$\lambda_S$
$\bar{K}$	-1	$\bar{q}s$	0	-1	$-\mu_S$	$\lambda_S^{-1}$
N & $\Delta$	2	$qqq$	1	0	$\mu_B$	$\lambda_B$
$\bar{N}$ & $\bar{\Delta}$	-2	$\bar{q}\bar{q}\bar{q}$	-1	0	$-\mu_B$	$\lambda_B^{-1}$
$\Lambda$ & $\Sigma$	3	$qqqs$	1	-1	$\mu_B - \mu_S$	$\lambda_B \lambda_S^{-1}$
$\bar{\Lambda}$ & $\bar{\Sigma}$	-3	$\bar{q}\bar{q}\bar{s}$	-1	1	$-\mu_B + \mu_S$	$\lambda_B^{-1} \lambda_S$
$\Xi$	4	$qsss$	1	-2	$\mu_B - 2\mu_S$	$\lambda_B \lambda_S^{-2}$
$\bar{\Xi}$	-4	$\bar{q}\bar{s}\bar{s}\bar{s}$	-1	2	$-\mu_B + 2\mu_S$	$\lambda_B^{-1} \lambda_S^2$
$\Omega$	5	$ssss$	1	-3	$\mu_B - 3\mu_S$	$\lambda_B \lambda_S^{-3}$
$\bar{\Omega}$	-5	$\bar{s}\bar{s}\bar{s}\bar{s}$	-1	3	$-\mu_B + 3\mu_S$	$\lambda_B^{-1} \lambda_S^3$

Πίνακας 1. Χαρακτηριστικά των αδρονικών οικογενειών που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο HG.

Για να υπολογίσουμε τον πληθυσμό ενός σωματίου  $ij$  (μέλος της οικογένειας  $i$ ) μέσα στο HG θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τη σχέση:

$$N_{ij} = \frac{VT}{2\pi^2} \lambda_i g_{ij} m_{ij}^2 K_2 \left( \frac{m_{ij}}{T} \right). \quad (5)$$

Προκειμένου να απαλείψουμε μία πρόσθετη παράμετρο, αυτή του όγκου, μπορούμε από την (5) να σχηματίσουμε λόγους σωματιακών πληθυσμών, δηλαδή:

$$a_{ij,kl} \equiv \frac{N_{ij}}{N_{kl}} = \frac{\lambda_i g_{ij} m_{ij}^2 K_2(m_{ij}/T)}{\lambda_k g_{kl} m_{kl}^2 K_2(m_{kl}/T)}. \quad (6)$$

Μία απαίτηση που πρέπει να έχει το μοντέλο μας είναι ότι πρέπει η μέση συνολική παραδοξότητα,  $\langle S \rangle$ , του συστήματος να είναι 0. Αυτό προκύπτει από το γεγονός ότι οι αρχικοί πυρήνες που συγκρούονται δεν έχουν παραδοξότητα. Η συνθήκη αυτή επιβάλλει έναν σύνδεσμο στις θερμοδυναμικές μεταβλητές  $(T, \mu_B, \mu_S)$  που πρέπει να υπολογίσουμε για το μοντέλο μας. Συνεπώς, στην πραγματικότητα οι μεταβλητές που πρέπει να υπολογίσουμε είναι δύο. Σύμφωνα με την (4) η δεσμευτική αυτή συνθήκη είναι:

$$\langle S \rangle = 0 \Rightarrow \lambda_S \frac{\partial \ln Z^{HG}}{\partial \lambda_S} = 0 \Rightarrow \Phi_S(T, \mu_B, \mu_S) = 0, \quad (7)$$

όπου:

$$\Phi_S(T, \mu_B, \mu_S) = (\lambda_S - \lambda_S^{-1}) F_1(T) + (-\lambda_B \lambda_S^{-1} + \lambda_B^{-1} \lambda_S) F_3(T) + 2(-\lambda_B \lambda_S^{-2} + \lambda_B^{-1} \lambda_S^2) F_4(T) + 3(-\lambda_B \lambda_S^{-3} + \lambda_B^{-1} \lambda_S^3) F_5(T), \quad (7a)$$

είναι ποσότητα ανάλογη της πυκνότητας της παραδοξότητας:  $\Phi_S = \left[ (2\pi^2) / VT \right] n_S$ .

