

NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

Prof. dr. sc. Nils Paar

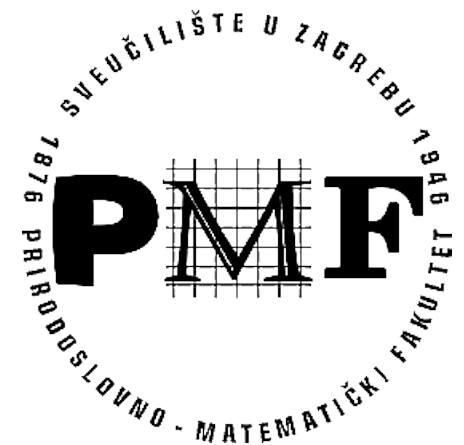


*Fizički odsjek
Prirodoslovno-matematički fakultet
Sveučilište u Zagrebu*

Web: www.phy.hr/~n paar

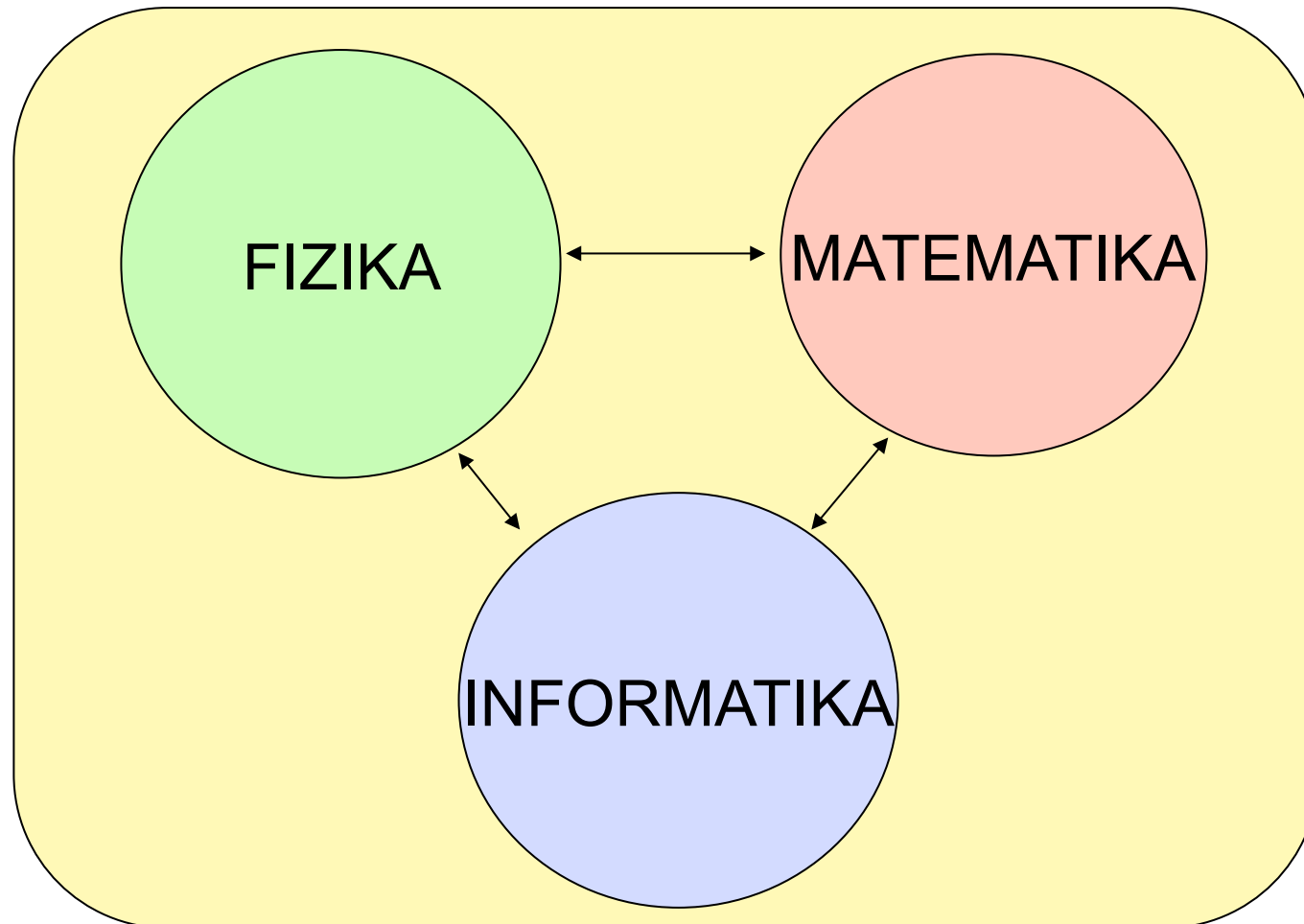
E-mail: n paar@phy.hr

Soba: 404 (4. Kat)



