

**ЧИСЛЕННЫЕ**

# методы и математическое моделирование

**Ю.Н. Прошин**

*кафедра теоретической физики*

*Казанского государственного университета*

[yurii.proshin@ksu.ru](mailto:yurii.proshin@ksu.ru)

*2004-2011, Казань*



# Орг. замечания и литература

---

---

Потоковые лекции - первые 9 недель (18 часов)

Практические занятия по кафедрам (еще 9 недель - 18 ч.)

~~ЭКЗАМЕН~~ или ЗАЧЕТ?

## Коллоквиум!!!



# Орг. замечания и литература

## Рекомендуемая литература

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1-2, 1990, М.: Мир. (аб., ч.з. 9)
2. Прошин Ю.Н., Еремин И.М. Вычислительная физика (практический курс), 2009, Казанский университет, 180 с. (аб., ч.з. 9)
3. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений, 1980, М.: Мир. (аб., ч.з. 9)
4. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение, 2001, М.: Мир. (аб., ч.з. 9)
5. Сборник задач по математике Ч. 4. (Под. ред. Ефимова А.В.) 1990, М.: Наука. (аб., ч.з. 9)
6. Коткин Г.Л., Черкасский В.С. Компьютерное моделирование физических процессов с использованием MatLab, 2001, Новосибирск : НГУ
7. Поршнева С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. – М.: Горячая линия – Телеком, 592 с., 2003
8. Деминов Р.Г., Сайкин С.К., Прошин Ю.Н. Вычислительные методы в теоретической физике. 2000, Казань: КГУ. (ч.з. 9, каф. т.ф.)

# Зачем физику компьютер?

---

---

- “Общечеловеческие” цели и желания
- “Общенаучные” цели
- “Физические” цели



# Зачем физику компьютер??

---

---

- "Общечеловеческие" цели и желания
  - Интернет (общение, поиск информации, заработок, ...)
  - Обучение (языки, предметы, ...)
  - Словари, переводчики, базы данных, справочники, энциклопедии, книги, ...
  - Развлечения (игры, видео, фото, музыка, ...)
  - Разное (???)



# Зачем физику компьютер???

- “Общенаучные” цели
  - Презентации (PowerPoint, Acrobat, ...)
  - Набор и правка статей (WinWord, LaTeX, OpenOffice...)
  - Научная графика (Origin, Grapher, Excel, ...)
  - “Рисовалки” (Corel Draw, Corel Photopaint, Photoshop, ...)
  - Спец. рисовалки (ChemDraw, ...)
  - Дигитайзеры - “оцифровка” кривых (Grafula, ...)



# Зачем физику компьютер????

- “Физические” цели
  - Управление экспериментом {в реальном времени}
  - Аналитические вычисления {символьные преобразования} (Maple, Mathematica, Derive, MathCad, Matlab, ...)
  - Численный анализ (Fortran, Pascal-Delphi, C, ...; Matlab, MathCad, Maple, Mathematica, ...)
  - Моделирование (Matlab; Maple, MathCad, Mathematica; Fortran, C, Pascal-Delphi, спец. программы и пакеты ...)



# Программное обеспечение. Для работы...

---

---

Таких систем - пропасть. Но для эрцгерцога, наверное, купили что-нибудь этакое особенное.

*Гашек "Похождения бравого солдата Швейка"*





# Зачем физику компьютер????

Таких систем – пропасть. Но для эрцгерцога, наверное, купили что-нибудь этакое особенное.

*Йозеф Швейк*

- “Физические” цели

- Управление экспериментом {в реальном времени}
- Аналитические вычисления {символьные преобразования} (Maple, Mathematica, Derive, MathCad, Matlab, ...)
- Численный анализ (Fortran, Pascal-Delphi, C, ...; Matlab, MathCad, Maple, Mathematica, ...)
- Моделирование (Matlab; Maple, MathCad, Mathematica; Fortran, C, Pascal-Delphi, ...)



# Зачем физику компьютер????

Таких систем – пропасть. Но для эрцгерцога, наверное, купили что-нибудь этакое особенное.

*Йозеф Швейк*

- “Физические” цели

- Управление экспериментом {в реальном времени}
- Аналитические вычисления {символьные преобразования}
- Численный анализ
- Моделирование



# Численный анализ??

## Простой пример

Численное решение СЛАУ (систем линейных алгебраических уравнений)

Простой пример:

$$\begin{cases} 2u - v = 5 \\ 3u + v = 100 \end{cases}$$

$$\begin{cases} u + v + w = 5 \\ 3u + v = 15 \\ u - 2v - w = 0 \end{cases}$$

Решение в Maple

```
> solve({2*u-v=5, 3*u+v=100});
```

$$\{u = 21, w = 37\}$$

```
> solve({u+v+w=5, 3*u+v=15, u-2*v-w=0});
```

$$\{u = 4, w = -2, v = 3\}$$

**Вывод:** можно легко решить и без компьютера!

**Вывод:** и опять можно решить без компьютера!



# Численный анализ. НеПростой пример

Численное решение СЛАУ (с большим количеством уравнений)

"Нормальный" пример

(часто встречается в физике и технике)

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^N a_{1j} x_j = b_1 \\ \sum_{j=1}^N a_{2j} x_j = b_2 \\ \dots \\ \sum_{j=1}^N a_{Nj} x_j = b_N \end{array} \right. ,$$

$$a_{ij}, b_i - \text{const}; \quad i, j = 1, 2, \dots, N$$

$$N \sim 10^n, \text{ где } n \geq 2$$

Решение в MatLab

```
>> tic;a=rand(1000,1000); b=rand(1000,1);x=a\b;toc  
elapsed_time =  
1.0620
```

Вывод: невозможно решить без компьютера за допустимое время!