Σε αυτήν την εργασία θα δοθούν από πειράματα κάποιοι μετρημένοι σωματιακοί λόγοι με τα σφάλματά τους. Οι λόγοι αυτοί έστω ότι είναι  $\rho_m$  το πλήθος ανά πείραμα. Χάριν απλότητας ο δείκτης  $\rho$  του λόγου θεωρούμε ότι αντιπροσωπεύει όλους τους δείκτες στην (6). Συνεπώς, έχουμε για κάθε πείραμα, τις παρατηρήσεις:

$$a_\rho \pm \delta a_\rho, \rho = 1, \dots, \rho_m. \quad (8)$$

Σημειώνουμε, ότι πολλές φορές στα πειράματα σε κάθε μέτρηση σωματιακού πληθυσμού μπορεί να υπάρχει τροφοδότηση όχι μόνο από πρωταρχικά σωματάρια που βρίσκονταν σε θερμοδυναμική ισορροπία, αλλά και από σωματάρια που προέρχονται από διάσπαση βαρύτερων συντονισμών. Χάριν απλοποίησης θα θεωρήσουμε ότι οι μετρήσεις αφορούν μόνο πρωταρχικά σωματάρια.

Μπορούμε για κάθε παρατήρηση να υπολογίσουμε από την (6) τη θεωρητική τιμή του αντίστοιχου λόγου:

$$a_{\rho,th}(T, \mu_B, \mu_S), \quad \rho = 1, \dots, \rho_m, \quad (9)$$

σα συνάρτηση των θερμοδυναμικών μεταβλητών που υπακούουν στον σύνδεσμο (7).

Σκοπός μας είναι η ελαχιστοποίηση της ποσότητας:

$$\chi^2 = \sum_{\rho=1}^{\rho_m} \left[ \frac{a_{\rho} - a_{\rho,th}(T, \mu_B, \mu_S)}{\delta a_{\rho}} \right]^2. \quad (10)$$

Η ελαχιστοποίηση αυτή θα επιτρέψει τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών παραμέτρων που θα αντιπροσωπεύουν το χημικό πάγωμα του συστήματος που παρήγαγε τα σωμάτια. Θα υπολογιστούν ακόμα και τα σφάλματα των θερμοδυναμικών μεταβλητών. Από τη σύγκριση των θεωρητικών τιμών των λόγων με τις πειραματικές τους μέσα στα όρια των πειραματικών σφαλμάτων θα διαπιστωθεί αν μπορεί να γίνει αποδεκτή η υπόθεση της προέλευσης των σωματίων από μία κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Αυτό, επίσης, μπορεί να γίνει και από την τιμή της ποσότητας  $\chi^2/\text{dof}$ , όπου dof είναι ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας,  $\text{dof} = \rho_m - 3 + 1 = \rho_m - 2$ .

Η παραπάνω διαδικασία θα επαναληφθεί για  $\nu_m$  πειράματα. Τα ζεύγη τιμών  $(T, \mu_B)$  για κάθε πείραμα θα τοποθετηθούν σε διάγραμμα, ώστε να έχουμε μία γενική εικόνα της καμπύλης αδρονικού «παγώματος». Στα σημεία αυτά μπορεί με κατάλληλη προσαρμογή, να υπολογιστεί η αντίστοιχη καμπύλη και να συγκριθεί με την καμπύλη της [1].