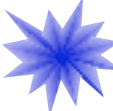
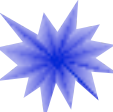
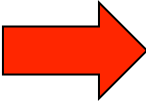
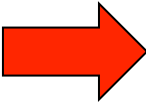
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

Algoritamski pristup i primjena računala u rješavanju problema u znanosti



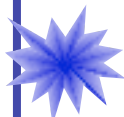
Računalna fizika → razumijevanje fizikalnog sustava u kombinaciji sa numeričkom matematikom omogućuje konstrukciju algoritma za rješavanje određenog problema

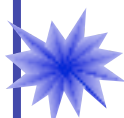
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

-  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

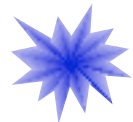
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

- 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.

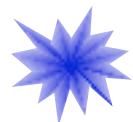
 Računalne simulacije omogućuju uvid u ponašanje fizikalnih sustava, posebno u slučajevima kada se ne mogu naći analitička rješenja ili je eksperiment prekomplikiran i preskup za izvedbu

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)

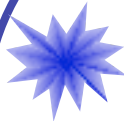
→ značajne razlike u brzini numeričkih izračuna (npr. petlje su sporije u višim programskim jezicima poput Pythona)



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



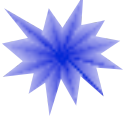
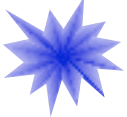
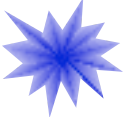
CILJEVI KOLEGIJA:

- 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

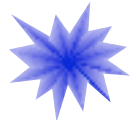
NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE

- 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

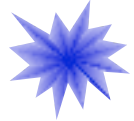
- 1 sat predavanja + 2 sata praktičnog rada na računalima
- Nastava će biti prilagođena bolonjskom sustavu obrazovanja, zahtjeva intenzivnu komunikaciju nastavnika i studenata, postoji mogućnost konzultacija bez fiksnog termina (soba 404)
- obvezno je sudjelovanje na nastavi, praktični rad će biti usko 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

RAČUNALNA FIZIKA NA ISTRAŽIVAČKOM STUDIJU FIZIKE

- Numeričke metode i matematičko modeliranje (3. godina)
- Nuklearna struktura (4. godina)
- Samostalni seminar iz istraživanja u fizici (5. godina)
- Diplomski rad iz teorijske fizike (nuklearna fizika, astrofizika, itd.) (5. godina)
- Doktorski studij fizike

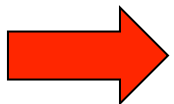
 Npr. Nelinearni dinamički sustavi, primjena teorije mnoštva čestica na egzotičnim femto sustavima, kolektivno gibanje u atomskoj jezgri, egzotični modovi kolektivnih pobuđenja, međudjelovanje neutrina i materije, uhvat elektrona u uvjetima eksplozije Supernove, astrofizički procesi, stvaranje kemijskih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

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 $\sigma_\nu(E_\nu)=\lambda(E_\nu)^{1.5}$, gdje je a) $\lambda=1.5 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^2$, b) $\lambda=9.5 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^2$

