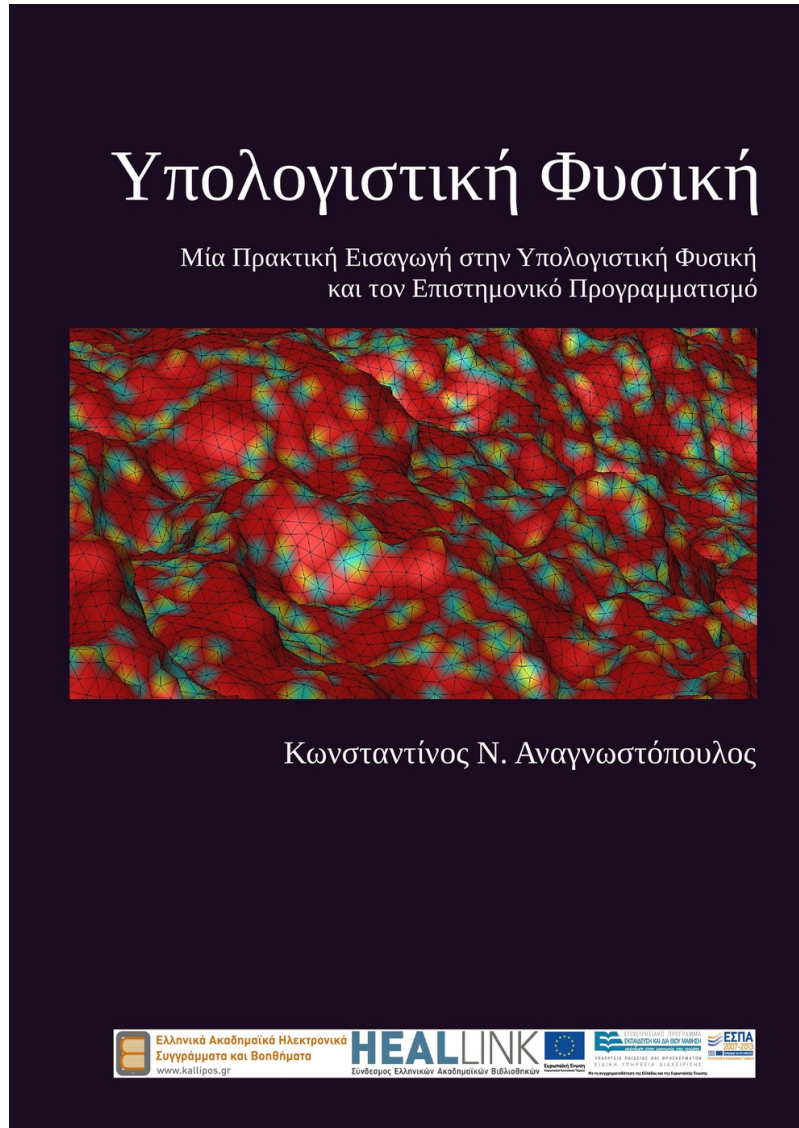


Προγραμματισμός με Εφαρμογές στην Επιστήμη του Μηχανικού

Κεντρική Σελίδα



Υπολογιστική Φυσική

Μία Πρακτική Εισαγωγή στην Υπολογιστική Φυσική
και τον Επιστημονικό Προγραμματισμό

Κωνσταντίνος Ν. Αναγνωστόπουλος

Ελληνικά Ακαδημαϊκά Ηλεκτρονικά Συγγράμματα και Βοηθήματα
www.kallipos.gr

HEALLINK
Συνάσπονδος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών

Ευρωπαϊκή Ένωση
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΤΗΣ ΕΥΡΩΠΑΪΚΗΣ ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΗΣ ΠΡΟΒΛΕΨΗΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ
2014-2020

Εισαγωγικό μάθημα επιστημονικού πρόγραμματισμού για τους φοιτητές της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών (ΣΕΜΦΕ) του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (ΕΜΠ).

Το μάθημα είναι υποχρεωτικό για όλους τους φοιτητές και διδάσκεται στο 4^ο Εξάμηνο.

- Διαβάστε περισσότερες πληροφορίες για το μάθημα
- Κατεβάστε το βιβλίο σε pdf
- Παρακολουθήστε βιντεοδιαλέξεις του διδάσκοντα
- Πρόγραμμα διαλέξεων
- Παλιότερες ιστοσελίδες
- Εκτυπώστε τα περιεχόμενα της ιστοσελίδας (24/2/2022)

Γενικές Πληροφορίες

Σκοπός του Μαθήματος:

Η ολοένα μεγαλύτερη πολυπλοκότητα των προβλημάτων που αντιμετωπίζονται στην σύγχρονη έρευνα και τεχνολογία, τόσο στην Επιστήμη του Μηχανικού (Engineering Science) όσο και στη Φυσική, χρειάζεται την ανάπτυξη και την εφαρμογή σύγχρονων υπολογιστικών μεθόδων.