# Численный анализ.

## Методы

- Численное решение СЛАУ (систем линейных алгебраических уравнений)
- - "" -ое дифференцирование
- - "" -ые интегрирование и суммирование
- - "" -ая интерполяция
- - "" -ая аппроксимация (МНК - метод наименьших квадратов) =>LSM
- - "" -ое нахождение собственных значений
- - "" -ое решение НЛАУ (нелинейных алгебраических уравнений)
- - "" -ое решение ОДУ (обыкновенных дифференциальных уравнений)  
=>ODE
- - "" -ое решение ДУвЧП (дифференциальных уравнений в частных прозводных) =>PDE
- - "" -ая оптимизация
- - "" -ое решение интегральных уравнений
- - "" -ое БПФ (быстрое преобразование Фурье) =>FFT
- статистическая обработка эксперимента,

и т.п., и т.д., и др., ...



# Численный анализ

Численные методы описаны и реализованы

в книгах и учебниках по численному анализу;

в банках алгоритмов – NAG, IMSL, ...  
{языки программирования Фортран, Си  
в виде (под)программ};

в математических пакетах  
(MatLab, Maple, Mathematica, Origin, MathCad, ...)  
в виде функций



# Зачем физику компьютер????

Таких систем – пропасть. Но для эрцгерцога, наверное, купили что-нибудь этакое особенное.

*Йозеф Швейк*

- “Физические” цели

- Управление экспериментом {в реальном времени}
- Аналитические вычисления {символьные преобразования}
- Численный анализ
- Моделирование



# Численное моделирование.

## Пример

*Компьютерное моделирование* => в программу закладываются основные законы (свойства, правила) задачи (модели).

### Задача:

- Пусть каждому студенту на курсе из 100 человек выдается по 100 долларов.
- Профессор, который также начинает с 100 долларами в кармане, выбирает случайным образом студента и бросает монету.
- Если выпадает "решка", профессор дает студенту 2 доллара; в противном случае студент дает профессору 2 доллара.
- Ни профессору, ни студенту не разрешается делать долги.

### Вопросы:

- Какова вероятность того, что у студента будет  $n$  долларов?
- Какова вероятность того, что у профессора будет  $m$  долларов?
- Одинаковы ли эти две вероятности?





# Численное моделирование.

## Пример

### Задача:

- Студенту  $\Rightarrow$  100 долларов. Профессору  $\Rightarrow$  100 долларов

### Вопросы:

- Какова вероятность того, что у студента имеется  $n$  долларов?
- Какова вероятность того, что у профессора имеется  $m$  долларов?
- Одинаковы ли эти две вероятности?

### Как искать ответы:

- эксперимент?
- аналитические методы?
- **правила игры  $\Rightarrow$  в программу для компьютера  $\Rightarrow$  промоделировать большое число обменов и вычислить вероятности**

### "Что будет, если...?"

Например, как бы изменились вероятности, если бы обмен производился по 1 доллару, а не по 2? Или по 0.5? Или... ? И т.д.



# Численное моделирование.

## Пример

### Задача:

- Студенту  $\Rightarrow$  100 долларов. Профессору  $\Rightarrow$  100 долларов

### Вопросы:

- Какова вероятность того, что у студента имеется  $n$  долларов?
- Какова вероятность того, что у профессора имеется  $m$  долларов?
- Одинаковы ли эти две вероятности?

### Как искать ответы:

- эксперимент?
- аналитические методы?
- **правила игры  $\Rightarrow$  в программу для компьютера  $\Rightarrow$  промоделировать большое число обменов и вычислить вероятности**

Если заменить игроков другими объектами (например, под деньгами понимать энергию) и слегка изменить правила игры, указанный тип моделирования может найти применение в задачах магнетизма и физики частиц

# Метод Монте-Карло!



# Численное моделирование и реальный эксперимент

Использование компьютеров для моделирования в течение последних 25 лет помогло открыть новые упрощающие физические принципы.  
Гулд, Тобочник

## Лабораторный эксперимент

Образец

Физический прибор

Калибровка

Измерение

Анализ данных

## Вычислительный эксперимент

Модель

Программа для компьютера

Тестирование программы

Расчет

Анализ данных



# Общие замечания при решении задач на ЭВМ.

---

---

Постановка задачи и ее уточнение, анализ простейших моделей и ключевых факторов, пробное исследование, построение расчетной модели и обсчет задачи, обработка результатов и...

И с высокой вероятностью исследователя ждет повторение данного цикла или некоторых его частей: постановка, анализ, исследование, обработка и т. д.

Украл, выпил - в тюрьму! Украл, выпил - в тюрьму!  
Романтика!



