Kompiuterinio modeliavimo pradžiamokslis

Aleksas Mazeliauskas
aleksas.eu

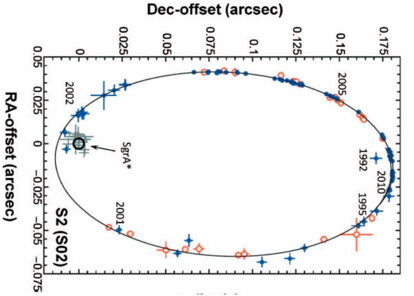
CERN teorinės fizikos departamentas, Ženeva, Šveicarija

2021 m. vasario 17 d.

Kompiuterinis modeliavimo svarba fizikoje

Fizikos teorijos yra patvirtinamos eksperimentu – tam reikalingos tikslios mokslinės prognozės.

$$\underbrace{F = G\frac{Mm}{r^2}}_{\text{teorija}} \quad \Longleftrightarrow$$

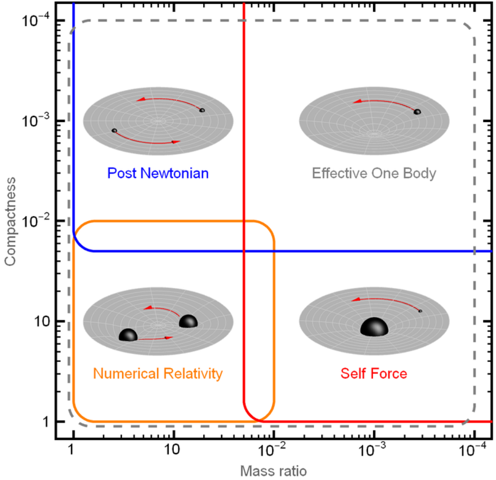


prognozė ir rezultatai

Ką daryti, jei teorija neturi paprastų sprendinių?
$\Longrightarrow$ *šiuolaikiniai kompiuteriai leidžia apskaičiuoti labai sudėtingus modelius.*

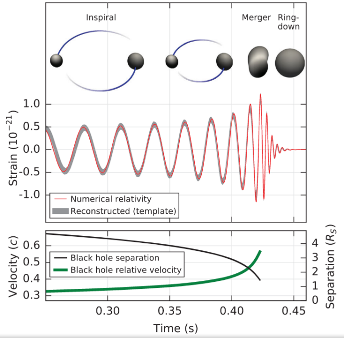
Gravitacijos aprašymas įvairiose situacijose

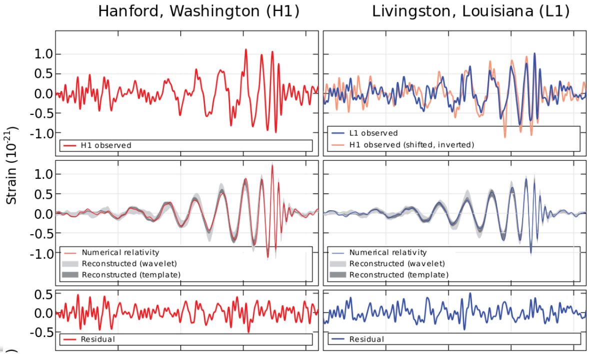
Juodųjų skylių susidūrimus galima aprašyti tik skaitmeniškai sprendžiant Einšteino bendrosios reliatyvumo teorijos lygtis.



Pirmas gravitacinių bangų užfiksavimas

2015 m. užfiksuotas pirmas gravitacinių bangų signalas – Einšteino teorija dar kartą patvirtinta eksperimentu.