Κατά τη διάρκεια του μαθήματος διδάσκονται οι βασικές δεξιότητες που απαιτούνται για την ανάπτυξη υπολογιστικού κώδικα που θα χρησιμοποιηθεί στην επίλυση προβλημάτων στην Επιστήμη του Μηχανικού και τη Φυσική, καθώς και οι τεχνικές προσομοίωσης και ανάλυσης ενός μεγάλου εύρους εφαρμογών στις παραπάνω επιστημονικές περιοχές. Στόχος είναι να αποκτηθεί το απαραίτητο υπόβαθρο που απαιτείται για την αντιμετώπιση *προχωρημένων* προβλημάτων στις επιστημονικές περιοχές της Υπολογιστικής Μηχανικής, της Φυσικής, των Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και της Βιολογίας.

Διδάσκονται απλές τεχνικές μοντελοποίησης προβλημάτων στις φυσικές επιστήμες με αριθμητικές μεθόδους, βασικός προγραμματισμός, η εφαρμογή μεθόδων αριθμητικής ανάλυσης στον επιστημονικό προγραμματισμό, η αποτελεσματική χρήση του λειτουργικού συστήματος και των εργαλείων που παρέχει, καθώς και μέθοδοι συλλογής, ανάλυσης και εικονοποίησης δεδομένων.

Η ιστορία του μαθήματος και οι παλιότερες ιστοσελίδες του βρίσκονται [εδώ](#).

Διδάσκων:

Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος

Email: konstant@mail.ntua.gr

Internet: physics.ntua.gr/konstant

Γραφείο: 104, 1ος όροφος, Κτ. Φυσικής

Τηλ.: 210 772 1641

Παρακολούθηση - Ωρες διδασκαλίας:

Οι φοιτητές χωρίζονται σε δύο τμήματα ανάλογα με το αρχικό του επωνύμου τους:

Τμήμα Α': Α-Λ

Τμήμα Β': Μ-Ω

Οι διαλέξεις και τα εργαστήρια γίνονται διαφορετική ώρα για κάθε τμήμα. Το [ημερολόγιο των διαλέξεων βρίσκεται εδώ](#). Τα εργαστήρια γίνονται μαζί με τις διαλέξεις. Μπορείτε να παρακολουθήσετε τις διαλέξεις/εργαστήρια του άλλου τμήματος, αρκεί να υπάρχει διαθέσιμος σταθμός εργασίας στο εργαστήριο.

Διαλέξεις και εργαστήρια: [Διατμηματικά Εργαστήρια Προσωπικών Υπολογιστών \(ΔΕΠΥ\)](#) (χάρτης), ΕΜΠ, κάθε Δευτέρα 11:45-15:30 (Τμήμα Α') και κάθε Πέμπτη 08:45-12:30 (Τμήμα Β')

Βιβλιογραφία:

Βιβλιογραφικός κατάλογος δίνεται [εδώ](#). Το βιβλίο του μαθήματος δίνεται ελεύθερα σε ηλεκτρονική μορφή [εδώ](#).

Ανακοινώσεις:

Οι ανακοινώσεις του μαθήματος βγαίνουν στην [ιστοσελίδα στο mycourses](#) (επιλέξτε "Ανακοινώσεις" από το μενού "Εργαλεία") και στέλνονται με email στους εγγεγραμμένους φοιτητές (στο mycourses) στην ηλ. διεύθυνση που δίνουν εκεί.

Βαθμολογία - Εξετάσεις:

Οι φοιτητές βαθμολογούνται αποκλειστικά από την τελική εξέταση που διεξάγεται στις εξεταστικές περιόδους του ΕΜΠ. Η παρακολούθηση των διαλέξεων και των εργαστηρίων είναι προαιρετική. Οι εξετάσεις γίνονται στα [ΔΕΠΥ \(χάρτης\)](#) με πρακτική εξέταση μπροστά στους υπολογιστές. Γενικές οδηγίες για τον τρόπο διεξαγωγής της εξέτασης μπορούν να βρεθούν [εδώ](#) και [εδώ](#).

Ειδικότερα: Οι εξετάσεις γίνονται μπροστά σε όμοιους υπολογιστές και περιβάλλον με αυτό των διαλέξεων/εργαστηρίων. Οι φοιτητές μπορούν να έχουν μαζί τους ό,τι σημειώσεις και βιβλία επιθυμούν. Υπάρχει πρόσβαση στην ιστοσελίδα του μαθήματος και το περιεχόμενό της (σύγγραμμα, προγράμματα κλπ) τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν κατά το δοκούν. Δεν επιτρέπονται προσωπικές ηλεκτρονικές συσκευές (π.χ. αποθηκευτικά μέσα δεδομένων, τηλέφωνα, tablets, ...). Δεν υπάρχει πρόσβαση στα αρχεία που δημιουργήθηκαν κατά τη διάρκεια του εξαμήνου. Οι ενδιαφερόμενοι να συμμετάσχουν στις εξετάσεις πρέπει να εγγραφούν στην αντίστοιχη ομάδα στη [σελίδα στο mycourses](#) μέχρι την προθεσμία που καθορίζει σχετική ανακοίνωση.

Οι βαθμολογία των φοιτητών στέλνεται με προσωπικό μήνυμα **αποκλειστικά** στο email με το οποίο έχουν εγγραφεί στο helios ή στον ιδρυματικό λογαριασμό κάθε φοιτητή/τριας (ge12345@central.ntua.gr, ge12345@mail.ntua.gr). Κάθε επικοινωνία που αφορά προσωπικά δεδομένα γίνεται **μόνο** μέσω αυτών των λογαριασμών.