*Доцент, "Джентльмены удачи"*

Главной целью расчета является все же

понимание, а не число



# Численное моделирование

Методы численного моделирования описаны и реализованы

в книгах и учебниках по моделированию;

в специализированных программах, написанных на Фортране, Си, Дельфи (Паскале),...  
для конкретных целей (квантовая химия, фракталы, квантовомеханические методы Монте-Карло, механика...)

в математических пакетах  
(MatLab, Maple, Mathematica, Origin, MathCad, других CAD'ах, ...)

{В MatLab есть спец. пакет Simulink для создания моделей }



# Примерное содержание курса

---

---

Алгоритмы, методы и неприятности

Некоторые методы и задачи

Метод Монте Карло, Суммирование по решетке,  
Решение СЛАУ и ДифУр-й, Задача Изинга, ...

Нелинейность, Бифуркации, Хаос ...

Обзор программного обеспечения

Подготовка публикаций (статьи) (постеры) (диссертации)

(LaTeX vs WinWord) (PowerPoint)

Internet, где, как и что искать...

и можно ли всё найти?



# Численный анализ.

## Суммирование по решетке

### Расчет постоянной Маделунга

**Энергия** кулоновского взаимодействия в ионном кристалле отдельного иона со всеми остальными

$$M_i = \sum_j \frac{q_i q_j}{R_{ij}} = q_i \sum_j \frac{q_j}{R_{ij}}$$

Здесь  $q_i$  - заряд  $i$ -го иона,  $R_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  - расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м ионами. Для вычисления *решеточной суммы* будем использовать методы **Эвьена** и **Эвальда** [Займан Дж. Принципы твердого тела. М., Наука, 1975].



# Суммирование по решетке. Кристалл перовскита $ABO_3$

Параметры кубической решетки перовскита для разных кристаллов ( $a$  - постоянная решетки при  $T = 298\text{K}$ ).

Кристалл	$KMgF_3$	$KNiF_3$	$KCoF_3$	$KFeF_3$	$KMnF_3$
$a$ (Å) с точностью $\pm 0.001$ Å	3.960	4.014	4.069	4.121	4.190

Координаты атомов в элементарной ячейке :

$B$  (0, 0, 0);  $q_B = 2e$ ;

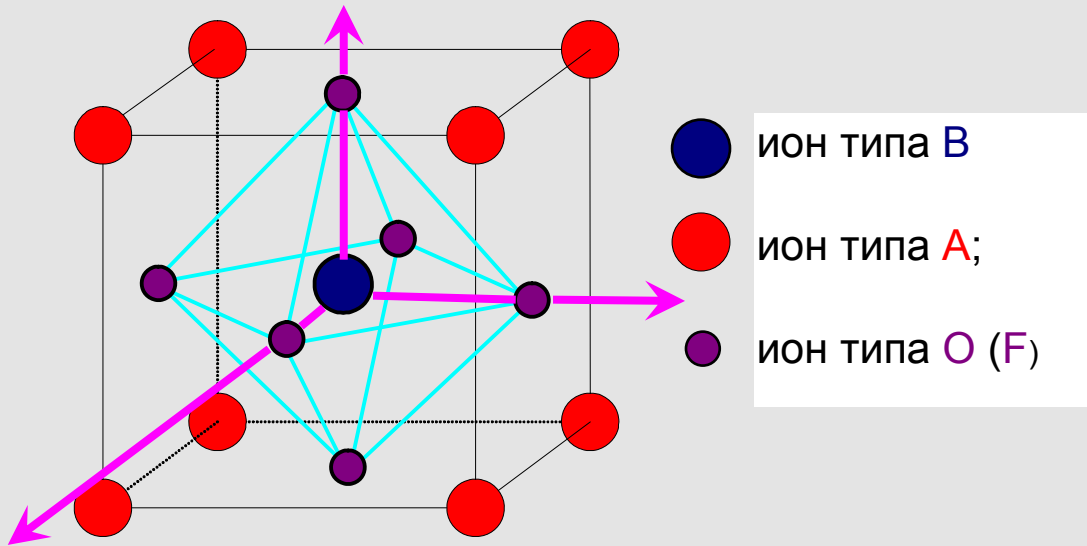
$A$  ( $a/2, a/2, a/2$ ), ( $a/2, a/2, -a/2$ ), ( $a/2, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, a/2, a/2$ ), ( $a/2, -a/2, -a/2$ ),  
( $-a/2, a/2, -a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, -a/2$ );  $q_A = 1e$ ;

$O(F)$  ( $a/2, 0, 0$ ), ( $0, a/2, 0$ ), ( $0, 0, a/2$ ), ( $-a/2, 0, 0$ ), ( $0, -a/2, 0$ ), ( $0, 0, -a/2$ );  $q_O = -1e$ .