## Υλοποίηση

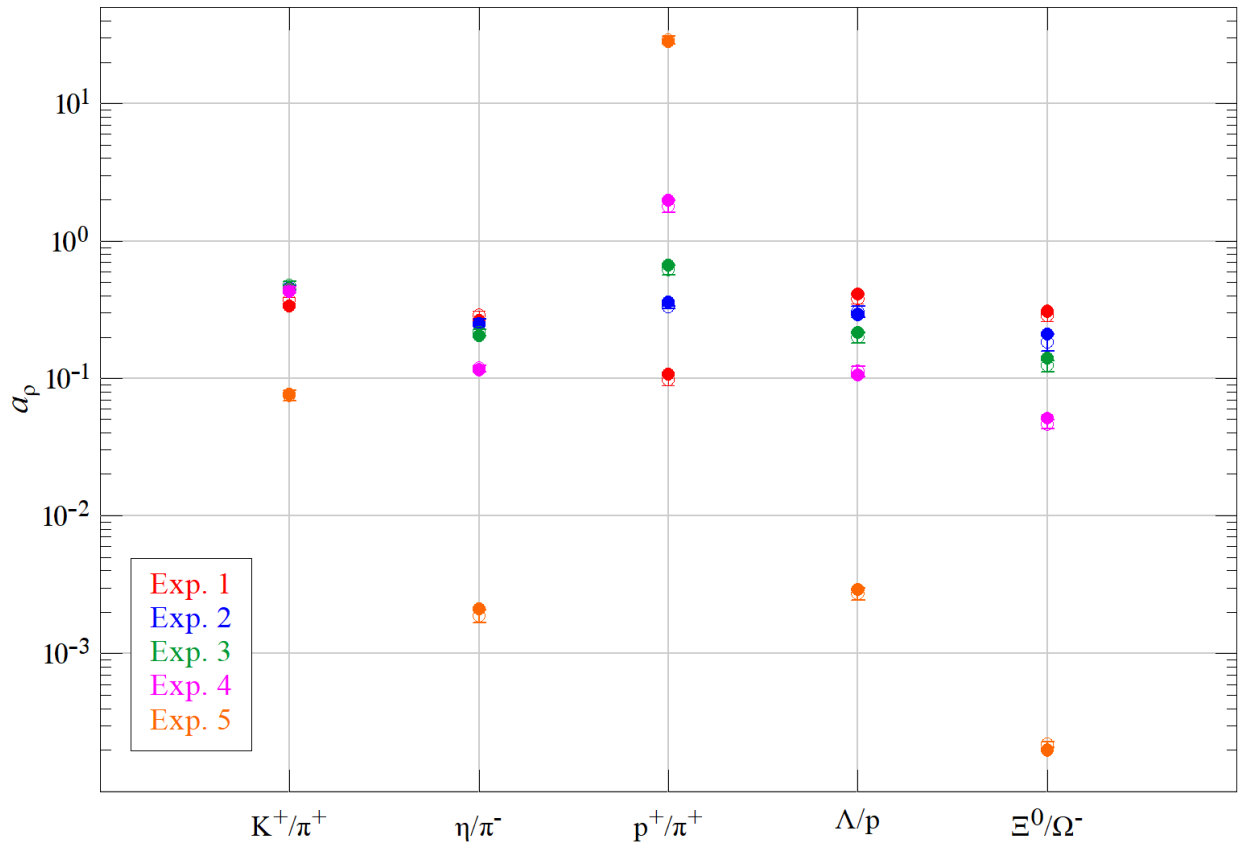
1. Θα σας δοθεί αρχείο excel που περιέχει τις μάζες  $m_{ij}$  και τους παράγοντες  $g_{ij}$  των επαρκώς εξακριβωμένων πειραματικά αδρονίων σύμφωνα με την [4]. Γράψτε υπολογιστικό πρόγραμμα σε όποια γλώσσα προγραμματισμού επιθυμείτε, ώστε να μπορείτε να υπολογίζετε τη συνάρτηση επιμερισμού του HG, σύμφωνα με τις (2), (4). Επίσης θα πρέπει να μπορείτε να υπολογίζετε τη συνολική παραδοξότητα,  $\langle S \rangle$ , ή ισοδύναμα την ποσότητα  $\Phi_S$  (7α). Ακόμα, θα πρέπει να μπορείτε να υπολογίζετε για κάθε αδρόνιο τον πληθυσμό του σύμφωνα με την (5) και για κάθε ζεύγος σωματίων τον αντίστοιχο λόγο, σύμφωνα με την (6).