Περιεχόμενο Διδασκαλίας:

Οι επιμέρους θεματικές περιοχές του μαθήματος επιλέχθηκαν σύμφωνα με το τυπικό και ουσιαστικό βιογραφικό προφίλ των φοιτητών της ΣΕΜΦΕ, με έμφαση την ενίσχυση του χαρακτήρα της Επιστήμης του Μηχανικού (Engineering Science). Προς την παραπάνω κατεύθυνση, το περιεχόμενο του μαθήματος είναι το παρακάτω:

- Λειτουργικό σύστημα (ΛΣ): Εισαγωγή στο ΛΣ Unix. Βασικές εντολές συστήματος, redirection, piping, φίλτρα. Εντολές επεξεργασίας αρχείων κειμένου ASCII. Βασικός προγραμματισμός φλοιού. Επεξεργαστής κειμένου για προγραμματισμό. Πρόγραμμα απεικόνισης δεδομένων και συναρτήσεων στο επίπεδο και στο χώρο. Γλώσσα προγραμματισμού:
- Η γλώσσα προγραμματισμού Fortran. Δομή προγράμματος, τύποι μεταβλητών, διαχείριση μνήμης. Εντολές ελέγχου και μορφοποίησης. Συναρτήσεις και υπορουτίνες. Μεταγλωττιστής, μεταγλωττισμός και βελτιστοποίηση. Μέτρηση επιδόσεων, διόρθωση λαθών κώδικα.
- Υπολογισμός και απεικόνιση τροχιών σωματιδίων σε 2 και 3 διαστάσεις: Προγραμματισμός κινηματικής σωματιδίου σε 2 και 3 διαστάσεις. Ανάλυση των δεδομένων και απεικόνιση τροχιάς. Έλεγχος ακρίβειας αποτελεσμάτων, διατηρούμενες ποσότητες.
- Υπολογισμός και απεικόνιση της κίνησης σωματιδίου υπό την επίδραση δύναμης. Επίλυση των εξισώσεων κίνησης Νεύτωνα: Μέθοδοι χρονικής ολοκλήρωσης Euler, Verlet, Euler Verlet. Επίλυση απλών προβλημάτων στη μία διάσταση: αρμονικός ταλαντωτής σε βαρυτικό πεδίο. Μελέτη ακρίβειας και ευστάθειας λύσεων.
- Υπολογισμός τροχιών, λύσεων ισορροπίας και ταλαντωτικών λύσεων σε απλά προβλήματα συναγωγής και νευρο-διέγερσης: Χρονική Ολοκλήρωση συστημάτων συνηθων διαφορικών εξισώσεων. Διαγράμματα φάσης. Προβλήματα συναγωγής και οι εξισώσεις Lorentz. Το απλοποιημένο μοντέλο νευροδιέγερσης Fitzhugh. Αποτελέσματα προσομοίωσης. Σταθερά σημεία, ταλαντωτικές λύσεις, χαοτικοί ελκυστές.

- Η λογιστική εξίσωση (συνεχής και διακριτή μορφή): Προγραμματισμός τροχιάς λογιστικής εξίσωσης και απεικόνιση. Μη γραμμικές ταλαντώσεις/ Εύρεση σταθερών σημείων απεικόνισης Poincare και υπολογισμός ευστάθειας. Η μέθοδος Newton-Raphson. Κατασκευή του διαγράμματος διακλάδωσης (bifurcation). Διπλασιασμός περιόδου (Period doubling). Χαστική δυναμική.
- Επίλυση της εξίσωσης διάχυσης/μεταφοράς θερμότητας με ή χωρίς όρο πηγής: Επίλυση της εξίσωσης διάχυσης στο χρόνο σε μία διάσταση. Σχήμα Euler σε μερικές διαφορικές εξισώσεις πραβολικού τύπου. Διακριτοποίηση του συστήματος με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Αριθμός Courant. Επίλυση της εξίσωσης διάχυσης με όρο πηγής σε μία διάσταση.
- Επίλυση της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger. Σκέδαση σωματιδίου σε φράγμα/πηγάδι δυναμικού. Χρονική εξέλιξη κυματοπακέτου στο δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή.

Βιβλιογραφία

Βασική Βιβλιογραφία

- Κ. Αναγνωστόπουλος, [Υπολογιστική Φυσική](#), μαζί με το συνοδευτικό λογισμικό.
- Κ. Αναγνωστόπουλος, συμπληρωματικές [Σημειώσεις Υπολογιστικής Φυσικής](#), μαζί με το συνοδευτικό λογισμικό.

Χρήσιμη Βιβλιογραφία

- [An Introduction to Computer Simulation Methods](#), Harvey Gould, Jan Tobochnik and Wolfgang Christian (δείτε και τον κόμβο www.compadre.org/osp)
- [Computational Physics, Problem Solving with Computers](#), R. Landau and M. J. Paez Mejia.
- [Σημειώσεις \(Μερος 1ο\)](#) απο τον Καθ. Uli Wolff ([υπολογιστική ομάδα του Uli Wolff](#))
- [Computational Physics](#), R. Fitzpatrick. Το βιβλίο είναι διαθέσιμο χωρίς χρέωση.
- [Numerical Recipes](#) by William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling and Brian P. Flannery. Το βιβλίο είναι διαθέσιμο χωρίς χρέωση [εδώ](#) με κώδικα σε C, Fortran77, Fortran90.