# Суммирование по решетке. Постоянная Маделунга



Задача:

Рассчитать  $M_i$  для ионов типа В.

$$M_i = q_i \sum_j \frac{q_j}{R_{ij}}$$

Координаты атомов в элементарной ячейке :

В (0, 0, 0);  $q_B = 2e$ ;

А ( $a/2, a/2, a/2$ ), ( $a/2, a/2, -a/2$ ), ( $a/2, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, a/2, a/2$ ), ( $a/2, -a/2, -a/2$ ),  
 ( $-a/2, a/2, -a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, -a/2$ );  $q_A = 1e$ ;

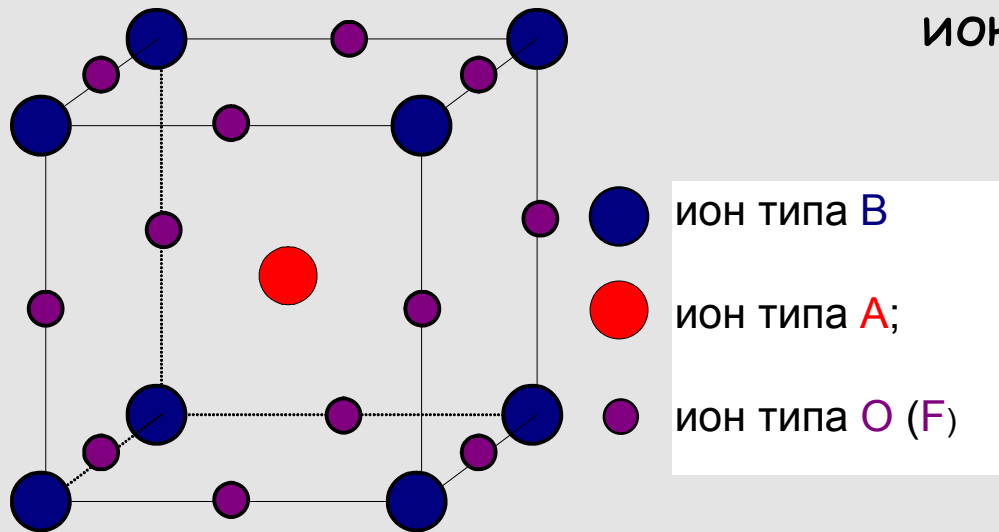
О(F) ( $a/2, 0, 0$ ), ( $0, a/2, 0$ ), ( $0, 0, a/2$ ), ( $-a/2, 0, 0$ ), ( $0, -a/2, 0$ ), ( $0, 0, -a/2$ );  $q_O = -1e$ .



# Суммирование по решетке. Постоянная Маделунга

Задача:

Рассчитать  $M_i$  для  
ионов типа **A**.



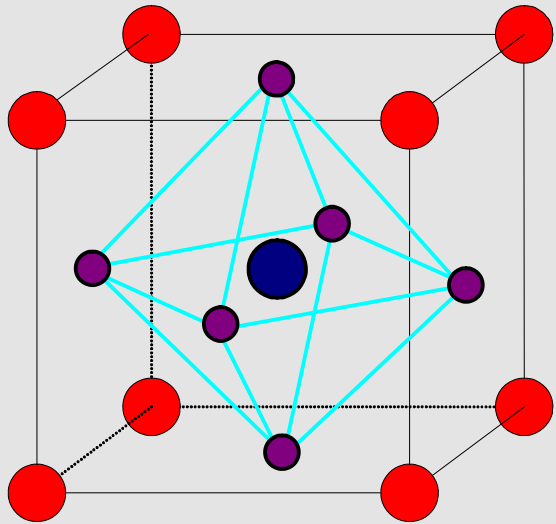
$$M_i = q_i \sum_j \frac{q_j}{R_{ij}}$$

**A** (0, 0, 0);  $q_A = 1e$ ;

**B** ( $a/2, a/2, a/2$ ), ( $a/2, a/2, -a/2$ ), ( $a/2, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, a/2, a/2$ ), ( $a/2, -a/2, -a/2$ ),  
 ( $-a/2, a/2, -a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, -a/2$ );  $q_B = 2e$ ;

**O(F)** ( $a/2, a/2, 0$ ), ( $0, a/2, a/2$ ), ( $a/2, 0, a/2$ ), ( $-a/2, a/2, 0$ ), ( $a/2, -a/2, 0$ ), ( $a/2, 0, -a/2$ ),  
 ( $-a/2, 0, a/2$ ), ( $0, a/2, -a/2$ ), ( $0, -a/2, a/2$ ), ( $-a/2, -a/2, 0$ ), ( $0, -a/2, -a/2$ ),  
 ( $-a/2, 0, -a/2$ );  $q_O = -1e$ .

# Суммирование по решетке. Проблема сходимости



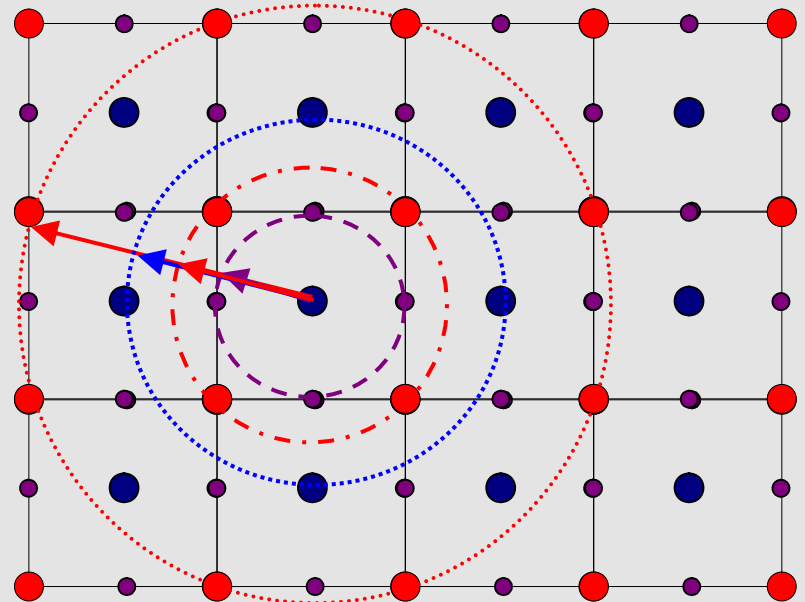
- ион типа B:  $+2e$
- ион типа A:  $+e$
- ион типа O(F):  $-e$

