

LJETNI SEMESTAR 2011/2012

NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

Prof. dr. sc. Nils Paar

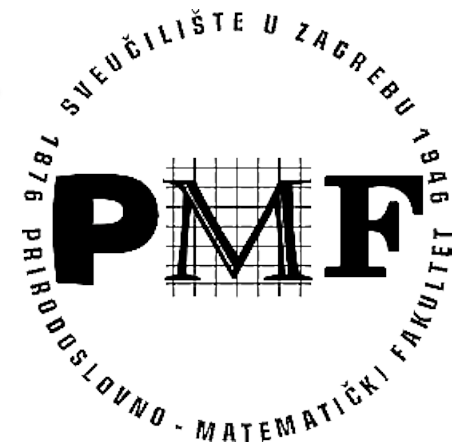


*Fizički odsjek
Prirodoslovno-matematički fakultet
Sveučilište u Zagrebu*

Web: www.phy.hr/~npaar

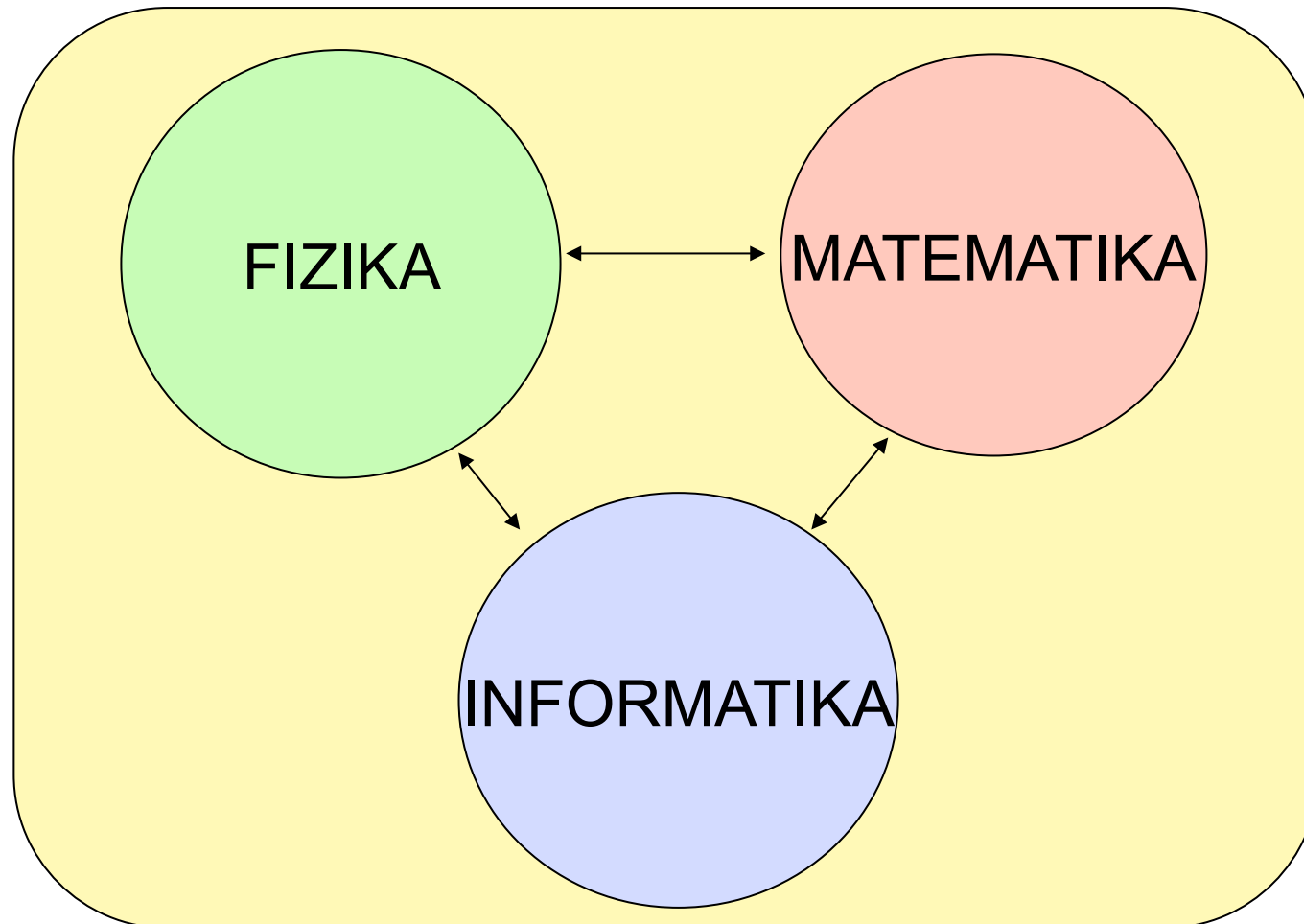
E-mail: npaar@phy.hr

Soba: 404 (4. Kat)



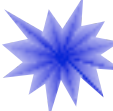
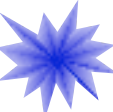
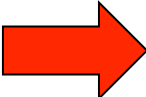
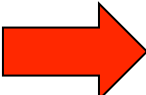
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

Algoritamski pristup i primjena računala u rješavanju problema u znanosti



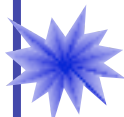
Računalna fizika → razumijevanje fizikalnog sustava u kombinaciji sa numeričkom matematikom omogućuje konstrukciju algoritma za rješavanje određenog problema

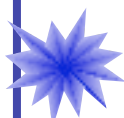
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

-  Fizikalni sustav je određen nekim **zakonima**, **početnim uvjetima**, **rubnim uvjetima**, i ostalim ograničenjima koja utječu na sustav
-  Fizikalni sustav možemo opisati **određenim skupom jednažbi**, npr. vezanim diferencijalnim jednažbama
-  Potrebno je uspostaviti i primjeniti **efikasne numeričke metode** za rješavanje jednažbi
-  Uspostava algoritma, programiranje (u C/C++ jeziku), testiranje programa, primjena programa u konkretnim proračunima