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

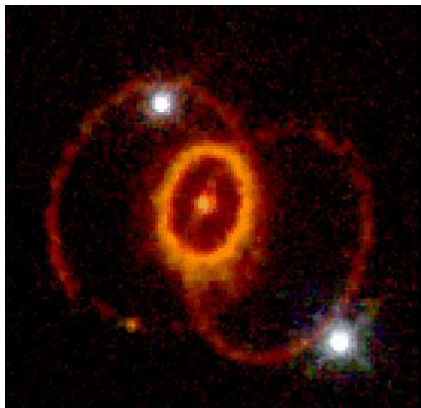
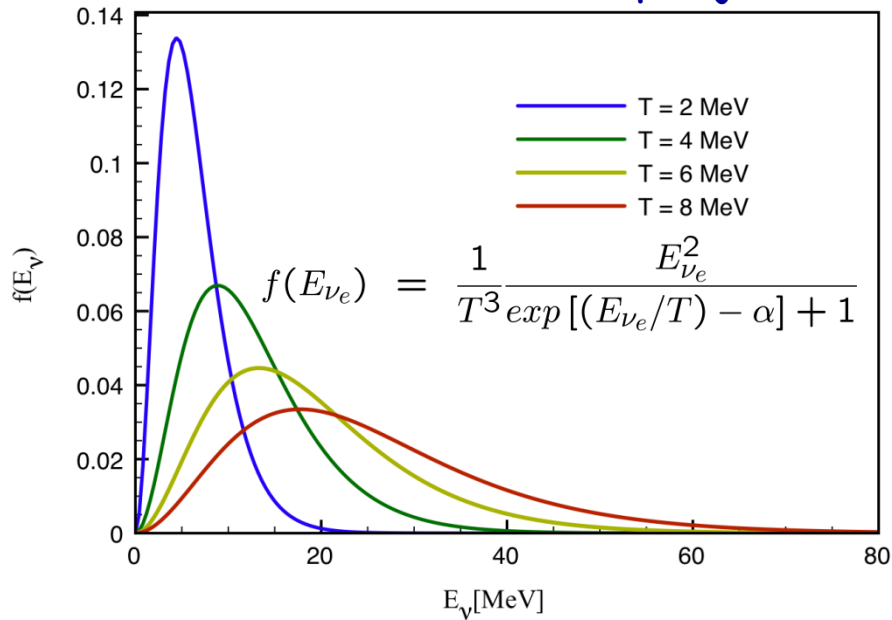
Nacrtajte usrednjeni udarni presjek kao kontinuiranu funkciju temperature u intervalu $T=2-10$ MeV. Za numeričku integraciju primjenite pravilo pravokutnika i provjerite kako rješenje ovisi o inkrementu integracije h .

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

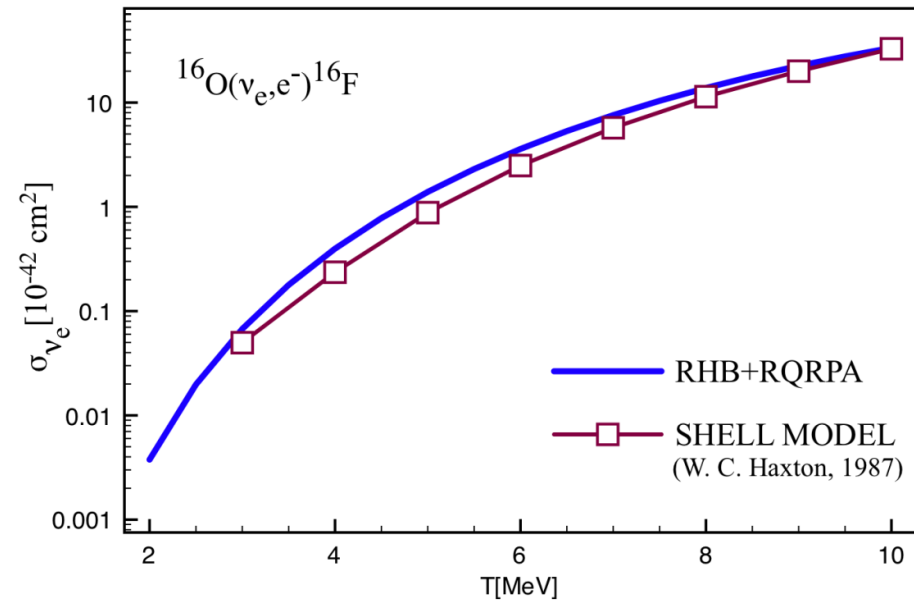
Razbijte program na što veći broj funkcija.

UDARNI PRESJECI USREDNJNI PREKO TOKA NEUTRINA SA SUPERNOVE

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



Primjer udarnih presjeka izračunatih pomoću mikroskopskih modela



Udarni presjeci usrednjeni preko toka neutrina sa Supernove

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