2. Γράψτε υπορουτίνα που να μπορεί να λύνει αριθμητικά την εξίσωση (7) ως προς τη μεταβλητή  $\mu_S$ , όταν δίνεται το ζεύγος των τιμών  $(T, \mu_B)$ . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας μία απλή μέθοδο Newton-Raphson με χρήση της παραγώγου  $\partial \Phi_S / \partial \mu_S$ , ή με όποιο άλλο τρόπο θέλετε. Έτσι, θα έχετε την τιμή του χημικού δυναμικού  $\mu_S$ , σα συνάρτηση των τιμών  $(T, \mu_B)$ , δηλαδή θα έχετε το  $\mu_S(T, \mu_B)$ .

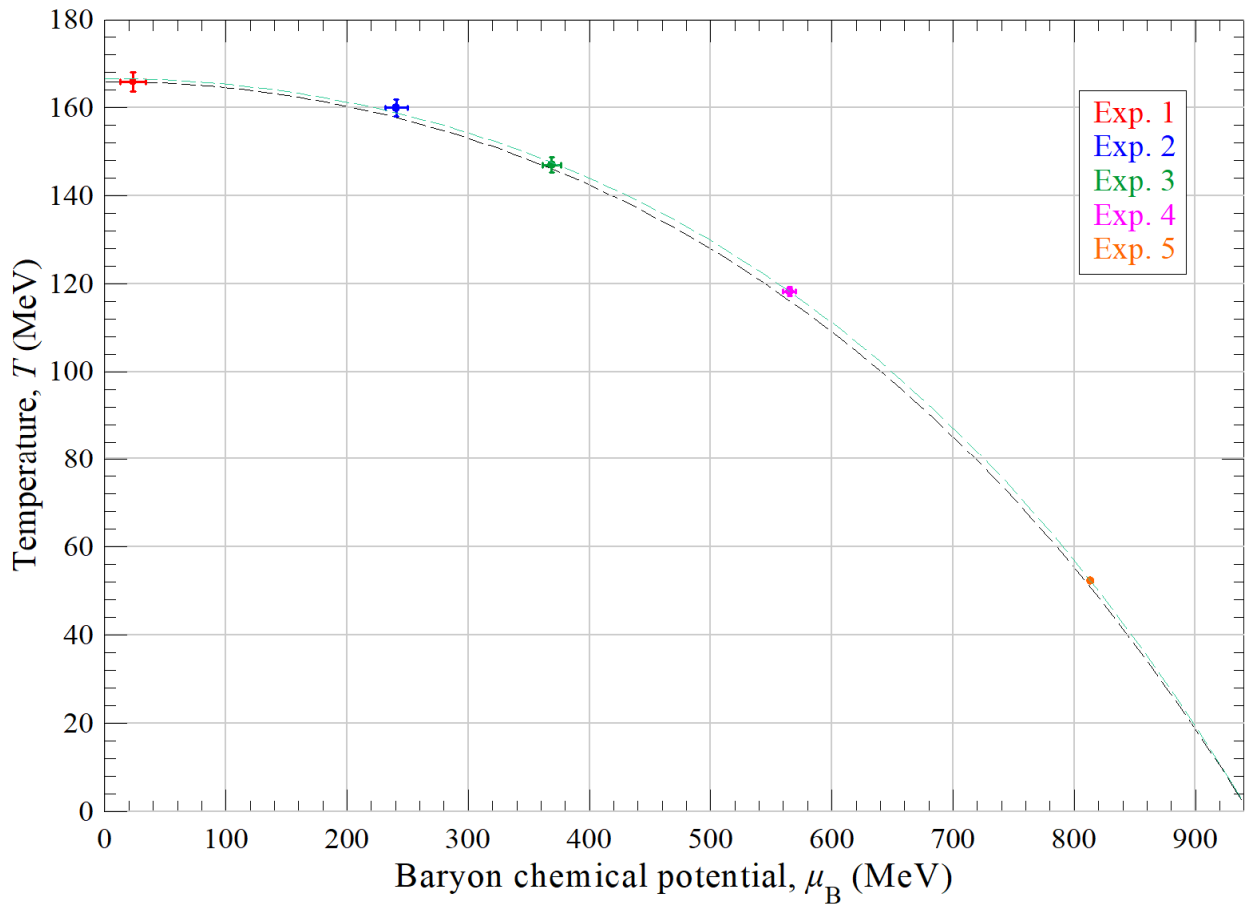
3. Γράψτε υπορουτίνα που υπολογίζει τη συνάρτηση  $\chi^2$  (10) για κάθε πείραμα, χρησιμοποιώντας τις παρατηρήσεις (8) και τις θεωρητικές προβλέψεις (9) για ζεύγος τιμών  $(T, \mu_B)$ . Εδώ πρέπει να χρησιμοποιήσετε την υπορουτίνα του βήματος 2, δηλαδή να την καλείτε κάθε φορά που θα πρέπει να υπολογίσετε τη συνάρτηση  $\chi^2$ . Έτσι ουσιαστικά έχετε την  $\chi^2(T, \mu_B)$ .