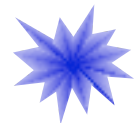
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

- Računalne simulacije su danas sastavni i iznimno važan dio u istraživanjima moderne temeljne i primjenjene znanosti
→ jednako važne kao teorija i eksperiment

 Nova polja unutar računalnih znanosti su nedavno razvijena:
→ računalna fizika, računalna znanost o materijalima, bioinformatika, računalna matematika i mehanika, računalna kemija, itd.

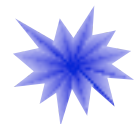
 Računalne simulacije omogućuju uvid u ponašanje fizikalnih sustava, posebno u slučajevima kada se ne mogu naći analitička rješenja ili je eksperiment prekomplikiran i preskup za izvedbu

NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE



Moderno programiranje zahtjeva kombiniranje različitih programskih jezika, interpretiranih (Matlab, Mathematica), skriptnog jezika (Python, Perl), i jezika za intenzivno i složeno računanje (C++, Fortran)

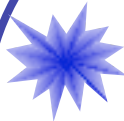
→ značajne razlike u brzini numeričkih izračuna (npr. petlje su sporije u višim programskim jezicima poput Pythona)



U odabiru programskog jezika ključnu ulogu ne igra samo brzina, ponekad je potrebno ući u detalje algoritma, istražiti uvjete stabilnosti i primjenjivosti, prilagodba za posebne uvjete, itd.