Βιβλιογραφία για υπολογιστές

FORTRAN

- [Fortran tutorial](#) από το tutorialspoint.com.
- [Fortran tutorial](#) από το riptutorial.com.
- [Modern Fortran](#), Milan Curcic, Manning Pubs.
- [Modern Fortran Explained: Incorporating Fortran 2018](#), M. Metcalf, J. Reid, M. Cohen, Oxford Pubs.
- [J.C. Adams, W.S. Brainerd, R.A. Hendrickson, R.E. Maine, J.T. Martin, B.T. Smith, The Fortran 2003 Handbook: The Complete Syntax, Features and Procedures](#), Springer.
- [R. Davies, A. Rea, D. Tsaptsinos, "Introduction to Fortran 90"](#).
- [Fortran Wikibook](#).
- [Fortran 77 Tutorial](#), Stanford University. Το παλιό "fixed width" format.
- fortran-lang.org.

Unix - GNU/Linux

- [Running Linux](#), By Matt Welsh, Matthias Kalle Dalheimer, and Lar Kaufman, ed. O'Reilly.
- [Linux in a Nutshell](#), By Ellen Siever, Stephen Spainhour, Stephen Figgins and Jessica P. Hekman , ed. O'Reilly.
- [Introduction to GNU Emacs](#), U. Texas at Austin ([Emacs Reference Card](#) και [Emacs Survival Card](#)).

Gnuplot

- [Gnuplot επίσημη σελίδα και τεκμηρίωση](#).
- [Gnuplot in Action, Second Edition](#), P.K. Janert, Manning Pubs.
- [Gnuplot 5](#), Lee Phillips, online.
- [Gnuplot tricks](#)

Σύνδεσμοι

Υπολογιστική Φυσική

- [Computational Physics](#) by R. Landau at Oregon State U.
- [Computational Physics](#), Angus MacKinnon.
- Περισσότερα: [Ohio State](#), [NYU](#), [U. Texas](#), [Rutgers](#), [Davidson](#), [Indiana](#), [Dublin](#), [Michigan](#)

Λογισμικό

- [ubuntu](#) (African word meaning 'Humanity to others', or 'I am what I am because of who we all are): Δημοφιλής και εύχρηστη διανομή Linux που αντικαθιστά πλήρως ανταγωνιστικά λειτουργικά. Συστήνεται για γενική χρήση.
- [xubuntu](#) και [lubuntu](#): Ελαφριά και ωραία! Ανασταίνουν νεκρούς... (υπολογιστές εννοείται...)
- [Fedora](#): Διανομή Linux. Κατεβάστε την από το [ΕΜΠ](#).
- [Λογισμικό](#) σχετικό με το μάθημα.

Μαθηματικό Λογισμικό

- [Netlib](#) repository.
- [NIST](#): Math, Statistics, and Computational Science.
- [Numerical Recipes](#).
- [GSL](#): GNU Scientific Library.
- [NAG](#): NAG Numerical Components

Εξάσκηση

Πώς να μελετήσετε

Το μάθημα βασίζεται στην πρακτική εξάσκηση, και για την απόκτηση των απαραίτητων δεξιοτήτων για τις οποίες εκπαιδεύστε πρέπει να εξασκηθείτε μπροστά στον υπολογιστή. Διαβάστε το βιβλίο, ή παρακολουθήστε τις βιντεοδιαλέξεις, εκτελώντας ταυτόχρονα τις εντολές και τις διαδικασίες που περιγράφονται. Αν η συμβουλή αυτή δεν ακολουθηθεί, θα δυσκολευτείτε στην κατανόηση, αλλά και στην ολοκλήρωση μιας οποιασδήποτε άσκησης.

Πώς να αποκτήσετε πρόσβαση στα απαραίτητα εργαλεία

Το υπολογιστικό περιβάλλον που είναι απαραίτητο για να εξασκηθείτε είναι διαθέσιμο στα [ΔΕΠΥ](#) και στα [εργαστήρια προσωπικών υπολογιστών της ΣΕΜΦΕ](#). Για να εξασκηθείτε με έναν δικό σας υπολογιστή, τα απόλυτως απαραίτητα εργαλεία είναι ένας καλός επεξεργαστής κειμένων για προγραμματιστές, ένας μεταγλωττιστής Fortran και ένα πρόγραμμα που να φτιάχνει της γραφικές παραστάσεις δεδομένων και συναρτήσεων. Στο μάθημα χρησιμοποιούνται:

- Περιβάλλον λειτουργικού συστήματος της οικογένειας GNU/Linux και τα βασικά του εργαλεία (τέτοιο περιβάλλον είναι διαθέσιμο και σε άλλα λειτουργικά συστήματα, δείτε παρακάτω).
- Ο μεταγλωττιστής Fortran gfortran, ο οποίος είναι ελεύθερα διαθέσιμος για τα κυριότερα λειτουργικά συστήματα υπό άδεια ελεύθερου λογισμικού στη θέση gcc.gnu.org/wiki/GFortran.
- Ο επεξεργαστής κειμένου Emacs, ο οποίος προσφέρει ισχυρά εργαλεία στους προγραμματιστές. Ο Emacs είναι ελεύθερα διαθέσιμος για τα κυριότερα λειτουργικά συστήματα υπό άδεια ελεύθερου λογισμικού στη θέση www.gnu.org/software/emacs/.
- Το πρόγραμμα απεικόνισης δεδομένων gnuplot. Το gnuplot είναι ελεύθερα διαθέσιμο για τα κυριότερα λειτουργικά συστήματα υπό άδεια ελεύθερου λογισμικού στη θέση www.gnuplot.info.
- Ο φλοιός tcsh. Ο tcsh είναι ελεύθερα διαθέσιμος για τα κυριότερα λειτουργικά συστήματα υπό άδεια ελεύθερου λογισμικού στη θέση www.tcsh.org.
- Τα προγράμματα awk, grep, sort, cat, head, tail, less. Βεβαιωθείτε ότι είναι διαθέσιμα στο υπολογιστικό σας περιβάλλον.