4. Προβείτε σε ελαχιστοποίηση της συνάρτησης  $\chi^2$  για ένα συγκεκριμένο πείραμα εξάγοντας τις τιμές  $(T_m, \mu_{B,m})$  που ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση αυτή. Βρείτε και την ελάχιστη τιμή αυτής,  $\chi_m^2$  και την ποσότητα  $\chi_m^2/\text{dof}$ . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας τον πίνακα Hessian για τη συνάρτηση  $\chi^2(T, \mu_B)$  του βήματος 3, ή με όποιο άλλο τρόπο θέλετε. Χρησιμοποιώντας την υπορουτίνα του βήματος 2, υπολογίστε την αντίστοιχη τιμή του  $\mu_{S,m}$ . Έτσι διαθέτετε τις βέλτιστες θερμοδυναμικές μεταβλητές  $(T_m, \mu_{B,m}, \mu_{S,m})$  που αντιστοιχούν στο πείραμα αυτό.

5. Υπολογίστε τα σφάλματα  $\delta T_m, \delta \mu_{B,m}$  που αντιστοιχούν στις μεταβλητές  $T_m, \mu_{B,m}$ . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας τον πίνακα Hessian για τη συνάρτηση  $\chi^2(T, \mu_B)$  του βήματος 3. Υπολογίστε το σφάλμα  $\delta \mu_{S,m}$  που αντιστοιχεί στη μεταβλητή  $\mu_{S,m}$ . Αυτό μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας την υπορουτίνα 2 και τη μέθοδο διάδοσης σφαλμάτων. Καταγράψτε σε πίνακα τις εξαχθείσες τιμές  $(T_m, \mu_{B,m}, \mu_{S,m})$  και τα σφάλματά τους. Τοποθετήστε στο διάγραμμα φάσης  $(T, \mu_B)$  το σημείο  $(T_m, \mu_{B,m})$  του πειράματος με τα σφάλματά του.



Σχ. 3. Σύγκριση θεωρητικά υπολογισμένων σωματιακών λόγων από το μοντέλο HG (κλειστοί κύκλοι) με τους πειραματικά μετρημένους (ανοικτοί κύκλοι) με τα αντίστοιχα πειραματικά σφάλματα.



Σχ. 4. Το χημικό «πάγωμα» των πειραμάτων 1-5. Με πράσινο χρώμα η καμπύλη της προσαρμογής μας και με μαύρο η καμπύλη της [1].

6. Υπολογίστε τις θεωρητικές τιμές των σωματιακών λόγων και συγκρίνετέ τις με τις πειραματικές, υπολογίζοντας την % απόκλιση. Καταγράψτε σε πίνακα τα αποτελέσματά σας, καθώς και σε διάγραμμα όπου θα φαίνεται η πειραματική μέτρηση του σωματιακού λόγου με το σφάλμα της και η αντίστοιχη βέλτιστη θεωρητική πρόβλεψη από το μοντέλο HG. Επιβεβαιώνεται η υπόθεση της θερμοποίησης για το συγκεκριμένο πείραμα;

7. Επαναλάβετε τα βήματα 4-6 για όλα τα πειράματα για τα οποία έχετε μετρήσεις.