U interpretiranim jezicima i funkcijama koje predstavljaju "crnu kutiju", takva kontrola nije moguća

NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE



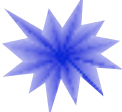
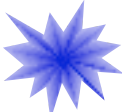
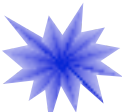
CILJEVI KOLEGIJA:

- Otvoriti novu perspektivu za stjecanje znanja iz fizike zasnovano na matematičkom modeliranju i primjeni numeričkih metoda
- Stimulirati učenje fizike na sličan način kao što to čine istraživači u znanstvenom radu
- Stjecanje temeljnih vještina računalne fizike, programiranje i primjena programa, razumijevanje fizike zasnovano na vlastitom iskustvu
- izrada seminara i prezentacija metode i rezultata

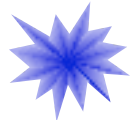
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

- Računalne simulacije se mogu promatrati *kao alternativni pristup znanju* koje se može steći eksperimentom
- ponavljanje računalne simulacije nije toliko skupo i složeno kao što je često slučaj sa eksperimentom
- Računalne simulacije daju ključne informacije za konstrukciju i izvođenje eksperimenta, *usmjeravaju eksperiment u u smjeru gdje se očekuje "nova fizika"*

ŠTO JE POTREBNO ZA SUDJELOVANJE NA NASTAVI

-  Nužno predznanje za sudjelovanje na kolegiju
"Numerička matematika i matematičko modeliranje":
 - elementarno znanje programiranja u C jeziku
(korištenje osnovnih naredbi i funkcija)
-  Nastava se održava isključivo u **Linux** operativnom sustavu!
Obnovljena računalna učionica u potpunosti je prilagođena potrebama ovog kolegija
-  **Linux/Unix je operativni sustav moderne fizike!**
 - alternativna mogućnost: Mac OS operativni sustav

LITERATURA



PREDAVANJA I PRAKTIKUM SU ZASNOVANI NA SLJEDEĆOJ LITERaturi:

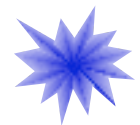
- M. Hjorth-Jensen, Lecture Notes on Computational Physics, University of Oslo (2006). → [link na web stranici kolegija](#)
- E. W. Schmid, G. Spitz, and W. Loesch: Theoretical Physics on the Personal Computer, Springer-Verlag 1990.
- S.E. Koonin, D.C. Meredith: Computational Physics, Addison-Wesley 1990.
- W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B. P. Flannery: Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press

ORGANIZACIJA NASTAVE

- 1 sat predavanja + 2 sata praktičnog rada na računalima
- Nastava će biti prilagođena bolonjskom sustavu obrazovanja, zahtjeva intenzivnu komunikaciju nastavnika i studenata, postoji mogućnost konzultacija bez fiksnog termina (soba 404)
- obvezno je sudjelovanje na nastavi, praktični rad će biti usko vezan uz teme na predavanjima
- Za potpis u indeksu nužno je redovito ispunjavati zadatke koji će biti dani na nastavi (tjedni režim rada i predaje programa)
- *Ocjena se sastoji od dva dijela: 50% ocjena zadataka sa praktikuma, 50% ocjena seminara (nema klasičnog ispita)*
- Etika - zadaci se rješavaju samostalno, kršenje etičkih principa će biti sankcionirano

MATERIJALI KOLEGIJA NA WEB-U

- predavanja će biti redovito objavljivana na web stranici kolegija:




<http://www.phy.hr/~npaar/teaching/teaching.html>

- Postoji link sa www.phy.hr pod "nastavni materijali"
- Na istom mjestu će redovito biti objavljivane ocjene zadataka sa praktikuma

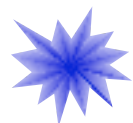
RAČUNALNA FIZIKA NA ISTRAŽIVAČKOM STUDIJU FIZIKE

- Numeričke metode i matematičko modeliranje (3. godina)
- Nuklearna fizika 1 & 2 (4. godina)
- Samostalni seminar iz istraživanja u fizici (5. godina)
- Diplomski rad iz računalno orjentirane teorijske fizike i nuklearne astrofizike (5. godina)

www.phy.hr/~npaar

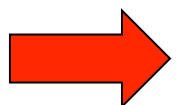
 Npr. Nelinearni dinamički sustavi, primjena teorije mnoštva čestica na egzotičnim femto sustavima, kolektivno gibanje u atomskoj jezgri, egzotični modovi kolektivnih pobuđenja, međudjelovanje neutrina i materije, uhvat elektrona u uvjetima eksplozije Supernove, astrofizički procesi, stvaranje kemijskih elemenata u nukleosintezi, raspršenje elektrona, neutrina na akceleratoru beta snopova, itd.