Αν έχετε ήδη εγκαταστήσει μια διανομή GNU/Linux στον υπολογιστή σας, όλο το παραπάνω λογισμικό μπορεί εύκολα και γρήγορα να εγκατασταθεί. Για παράδειγμα, σε μία διανομή τύπου Debian (όπως το Ubuntu) οι εντολές

- `sudo apt install tcsh emacs gnuplot-qt gnuplot-doc`
- `sudo apt install gfortran gawk gawk-doc binutils`
- `sudo apt install manpages-dev coreutils liblapack3 liblapack-doc liblapack-dev libblas-dev`

εγκαθιστούν όλα τα απαραίτητα εργαλεία.

Αν θέλετε να χρησιμοποιήσετε GNU/Linux στον υπολογιστή σας, με dual booting σε Linux/Windows έχετε πολλές επιλογές. Στους παρακάτω συνδέσμους, μπορείτε να βρείτε οδηγίες για την εγκατάσταση της διανομής Ubuntu:

- [Download Ubuntu](#)
- [Οδηγίες δημιουργίας bootable usb stick](#)
- [Οδηγίες εγκατάστασης](#)

- Βίντεο εγκατάστασης (1)
- Βίντεο εγκατάστασης (2)

Αν θέλετε να χρησιμοποιήσετε GNU/Linux στον υπολογιστή σας, χωρίς να κάνετε ξεχωριστή εγκατάσταση, μπορείτε να:

- εγκαταστήσετε το Ubuntu σαν ένα οποιοδήποτε πρόγραμμα των **Windows 11**. Στα Windows 11 οι γραφικές εφαρμογές τρέχουν χωρίς να χρειαστεί να εγκαταστήσετε άλλα προγράμματα. Θα χρειαστεί η εγκατάσταση του WSL2 (Windows Subsystem for Linux, version 2):
 - Οδηγίες από την Canonical
 - Οδηγίες από Microsoft: εγκατάσταση wsl
 - Οδηγίες από Microsoft: Linux GUIs

Η εγκατάσταση είναι πάρα πολύ απλή, ακολουθώντας τα παρακάτω βήματα:

- Βεβαιώνετε πως έχετε Windows 11, OS Build 22000.X ή μεγαλύτερο
- Ενεργοποιείτε την επιλογή **Virtual Machine Platform** (Πλατφόρμα εικονικής μηχανής) στα Windows Features (Δυνατότητες των Windows)
- Επανεκκινείτε το λειτουργικό σύστημα, ανοίγετε το Windows Power Shell με δικαιώματα διαχειριστή, και δίνετε την εντολή:


```
wsl --install
```
- Επανεκκινείτε το λειτουργικό σύστημα, ανοίγετε το Windows Power Shell με δικαιώματα διαχειριστή, και δίνετε την εντολή:


```
wsl --install -d Ubuntu
```
- Στο Ubuntu παράθυρο που θα ανοίξει, δίνετε ένα όνομα χρήστη και κωδικό (σημειώστε τα!...). Στη συνέχεια, στο ίδιο παράθυρο, δίνετε τις εντολές:


```
sudo -i (εισάγετε τον κωδικό που βάλατε)
apt update
apt upgrade
apt install x11-apps gnome-terminal emacs gnuplot-qt gnuplot-doc xterm nautilus
apt install gawk gawk-doc manpages-dev coreutils gcc g++ gfortran gfortran-doc
gcc-doc liblapack3 liblapack-doc liblapack-dev libblas-dev
```
- εγκαταστήσετε το Ubuntu σαν ένα οποιοδήποτε πρόγραμμα των **Windows 10**. Προσοχή, τα GUIs δεν τρέχουν αυτόματα, χρειάζονται εξωτερικά προγράμματα και ρυθμίσεις. Είναι πιο εύκολο να τρέξετε το WSL1 και όχι το WSL2.
 - Για να γίνει αυτό, από το Windows Power Shell (με administrator rights), να τρέξετε τις εντολές:


```
wsl --install (επανεκκίνηση)
wsl --install -d Ubuntu-20.04 (επανεκκίνηση)
wsl --set-version Ubuntu-20.04 1 (επανεκκίνηση)
```
 - Στο Ubuntu παράθυρο που θα ανοίξει, δίνετε ένα όνομα χρήστη και κωδικό (σημειώστε τα!...). Στη συνέχεια, στο ίδιο παράθυρο, δίνετε τις εντολές:


```
sudo -i (εισάγετε τον κωδικό που βάλατε)
apt update
apt upgrade
apt install x11-apps gnome-terminal emacs gnuplot-x11 gnuplot-doc xterm
nautilus
apt install gawk gawk-doc manpages-dev coreutils gcc g++ gfortran gfortran-doc
gcc-doc liblapack3 liblapack-doc liblapack-dev libblas-dev
exit
```
 - Για να τρέξουν οι γραφικές εφαρμογές, εγκαταστήστε τον **VcXsrv Windows X Server**. Εκκινήστε τον VcXsrv και επιλέξτε "Disable access control" στην 3η καρτέλα
 - Ξεκινήστε το Ubuntu, και στο παράθυρο δώστε, **μόνο την πρώτη φορά**, τις εντολές:


```
export DISPLAY=localhost:0.0
echo "export DISPLAY=localhost:0.0" >> ~/.bashrc
gnome-terminal &
```