8. Ολοκληρώνοντας το βήμα 7 θα έχετε στο διάγραμμα φάσης ( $T, \mu_B$ ) αποτυπωμένα τα σημεία που αντιστοιχούν στα πειράματά σας. Στα σημεία αυτά κάντε προσαρμογή χρησιμοποιώντας συνάρτηση της μορφής:

$$T(\mu_B) = a' - b'\mu_B^2 - c'\mu_B^4, \quad (11)$$

υπολογίζοντας τις τιμές των παραμέτρων  $a'$ ,  $b'$  και  $c'$ . Εδώ μπορείτε να χρησιμοποιήσετε το Logger Pro. Αποτυπώστε στο διάγραμμα φάσης την καμπύλη προσαρμογής και συγκρίνετέ την με αυτή της [1].

9. Στο τέλος της επεξεργασίας σας γράψτε εργαστηριακή αναφορά εξηγώντας αναλυτικά τους υπολογισμούς σας, καταγράφοντας τα συμπεράσματά σας και ενσωματώνοντας πίνακες και διαγράμματα. Σε παράρτημα καταγράψτε τον κώδικά σας. Σε κάθε τμήμα του κώδικά σας θα πρέπει να έχετε ενσωματώσει αρκετές επεξηγήσεις που να εξηγούν σε κάθε βήμα τη διαδικασία που ακολουθείτε. Μπορείτε να χρησιμοποιήσετε ότι πακέτα λογισμικού θέλετε. Ενδεικτικά η αναφορά σας θα περιλαμβάνει διαγράμματα όπως αυτά στα Σχ. 3 και 4.

## Μαθηματικό συμπλήρωμα-Αριθμητικοί υπολογισμοί

### 1. Αριθμητική λύση εξίσωσης με τη μέθοδο Newton-Raphson

Έστω η εξίσωση:

$$f(x) = 0, \quad (\Sigma 1)$$

την οποία δεν μπορούμε να λύσουμε αναλυτικά. Ξεκινούμε από ένα σημείο  $x_0$  που αποτελεί μία αρχική εκτίμηση της λύσης. Στο  $x_0$  φέρνουμε την εφαπτομένη της καμπύλης  $f(x)$  που απαιτεί τη γνώση της παραγώγου της συνάρτησης  $f'(x)$ . Η εξίσωση της εφαπτόμενης είναι:

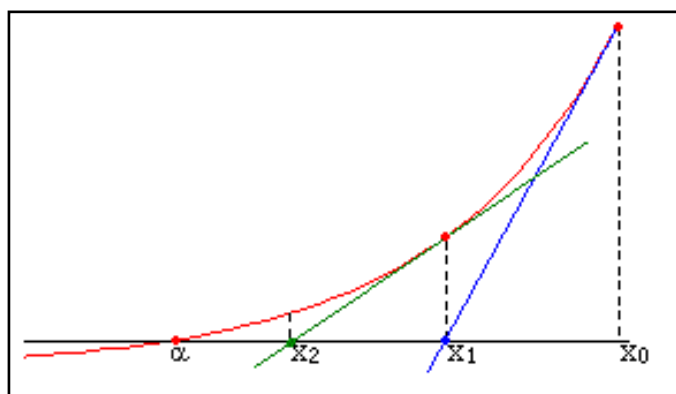
$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad (\Sigma 2)$$

Η εφαπτόμενη τέμνει τον άξονα  $y$  στο σημείο  $x_1$  που αποτελεί μία καλύτερη προσέγγιση στη λύση. Το σημείο αυτό είναι η λύση της εξίσωσης:

$$y = 0 \Rightarrow f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) = 0 \Rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (\Sigma 3)$$

Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία (βλ. Σχ.2) οπότε στο βήμα  $n+1$ , χρησιμοποιώντας τον υπολογισμό από το βήμα  $n$ , η προσέγγισή μας είναι:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (\Sigma 4)$$



Σχ. 2. Τα διαδοχικά βήματα της μεθόδου Newton-Raphson για την εύρεση της λύσης της εξίσωσης  $f(x)=0$  που είναι το σημείο  $x=\alpha$ . Με κόκκινο χρώμα απεικονίζεται η συνάρτηση  $f(x)$ . Το σχήμα έχει ληφθεί από την [3].