UVOD U MATEMATIČKO MODELIRANJE



U fizici često nailazimo na potrebu izračuna koji uključuju funkcije koje nisu dane u analitičkom obliku (diferenciranje, integracija, nultočke, itd.)

Funkcija o kojoj se radi može biti zadana na skupu diskretnih točaka, treba je **aproksimirati numeričkim metodama** da se dobije npr. derivacija ili integral



Primjena numeričkih metoda, programiranje u C-u, diskusija numeričke preciznosti

OSNOVNE SMJERNICE U PROGRAMIRANJU

- Prije početka pisanja samog programa, treba dobro razjasniti i razumijeti algoritam
- Treba izabrati najjednostavniji algoritam, na brzini se može kasnije raditi
- Programe treba pisati jasno i pregledno, uvijek voditi računa da druga osoba želi razumijeti kako program radi
- Tok programa treba zadržati što je više moguće linearnim, svaku zadaću treba razbiti na manje dijelove (program razbiti na funkcije)
- Uvijek treba potražiti ako postoji analitičko rješenje ili gdje postoji jednostavni test slučaj radi provjere; preporučljivo je i razvijanje različitih algoritama za rješavanje istog problema

OSNOVNE SMJERNICE U PROGRAMIRANJU

- Preporučljivo je držati se standardnog pisanja programa
- **Treba pisati komentare** koji objašnjavaju što radi određeni dio programa ili funkcija
- **Izbjegavati naredbe tipa "goto"** koje čine program nečitljivim
- Kod imenovanja varibli treba **koristiti nazive koji objašnjavaju što koja varijabla znači** (koristiti znak _ za razdvajanje dijelova u imenu)

MATEMATIČKA BIBLIOTEKA FUNKCIJA

Funkcija	Opis funkcije	Primjer
<code>sqrt(x)</code>	Kvadratni korijen od x	<code>sqrt(900.0) = 30.0</code> <code>sqrt(9.0) = 3.0</code>
<code>exp(x)</code>	Eksponencijalna funkcija e^x	<code>exp(1.0) = 2.718282</code> <code>exp(2.0) = 7.389056</code>
<code>log(x)</code>	Prirodni logaritam od x (baze e)	<code>log(2.718282) = 1.0</code> <code>log(7.389056) = 2.0</code>
<code>log10(x)</code>	Logaritam od x (baze 10)	<code>log10(1.0) = 0.0</code> <code>log10(10.0) = 1.0</code> <code>log10(100.0) = 2.0</code>
<code>fabs(x)</code>	Absolutna vrijednost od x	<code>fabs(5.0) = 5.0</code> <code>fabs(0.0) = 0.0</code> <code>fabs(-5.0) = 5.0</code>
<code>ceil(x)</code>	Zaokružuje x na najmanji cijeli broj ne manji od x	<code>ceil(9.2) = 10.0</code> <code>ceil(-9.8) = -9.0</code>
<code>floor(x)</code>	zaokružuje x na najveći cijeli broj ne veći od x	<code>floor(9.2) = 9.0</code> <code>floor(-9.8) = -10.0</code>
<code>pow(x, y)</code>	x na potenciju y (x^y)	<code>pow(2, 7) = 128.0</code> <code>pow(9, .5) = 3.0</code>
<code>fmod(x, y)</code>	Ostatak od x/y kao floating point broj	<code>fmod(13.657, 2.333) = 1.992</code>
<code>sin(x)</code>	Trigonometrijska funkcija sinus od x (x u radijanima)	<code>sin(0.0) = 0.0</code>
<code>cos(x)</code>	Trigonometrijska funkcija kosinus od x (x u radijanima)	<code>cos(0.0) = 1.0</code>
<code>tan(x)</code>	Trigonometrijska funkcija tangens od x (x u radijanima)	<code>tan(0.0) = 0.0</code>

ZADATAK 1: NEUTRINO-JEZGRA UDARNI PRESJEK

Kako neutrini proizvedeni u procesima supernove međudjeluju sa atomskim jezgrama?