Για περισσότερες οδηγίες, μπορείτε να επισκευτείτε τους παρακάτω συνδέσμους:

- [Οδηγίες από την Canonical](#)
- [VcXsrv Windows X Server](#) και η σχετική τεκμηρίωση: [wiki1](#), [wiki2](#), [wiki3](#)
- Αναζητήστε σχετικά βίντεο εγκατάστασης για Windows 10, όπως λ.χ. [εδώ](#), [εδώ](#), ή [εδώ](#)
- [εκκινήστε τον υπολογιστή σας με ένα από τα πολλά Live USB/CDs/DVDs](#) με κάποια εκδοχή του Linux (λ.χ. το [Ubuntu](#) προσθέτοντας τα πακέτα που αναφέρονται παραπάνω). Μπορείτε να χρησιμοποιήσετε το πρόγραμμα [LinuxLive USB Creator](#) για να φτιάξετε ένα bootable USB/DVD ([οδηγίες](#), επιλέξτε persistence για να μπορείτε να αποθηκεύετε τα έγγραφα και τα προγράμματά σας) ή το [UNetbootin](#). Δεν χρειάζεται δίκτυο εκτός αν πρέπει να εγκαταστήσετε τα πακέτα.
- Για [Mac OS](#) μπορείτε να εγκαταστήσετε το [Homebrew](#) και να δώσετε τις εντολές:
 - `brew install tcsh emacs gnuplot gfortran gcc openblas lapack`
- δοκιμάστε online το [repl.it](#). Μπορείτε να δίνετε εντολές από το prompt του φλοιού bash. Διαθέτει gfortran, gnuplot, emacs (τον emacs χρησιμοποιήστε τον στο τερματικό, δίνοντας την εντολή `emacs -nw`)
- τρέξετε μια διανομή Linux (λ.χ. [Ubuntu](#)) από μια εικονική μηχανή (virtual machine). Δείτε [οδηγίες εδώ](#) ή [παρακολουθήστε το σχετικό βίντεο](#).

Διάλεξη 1

Θέματα

- Επιλογή λειτουργικού συστήματος και γλώσσας προγραμματισμού.
- Εισαγωγή στο λειτουργικό σύστημα Linux.
- Linux Filesystem: root, directory tree, relative and absolute path, home directory, current and parent directory (. and ..).
- Βασικές εντολές: ls, cd, pwd (πλοήγηση), cp, mv, rm, mkdir, rmdir (αρχεία και υποκατάλογοι).
- Εντολές cat, less, more, head, tail, grep, sort, awk
- Redirection: [stdin](#), [stdout](#), [stderr](#), [<](#), [>](#), [>>](#), [>&](#), [>>&](#)
- Piping: |