Σε κάθε βήμα υπολογίζουμε την τιμή της συνάρτησης  $f(x_n)$ . Αν βρούμε τιμή μικρότερη από μία ακρίβεια  $\varepsilon$  που έχουμε θέσει ως κριτήριο σύγκλισης, τερματίζουμε τη διαδικασία. Επομένως η τελική τιμή  $x_n$  για τη λύση ικανοποιεί το κριτήριο διακοπής:

$$|f(x_n)| \leq \varepsilon. \quad (\Sigma 4)$$

Καλό είναι να θέσουμε και έναν μέγιστο επιτρεπτό αριθμό επαναλήψεων, έτσι ώστε αν τον υπερβούμε να δοθεί μήνυμα αποτυχίας σύγκλισης στη λύση. Σε αυτήν την περίπτωση δοκιμάζουμε ένα διαφορετικό σημείο έναρξης  $x_0$ .

## 2. Γενίκευση της μεθόδου Newton-Raphson για τη λύση συστήματος εξισώσεων

Έστω το σύστημα των  $m$  εξισώσεων με  $m$  αγνώστους:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \end{aligned} \Rightarrow F(\vec{x}) = 0 \quad (\Sigma 5)$$

όπου έχουμε θέσει τις συναρτήσεις στη μορφή πίνακα στήλης  $F$  και τις  $m$  μεταβλητές στη μορφή διανύσματος. Ορίζουμε τον πίνακα  $m \times m$  της Ιακωβιανής  $J_F$  της  $F$ . Το στοιχείο  $ij$  αυτού του πίνακα είναι:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (\Sigma 6)$$

Δηλαδή:

$$J_F(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_m} \end{bmatrix} \quad (\Sigma 7)$$

Βρίσκουμε τον αντίστροφο πίνακα της Ιακωβιανής  $J_F^{-1}$ . Τότε, ξεκινώντας από ένα αρχικό σημείο  $\vec{x}_0$  επαναλαμβάνουμε διαδοχικά βήματα προσέγγισης στο διάνυσμα της λύσης της μορφής:

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - J_F^{-1}(\vec{x}_n) F(\vec{x}_n) \quad (\Sigma 8)$$

## 3. Ελαχιστοποίηση συνάρτησης

Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι ελαχιστοποίησης μίας συνάρτησης  $g$  με  $m$  μεταβλητές, δηλαδή  $g(x_1, x_2, \dots, x_m) = g(\vec{x})$ . Μία από αυτές είναι να λύσουμε το σύστημα των  $m$  εξισώσεων:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_2} &= 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_m} &= 0 \end{aligned} \Rightarrow F(\vec{x}) = 0 \quad (\Sigma 9)$$

Έτσι το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης ανάγεται στην προηγούμενη παράγραφο, όπου οι συναρτήσεις  $f$  αποτελούν τις μερικές παραγώγους της  $g$  ως προς τις μεταβλητές της, δηλαδή:

$$f_i(\vec{x}) = \frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_i} \quad (\Sigma 10)$$

Με αυτή τη λογική ο πίνακας της Ιακωβιανής της  $F$ , που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μία γενικευμένη μέθοδο Newton-Raphson, αποτελεί ταυτόχρονα τον πίνακα Hessian,  $H_g$ , για τη συνάρτηση  $g$ . Ο πίνακας αυτός αποτελείται από τις δεύτερες παραγώγους της  $g$  ως προς τις μεταβλητές της:

$$(J_F)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Rightarrow (H_g)_{ij} = \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\Sigma 11)$$

Δηλαδή:

$$H_g(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial x_1 \partial x_m} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial x_2 \partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 g}{\partial x_m \partial x_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial x_m \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 g}{\partial x_m \partial x_m} \end{bmatrix} \quad (\Sigma 12)$$

Ο τελευταίος πίνακας είναι συμμετρικός.