ZADATAK 1: NEUTRINO-JEZGRA UDARNI PRESJEK

Napišite program koji računa **Fermi-Diracovu** distribuciju za spektar neutrina sa supernove

$$f(E_{\nu_e}) = \frac{1}{T^3} \frac{E_{\nu_e}^2}{\exp[(E_{\nu_e}/T) - \alpha] + 1}$$

gdje energija neutrina poprima vrijednosti od 0-80 MeV. Nacrtajte distribuciju za temperature $T=2,4,6,8$ MeV, i $\alpha=0$. Izračunajte usrednjeni udarni presjek za uhvat neutrina na atomskoj jezgri uz pretpostavku da je udarni presjek zadan funkcijom $\sigma_\nu(E_\nu)=\lambda(E_\nu)^2$, gdje je a) $\lambda=0.2 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^2$ i b) $\lambda=0.9 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^2$

$$\langle \sigma_\nu \rangle = \frac{\int dE_\nu \sigma_\nu(E_\nu) f(E_\nu)}{\int dE'_\nu f(E'_\nu)}$$

Nacrtajte usrednjeni udarni presjek kao kontinuiranu funkciju temperature u intervalu $T=2-10$ MeV. Za numeričku integraciju primjenite pravilo pravokutnika i provjerite kako rješenje ovisi o inkrementu integracije h .

$$\int_a^b g(x) dx = h \sum_{n=0}^{N-1} g(x_n)$$

Razbijte program na što veći broj funkcija.

Exercise 1: Neutrino-nucleus cross sections

Write program in C which calculates Fermi-Dirac distribution for neutrinos produced in supernova,

$$f(E_{\nu_e}) = \frac{1}{T^3} \frac{E_{\nu_e}^2}{\exp[(E_{\nu_e}/T) - \alpha] + 1}$$

for the range of neutrino energies 0-80 MeV. Plot the neutrino distributions for temperatures $T=2,4,6,8$ MeV, and $\alpha=0$. Calculate the neutrino flux averaged cross sections for neutrino capture in nuclei, assuming that the cross sections are approximated by functions $\sigma_\nu(E_\nu)=\lambda(E_\nu)^2$, where a) $\lambda=0.2 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^2$ i b) $\lambda=0.9 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^2$

$$\langle \sigma_\nu \rangle = \frac{\int dE_\nu \sigma_\nu(E_\nu) f(E_\nu)}{\int dE'_\nu f(E'_\nu)}$$