$$M_i = q_i \sum_j \frac{q_j}{R_{ij}}$$

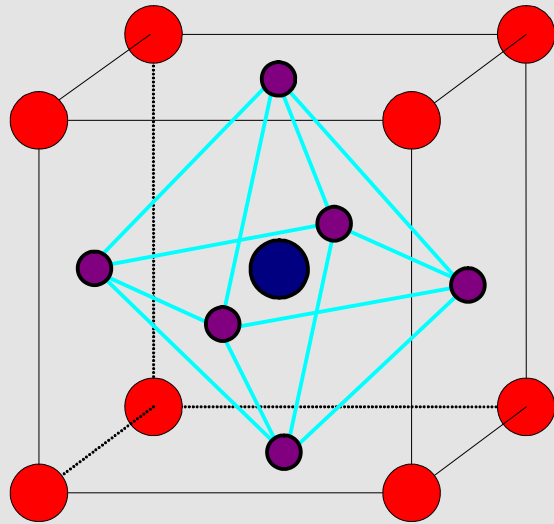
Ряд сходится  
**ОЧЕНЬ** медленно

$$\sum_j \frac{q_j}{R_{ij}} \sim e \sum_R \frac{R}{R} \sim e \sum_R 1$$

для плоскости



# Суммирование по решетке. Проблема сходимости



- ион типа В:  $+2e$
- ион типа А:  $+e$
- ион типа О(Ф):  $-e$

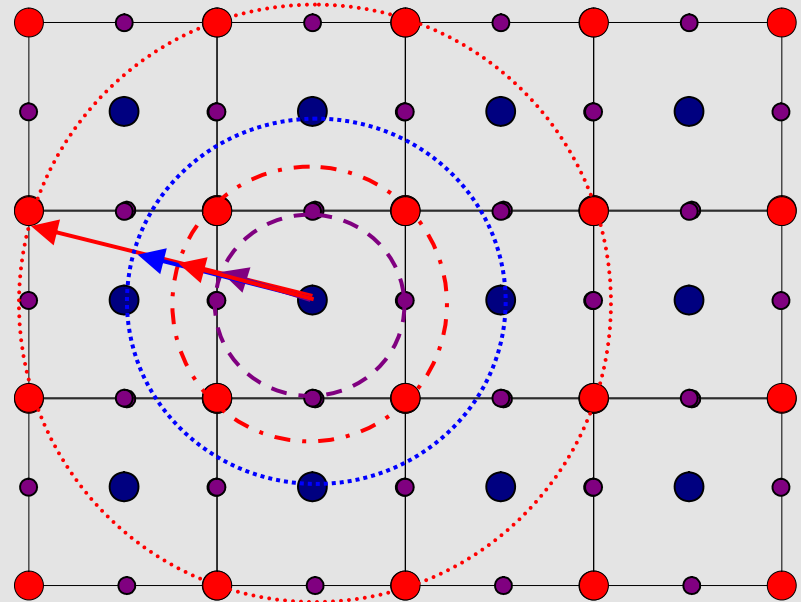
$$M_i = q_i \sum_j \frac{q_j}{R_{ij}}$$

Ряд сходится  
**ОЧЕНЬ** медленно

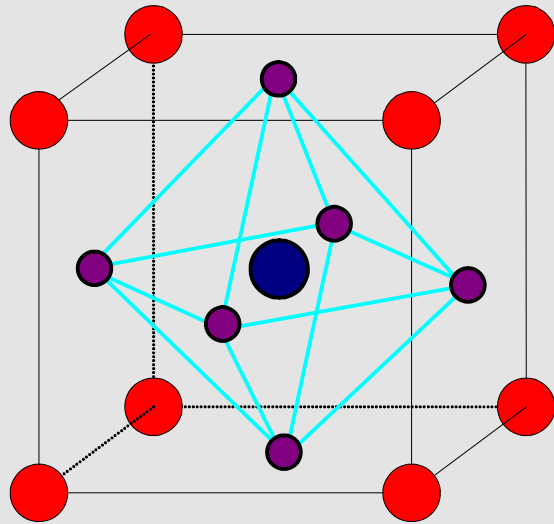
$$\sum_j \frac{q_j}{R_{ij}} \sim e \sum_R \frac{R^2}{R} \sim e \sum_R R$$

$$\sum_j \frac{q_j}{R_{ij}} \sim e \sum_R (\pm) \frac{R^2}{R} \sim e \sum_R (\pm) R$$