Η γενικευμένη μέθοδος Newton-Raphson προσφέρει, εκτός από την εύρεση της λύσης που δίνει τις τιμές των παραμέτρων  $\vec{x}_a$  που ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση  $g$  και τον υπολογισμό των σφαλμάτων των παραμέτρων. Ο πίνακας Hessian, που χρειάζεται σε κάθε βήμα της μεθόδου, αν υπολογιστεί στις τελικές τιμές των παραμέτρων μπορεί να μας δώσει εκτίμηση του σφάλματος. Μικρή τιμή της δεύτερης παραγώγου της  $g$  ως προς μία μεταβλητή της, σημαίνει ότι η  $g$  παρουσιάζει ένα ελάχιστο και γύρω από αυτό η τιμή της μεγαλώνει αργά. Συνεπώς μπορούμε να κινηθούμε γύρω από την τιμή αυτής της μεταβλητής, στο ελάχιστο της  $g$ , χωρίς να δούμε σημαντική μεταβολή της  $g$ . Επομένως, το σφάλμα στη μεταβλητή μας θα πρέπει να είναι μεγάλο. Άρα το σφάλμα και η τιμή της Hessian στο ελάχιστο συνδέονται με αντίστροφο τρόπο. Αποδεικνύεται ότι:

$$\delta x_i = \sqrt{(H_g^{-1}(\vec{x}_a))_{ii}} \cdot (\Sigma 13)$$

Δηλαδή υπολογίζουμε την Hessian στο ελάχιστο, στη συνέχεια υπολογίζουμε τον αντίστροφο πίνακα και η τετραγωνική ρίζα των διαγώνιων στοιχείων μας δίνει τα σφάλματα των παραμέτρων.

#### 4. Αντιστροφή πίνακα 2x2

Παραθέτουμε τη γνωστή σχέση για λόγους πληρότητας. Ο αντίστροφος του πίνακα:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (\Sigma 14)$$

είναι ο πίνακας:

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}, \quad |A| = ad - bc \quad (\Sigma 15)$$

#### 5. Αριθμητικός υπολογισμός παραγώγων

Οι παρακάτω σχέσεις παρέχουν την αριθμητική προσέγγιση παραγώγων όταν ο αναλυτικός τους υπολογισμός είναι αδύνατος ή όχι επιθυμητός:



$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (\Sigma 16)$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (\Sigma 17)$$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} = \frac{f(x+h, y+h) - f(x-h, y+h) - f(x+h, y-h) + f(x-h, y-h)}{4h^2} \quad (\Sigma 18)$$

Η ποσότητα  $h$  είναι μία ικανοποιητικά μικρή ποσότητα, ώστε να υπολογίζει σωστά τις παραγώγους, αλλά όχι εξαιρετικά μικρή ώστε να πλησιάζει την ακρίβεια του υπολογιστή, γιατί τότε ο υπολογισμός είναι λανθασμένος (μία πιθανή επιτυχημένη τιμή για το  $h$  θα ήταν  $h=10^{-5}x$ ).

#### 6. Διάδοση σφαλμάτων σε δεσμευτική σχέση παραμέτρων

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε υπολογίσει τις μεταβλητές  $x$  και  $y$  καθώς και τα σφάλματά τους  $\delta x$  και  $\delta y$ . Θέλουμε να υπολογίσουμε τη μεταβλητή  $z$  και το σφάλμα της  $\delta z$ , όταν οι τρεις μεταβλητές συνδέονται με μία δεσμευτική σχέση:

$$g(x, y, z) = 0, \quad (\Sigma 19)$$

την οποία δεν μπορούμε να λύσουμε αναλυτικά ως προς τη μεταβλητή  $z$ , οπότε να μπορέσουμε να εφαρμόσουμε τη γνωστή σχέση διάδοσης σφαλμάτων.

Τότε λύνουμε αριθμητικά την ( $\Sigma 19$ ) ως προς τη  $z$ , για παράδειγμα με τη μέθοδο της παραγράφου 2. Το σφάλμα  $\delta z$  θα προκύψει από τη σχέση:

$$\delta z = \sqrt{\left(\frac{\partial g / \partial x}{\partial g / \partial z} \delta x\right)^2 + \left(\frac{\partial g / \partial y}{\partial g / \partial z} \delta y\right)^2}. \quad (\Sigma 20)$$

#### Αναφορές

- [1] J. Cleymans, H. Oeschler, K. Redlich, S. Wheaton, «Comparison of chemical freeze-out criteria in heavy-ion collisions», *Physical Review C* **73**, 034905 (2006).
- [2] Αναφορές 1-14,17 στην [1]
- [3] [https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s\\_method](https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method)
- [4] R.L. Workman *et al.* (Particle Data Group), *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2022** (2022) 083C01 and 2023 update.