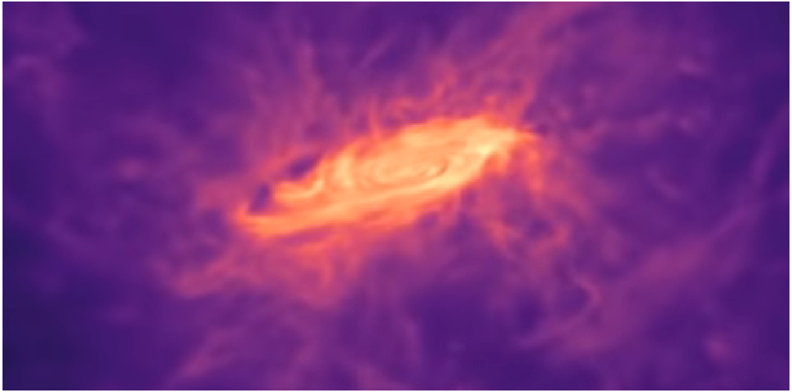




Prireikė ne tik 100 metų sukurti tinkamą observatoriją, bet ir tikslius kompiuterinius modelius.

Antras pavyzdys: galaktikos modeliavimas

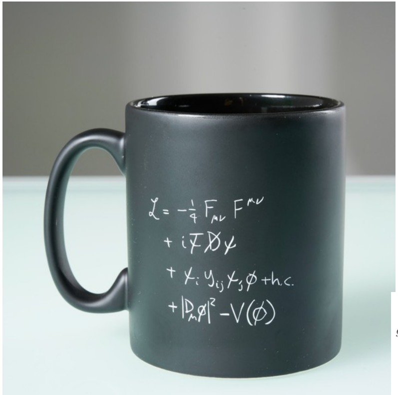
Galimybė modeliuoti visatos ir galaktikų formavimą. TNG projektas
https://youtu.be/0674AZ_UKZk

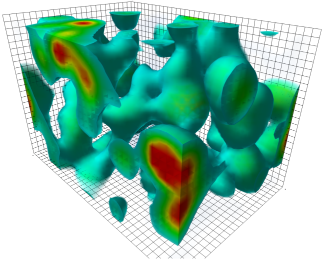


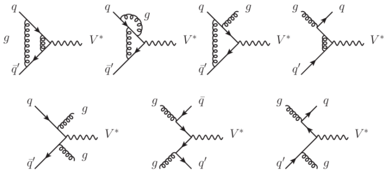
Net ir nesudėtingi fizikos dėsniai sukuria sudėtingus reiškinius.

Trečias pavyzdys: dalelių fizika

Standartinis dalelių fizikos modelis yra gerai eksperimentais patvirtinta teorija.







Tačiau šiuolaikinės prognozės neįmanomos be kompiuterių pagalbos.

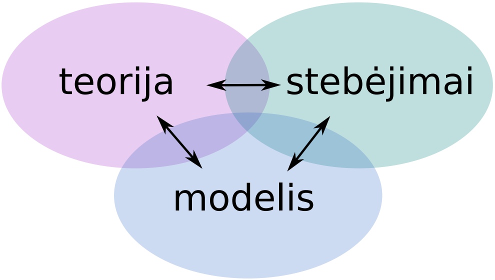
Penki galingiausi superkompiuteriai pasaulyje (TOP500.org)

1EFLOP/s $= 10^6$TFLOP/s$= 10^{18}$ FLOP/s.

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	**Summit** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
3	**Sierra** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
4	**Sunway TaihuLight** - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
5	**Selene** - NVIDIA DGX A100, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband, Nvidia NVIDIA Corporation United States	555,520	63,460.0	79,215.0	2,646

Paprastas kompiuteris $0.1 - 0.01$ *TFLOP/s*

Teorija ↔ modelis ↔ eksperimentas



Sėkmingas modelis turi būti gerai apgalvotas

- Ar visa būtina fizika įtraukta?
- Ar modelis atitinka eksperimento sąlygas?
- Ar modelis padeda suprasti kas vyksta?

"All models are wrong, but some are useful" – George Box

Python

Programavimo kalba `Python` (nuo Monty Python).