для объема



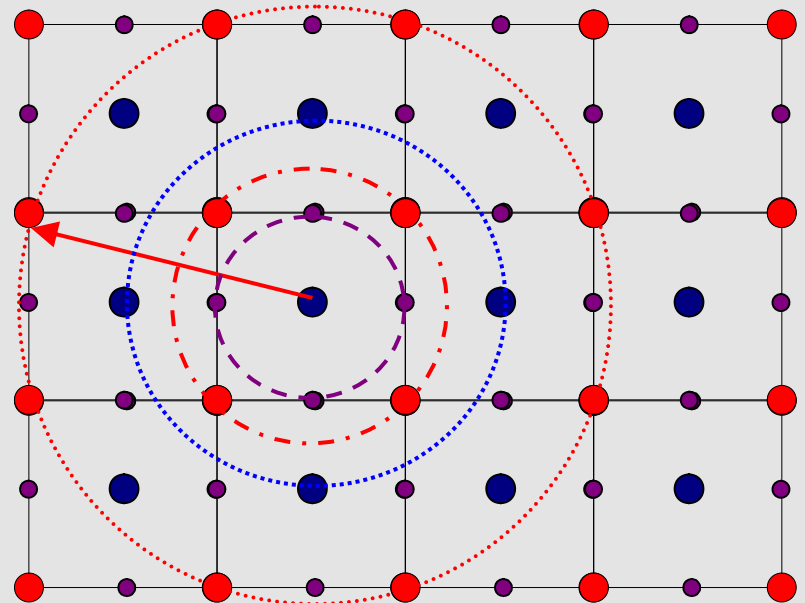
# Суммирование по решетке. Метод Эвьена



- ион типа B:  $+2e$
- ион типа A:  $+e$
- ион типа O(F):  $-e$

суммирование  
по электронейтральным  
"комплексам":

идея Эвьена

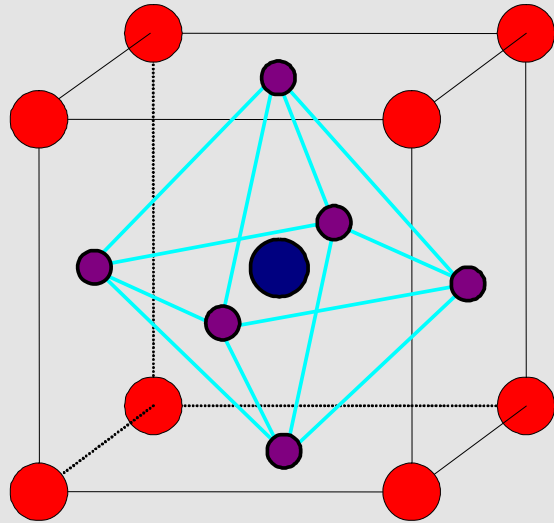


$$\sum_j \frac{q_j}{R_{ij}} \sim e \sum_R (\pm) \frac{R^2}{R^3} \sim e \sum_R (\pm) R^{-1}$$

суммирование  
по мультиполям!!!



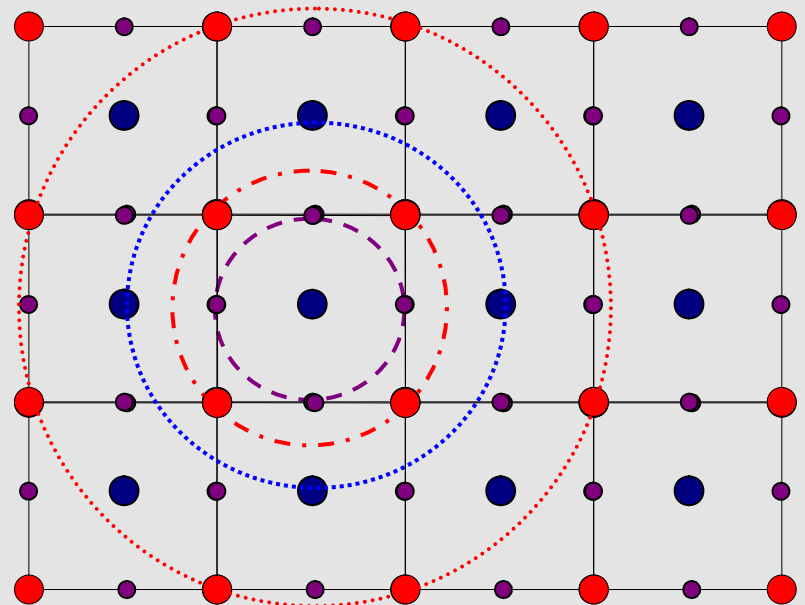
# Суммирование по решетке. Метод Эвьена



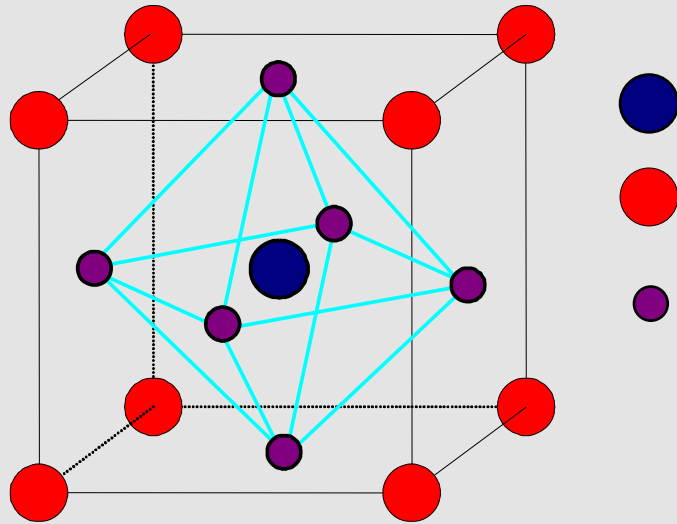
- ион типа B:  $+2e$  Эфф. заряд  $2|e|$
- ион типа A:  $+e$  Эфф. заряд  $|e|/8$
- ион типа O(F):  $-e$  Эфф. заряд  $-|e|/2$