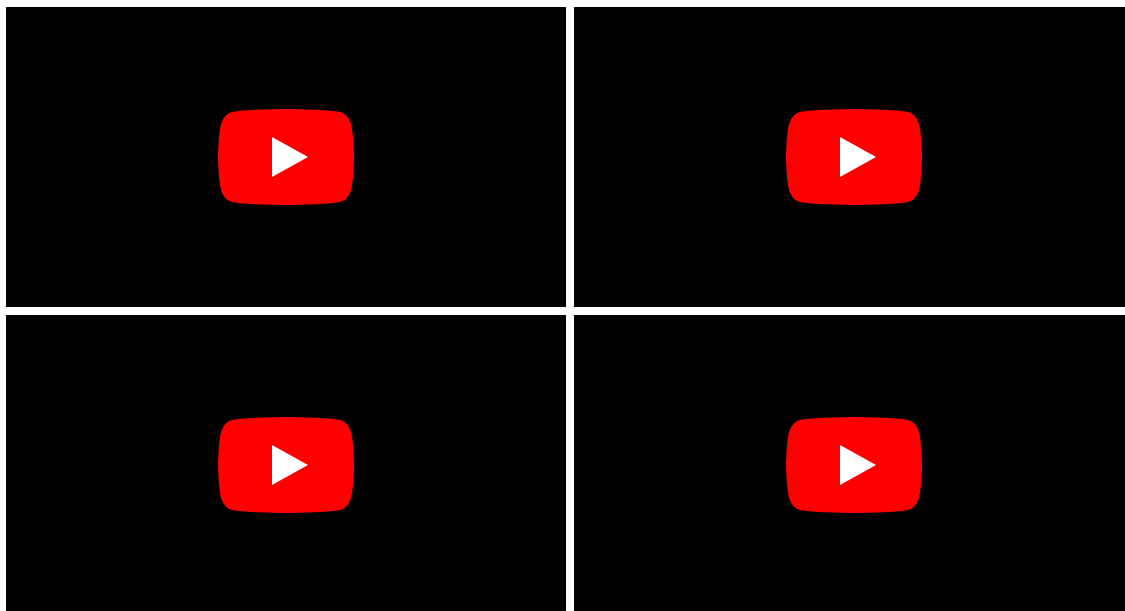
Βιβλιογραφία

- Κεφάλαιο 1 του βιβλίου.
- Άρθρο πάνω στο γιατί στην έρευνα αιχμής ακόμα χρησιμοποιείται η Fortran (και ποια μπορεί να είναι η πιθανή εξέλιξη)
- Fortran tutorial από το [tutorialspoint.com](#).
- R. Davies, A. Rea, D. Tsapsinos, "Introduction to Fortran 90".

Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 22/2/2021. Σας συνιστώ όμως, να δείτε τα παραπάνω βίντεο, ως πιο πλήρη και αναλυτικά.



Εξάσκηση

- Κατεβάστε το αρχείο [lecture01.zip](#). Θα βρείτε εκεί τα αρχεία που αναφέρονται στις σημειώσεις και που χρησιμοποιήσαμε στη διάλεξη. Ανοίξτε το με την εντολή `unzip lecture01.zip` και εργαστείτε πάνω στο κείμενο της παραγράφου 1.1 των σημειώσεων.

Διάλεξη 2

Θέματα

- Εισαγωγή στον προγραμματισμό με Fortran
- Μεταγλώττιση προγράμματος
- Χρήση editor [emacs](#) για την συγγραφή κώδικα σε Fortran.

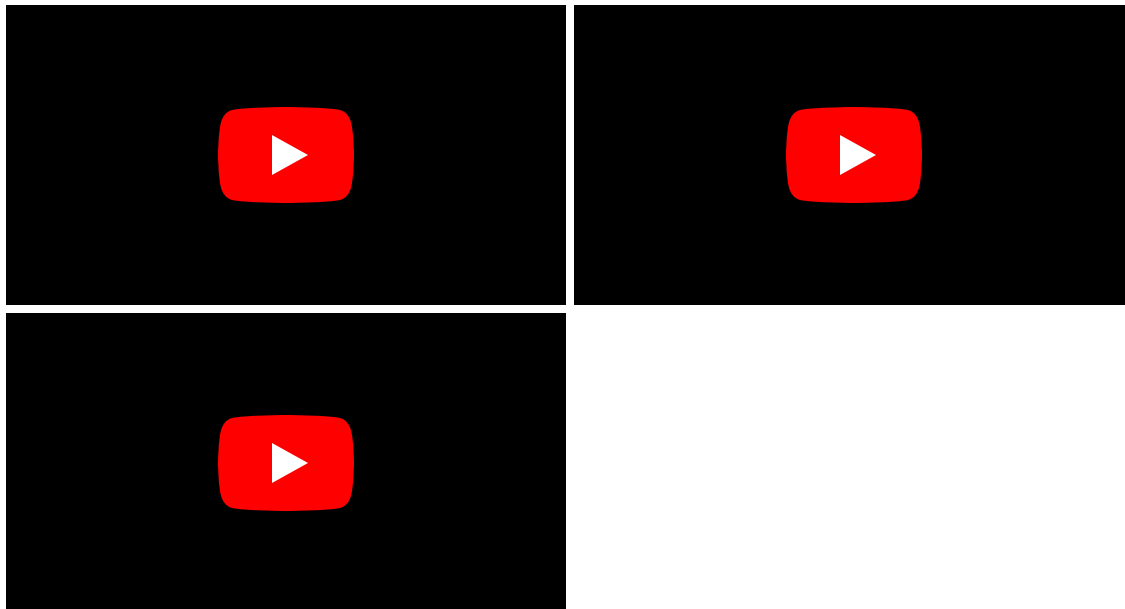
Βιβλιογραφία

- Βιβλίο διδάσκοντα "Υπολογιστική Φυσική", κεφ. 1
- [Linux in a Nutshell](#), By Ellen Siever, Stephen Spainhour, Stephen Figgins and Jessica P. Hekman , ed. O'Reilly.
- Linux/Unix tutorials: [Introduction to the UNIX Operating System](#), [tutorialspoint.com](#).
- Fortran 90 (free format), Tutorials: [riptutorial.com](#), [tutorialspoint.com](#), [fortranwiki.org](#).
- [LearningEmacs](#)
- [Absolute Beginner's Guide to Emacs](#)
- [Videos with emacs tutorials](#)
- [Emacs Reference Card](#) και [Emacs Survival Card](#).

ΣΧΕΤΙΚΕΣ ΒΙΝΤΕΟΔΙΑΛΕΞΕΙΣ

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 1/3/2021.



Εξάσκηση

Εντολές στο Unix

- Κατεβάστε το αρχείο [lecture01.zip](#). Θα βρείτε εκεί τα αρχεία που αναφέρονται στις σημειώσεις. Εκτελέστε τις εντολές της παραγράφου 1.2 των σημειώσεων.

Fortran

Επισκευτείτε τον δικτυακό τόπο tutorialspoint.com και εξασκηθείτε στη συγγραφή κώδικα σε Fortran και άλλες γλώσσες προγραμματισμού online!