- Paprasta – nereikia deklaruoti kintamųjų tipų ar kompiliuoti.
- Tinka darbui su tekstu, skaičiais, grafikais.
- Naudingos bibliotekos (numpy, matplotlib, scipy).
- Galima dirbti interaktyviai (jupyter notebook, ipython).
- Nemokama.

Trumpas pradžiamokslis orientuotas modelių kūrimui
https://github.com/amazeliauskas/NMA20210217

Antra dalis

Oilerio metodas

Duota kūno greičio funkciją $v(t)$. Pradinė pozicija x_0 laiko momentu t_0. Kokia kūno pozicija laiko momentu t_1?

$$\frac{dx}{dt} = v(t)$$
$$x(t_0 + dt) = x_0 + v(t_0)dt$$
$$x(t_0 + 2dt) = x(t_0 + dt) + v(t_0 + dt)dt$$
$$\dots$$
$$x(t_1) = x(t_1 - dt) + v(t_1 - dt)dt.$$

Kad atsakymas butų tikslus, dt turi būti pakankamai mažas.

Jei $v(t) = t^3$, tada $x(t_1) = x_0 + \frac{t_1^4 - t_0^4}{4}$. Patikrinkite, koks turi būti δt, kad atsakymas turėtų 1% tikslumą ($x_0 = 0, t_0 = 0, t_1 = 1$).

Runge-Kutta metodas

Daug tikslesnis metodas

$$
\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= v(t, x) \\
v_1 &= v(t_0, x_0) \\
v_2 &= v(t_0 + \frac{1}{2}dt, x_0 + \frac{dt}{2}v_1) \\
v_3 &= v(t_0 + \frac{1}{2}dt, x_0 + \frac{dt}{2}v_2) \\
v_4 &= v(t_0 + dt, x_0 + dt v_3) \\
x(t_0 + dt) &= x_0 + \frac{dt}{6}(v_1 + 2v_2 + 2v_3 + v_4).
\end{aligned}
$$

Koks turi būti dt, kad būtų pasiektas 1% tikslumas?

Kūnų judėjimas gravitaciniame lauke

$$m\vec{a} = -\hat{\vec{r}}\, G\frac{Mm}{r^2}.$$

Vektorius ir vienetinis vektorius $\vec{r} = (x, y)$, $\hat{\vec{r}} = \left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}, \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}\right)$ Perrašome lygčių sistemą.

$$\frac{dv^x}{dt} = -\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\frac{GM}{r^2}$$

$$\frac{dv^y}{dt} = -\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}\frac{GM}{r^2}$$

$$\frac{dx}{dt} = v^x$$

$$\frac{dy}{dt} = v^y.$$

Prieš sprendžiant kompiuteriu, gerai parinkti tinkamus vienetus.

Vienetų parinkimas

Kompiuteris atlieka veiksmus su skaičiau, bet ne vienetais.

$r_0 = 1.49 \times 10^{11}\,\mathrm{m}, \quad G = 6.674 \times 10^{-11}\,\mathrm{m^3\,kg^{-1}\,s^{-2}}, \quad M = 1.988 \times 10^{30}\,\mathrm{kg}$

$$v_I = \sqrt{\frac{GM}{r_0}} = 2.98 \times 10^5\,\mathrm{m\,s^{-1}}.$$

$$r = r_0 \bar{r}, \quad t = \frac{r_0}{v_I}\bar{t}.$$

$$|a| = \frac{GM}{r^2} \Longrightarrow r_0 \left(\frac{r_0}{v_I}\right)^{-2} |\bar{a}| = \frac{GM}{r_0^2 \bar{r}^2} \Longrightarrow |\bar{a}| = \underbrace{\frac{GM}{r_0 v_I^2}}_{1} \frac{1}{\bar{r}^2}.$$

Jei atstumą matuojame r_0 vienetais, o laiką r_0/v_I, Niutono gravitacijos dėsnis tampa

$$|a| = \frac{1}{r^2}.$$

Kiek užtrunka viena orbita?