суммирование  
по электронейтральным  
"комплексам":

идея Эвьена



# Суммирование по решетке. Метод Эвьена



- ион типа B:  $+2e$  Эфф. заряд  $2|e|$
- ион типа A:  $+e$  Эфф. заряд  $|e|/8$
- ион типа O(F):  $-e$  Эфф. заряд  $-|e|/2$

суммирование  
по электронейтральным  
"комплексам":

идея Эвьена

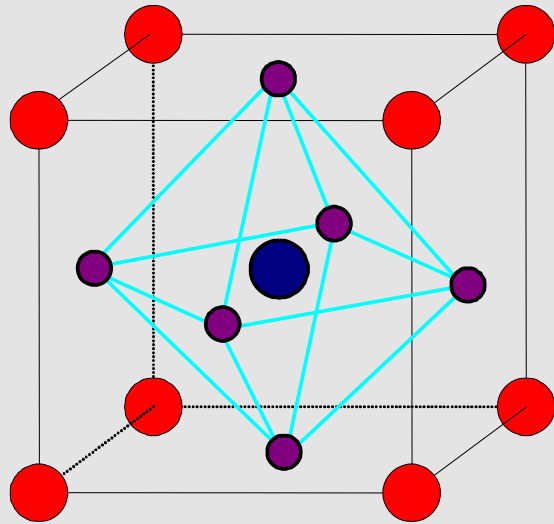
$$Q = \sum_{j=1}^{15} q_j = 8 \cdot q_A^{\text{эфф}} + 6 \cdot q_O^{\text{эфф}} + q_B^{\text{эфф}} =$$

$$= \left\{ 8 \cdot \left( \frac{1}{8} \right) + 6 \cdot \left( -\frac{1}{2} \right) + 2 \right\} e \equiv 0$$

суммирование  
по элементарной ячейке:



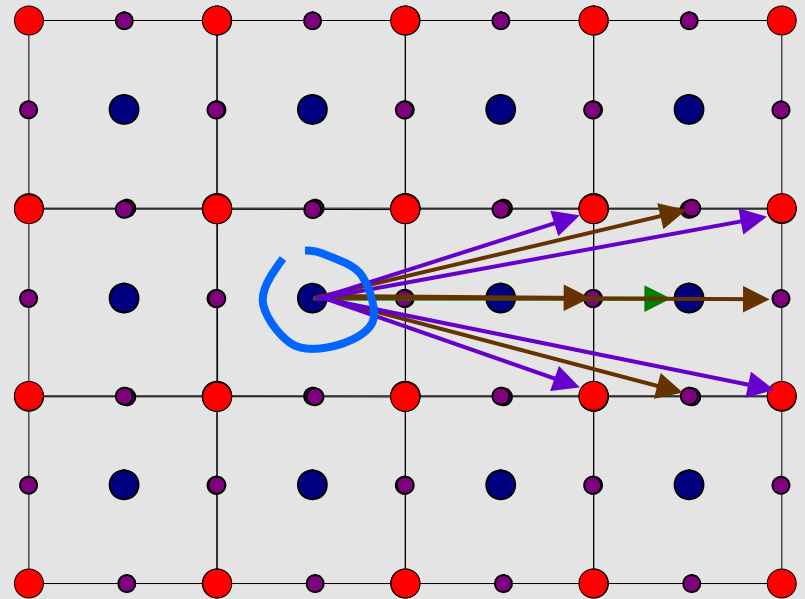
# Суммирование по решетке. Метод Эвьена



- ион типа B:  $+2e$  Эфф. заряд  $2|e|$
- ион типа A:  $+e$  Эфф. заряд  $|e|/8$
- ион типа O(F):  $-e$  Эфф. заряд  $-|e|/2$

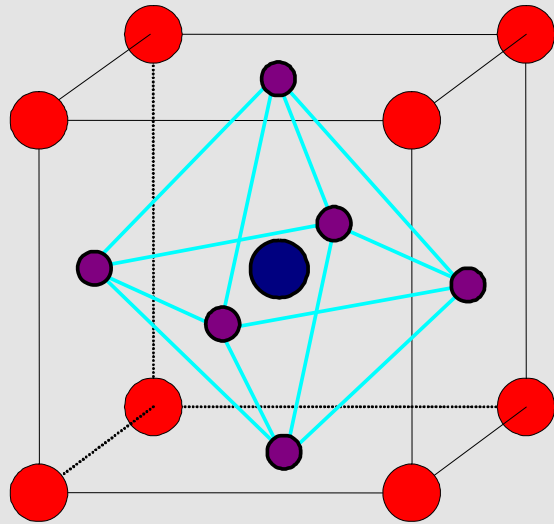
суммирование  
по электронейтральным  
"комплексам":