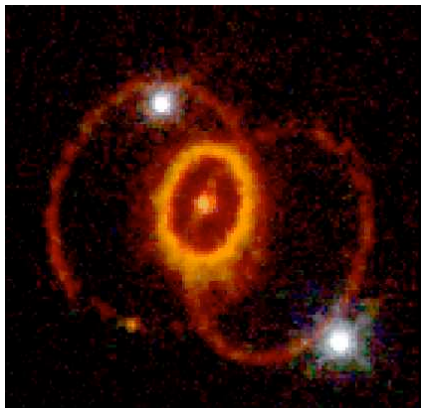
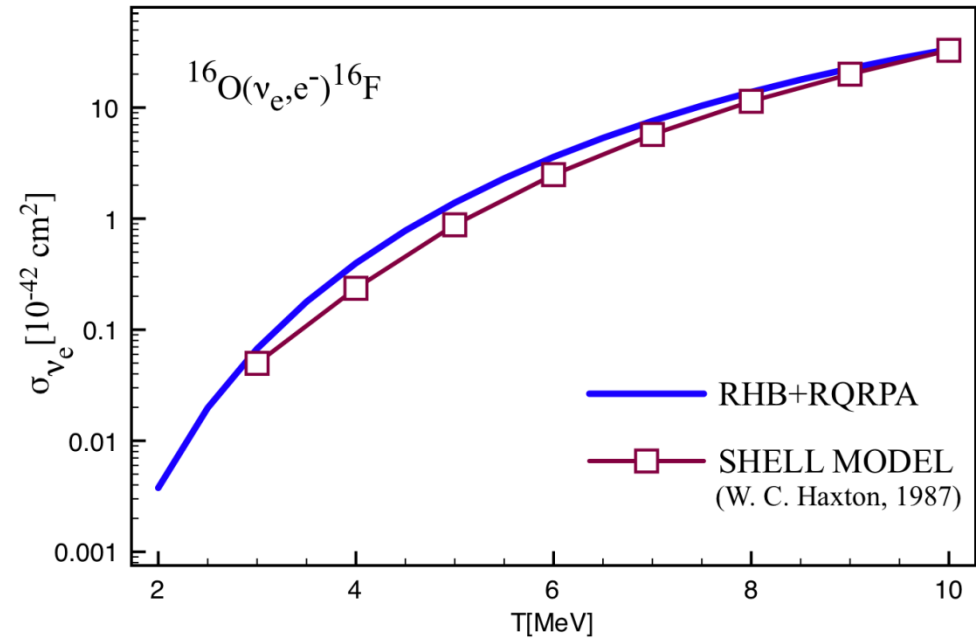
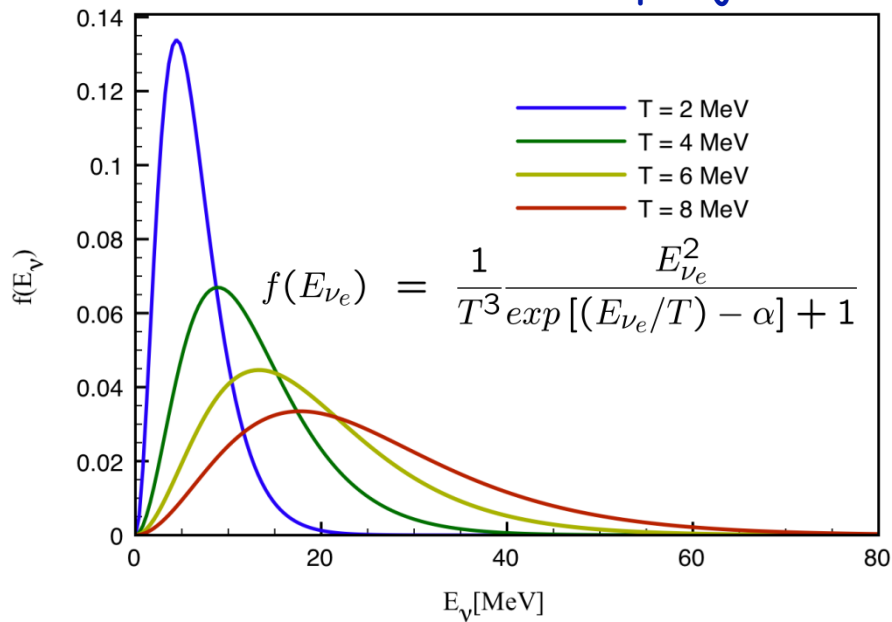
Plot the flux averaged cross sections as continuous function of temperature for the range $T=2-10$ MeV. For numerical integration apply the rectangle method and check how the solution depends on the width of the rectangle h .

$$\int_a^b g(x) dx = h \sum_{n=0}^{N-1} g(x_n)$$

The program should be divided in functions as much as possible.

UDARNI PRESJECI USREDNJNI PREKO TOKA NEUTRINA SA SUPERNOVE

Tok neutrina koji dolaze iz eksplozije Supernove je opisan Fermi-Diracovom raspodjelom



Udarni presjeci usrednjeni preko toka neutrina sa Supernove

$$\langle \sigma_{\nu} \rangle = \frac{\int dE_{\nu} \sigma_{\nu}(E_{\nu}) f(E_{\nu})}{\int dE'_{\nu} f(E'_{\nu})}$$