идея Эвьена





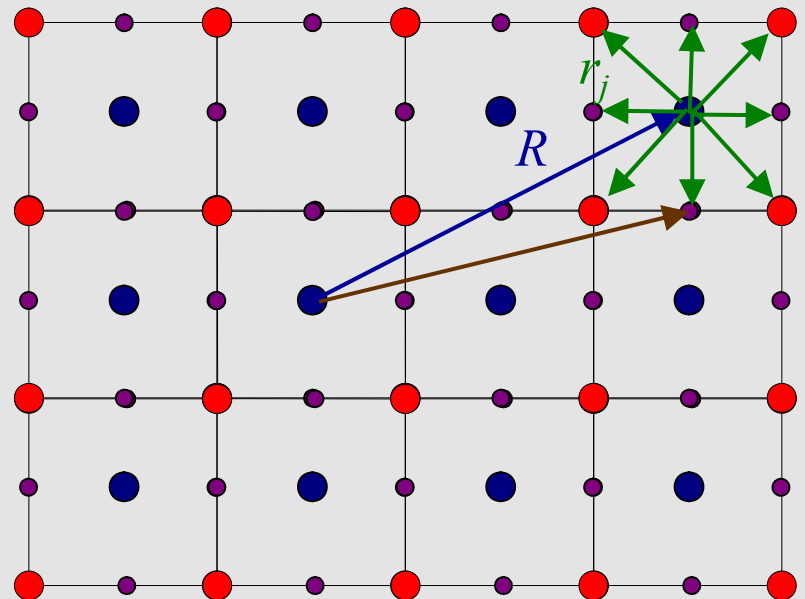
# Суммирование по решетке. Метод Эвьена



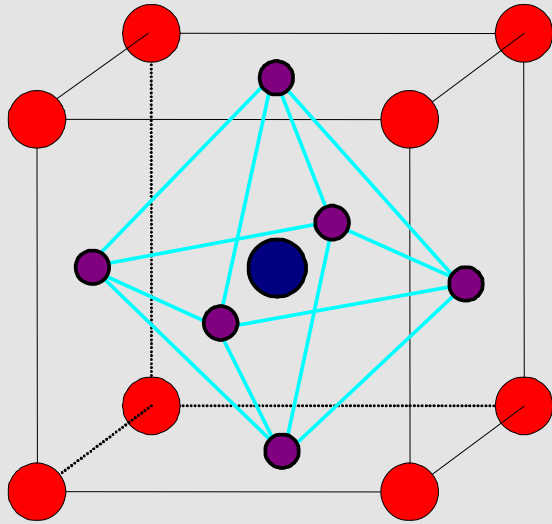
- ион типа B:  $+2e$  Эфф. заряд  $2|e|$
- ион типа A:  $+e$  Эфф. заряд  $|e|/8$
- ион типа O(F):  $-e$  Эфф. заряд  $-|e|/2$

суммирование  
по электронейтральным  
"комплексам":

идея Эвьена



# Суммирование по решетке. Метод Эвьена. Алгоритм



- ион типа В:  $+2e$   
Эфф. заряд  $2|e|$
- ион типа А:  $+e$   
Эфф. заряд  $|e|/8$
- ион типа О(F):  $-e$   
Эфф. заряд  $-|e|/2$

1. ввод безразмерных координат  $(x_j, y_j, z_j)$  и эфф. зарядов  $(q_j)$  всех 15 ионов элементарной ячейки.  $S = 0$
2. Суммирование (циклы) по центрам элементарных ячеек  $\mathbf{R} (X, Y, Z)$  (пространственные координаты  $X, Y, Z$  меняются от  $-N$  до  $N$ )
3. Внутренний цикл по элементарной ячейке  $\rightarrow$  по ионам ( $j=1-15$ ) с "дробными" зарядами
4.  $R_{ij} = [(X - x_j)^2 + (Y - y_j)^2 + (Z - z_j)^2]^{1/2}$
5. Если  $R_{ij} \neq 0$ , то  
накопление суммы  $S = S + q_j / R_{ij}$
6. Повтор цикла 3
7. Повтор циклов 2
8. Нахождение безразмерной постоянной Маделунга  $M = q_i * S$



# Общие замечания при решении задач на ЭВМ.

- Что известно об исходной задаче? (Основные свойства, учет симметрии,...) Входные данные, интервал их изменения и как эти изменения могут повлиять на ход решения?  
Каков приблизительно результат решения, как должен выглядеть предполагаемый ответ?
- Как добиться результата? Выбор способа (аналитическое исследование или численный анализ) и методов решения задачи, необходимого инструмента (программного продукта).  
**Наилучший метод** приводит к верному результату за **кратчайшее время**.  
Проверка полученных на каждом шаге решения результатов (программирование, корректность полученных величин, проверка модели или метода на известных результатах).
- Сколько усилий потребует решение поставленной задачи? (количество необходимого времени для освоения пакета, программирования и отладки, затрат машинного времени на решение задачи)  
Когда будут получены окончательные результаты?

Хеминг Р. В. Численные методы. М.: Наука, 1972.



# Конец 1 лекции

---

---

- Вопросы
- Пожелания
- Замечания
- ?