- Γράψτε ένα πρόγραμμα που να τυπώνει [Hello World!](#). Λύση: [hello.f90](#)
- Γράψτε ένα πρόγραμμα που να τυπώνει την περιφέρεια και το εμβαδόν κύκλου ακτίνας $R=4.0$. Λύση: [area_01.f90](#)
- Μετατρέψτε το προηγούμενο πρόγραμμα ώστε να κάνει το ίδιο για 10 κυκλους με διαφορετικές ακτίνες. Λύση: [area_02.f90](#)
- Μετατρέψτε το προηγούμενο πρόγραμμα ώστε να κάνει το ίδιο για 10 κυκλους με διαφορετικές ακτίνες τις οποίες θα διαλέγει ο χρήστης. Τα αποτελέσματα να γράφονται σε αρχείο με όνομα [AREA.DAT](#). Λύση: [area_03.f90](#)
- Μετατρέψτε το προηγούμενο πρόγραμμα ώστε ο υπολογισμός των περιφερειών/εμβαδών να γίνεται σε ξεχωριστή υπορουτίνα που καλεί το κυρίως πρόγραμμα. Λύση: [area_04.f90](#) ή [area_05.f90](#)
- **Άσκηση:** Μετατρέψτε το προηγούμενο πρόγραμμα ώστε ο χρήστης να διαλέγει για πόσους διαφορετικού κύκλους θα υπολογίσει το πρόγραμμα.
- **Άσκηση:** Γράψτε πρόγραμμα που να υπολογίζει τις ρίζες ενός τριωνύμου. Προσοχή, θα πρέπει να ξεχωρίσετε περιπτώσεις ανάλογα με το τριώνυμο. Λύση: [trionymo.f90](#)

Emacs

- Δώστε την εντολή `emacs &` και μετα επιλέξτε από το μενού [Help -> Emacs Tutorial](#). Ακολουθήστε τις οδηγίες.

Διάλεξη 3

Θέματα

- Απεικόνιση τροχιάς σωματιδίου στο επίπεδο.
- Απεικόνιση τροχιάς σωματιδίου στο χώρο.

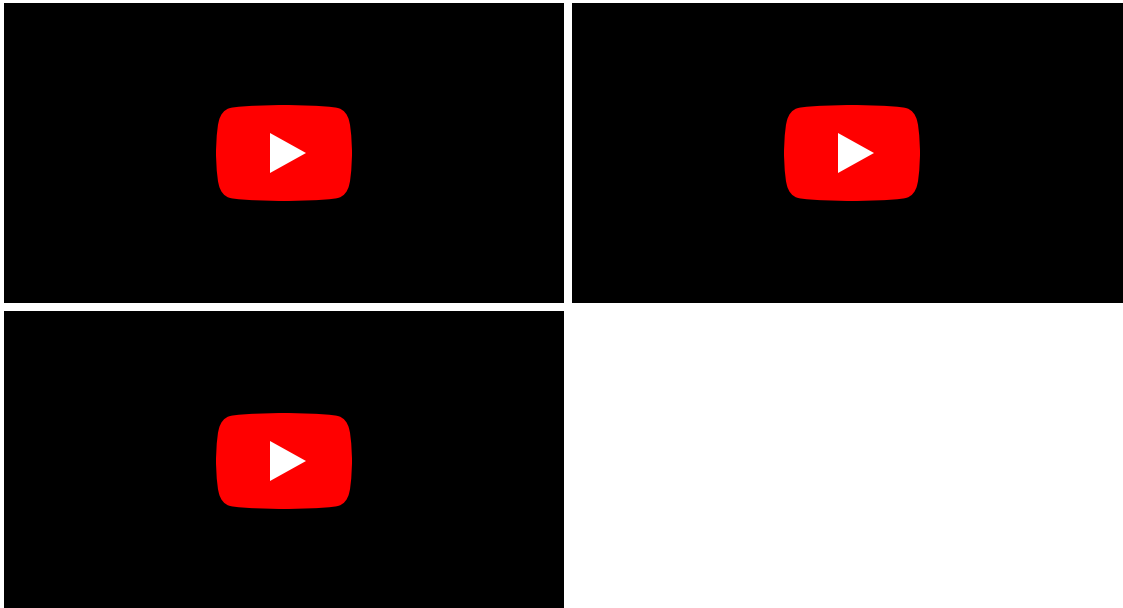
Βιβλιογραφία

- Παράγραφοι 2.1 και 2.2.
- Παράγραφος 1.5 (gnuplot).
- Gnuplot tutorial, demos, tips, tricks, επίσημη σελίδα και τεκμηρίωση.

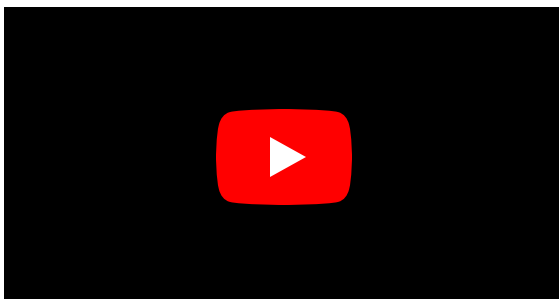
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 8/3/2021.



Εξάσκηση

- Υλοποιήστε τα προγράμματα της παραγράφου 2.1 και 2.2. Σε κάθε περίπτωση τρέξτε τα και φτιάξτε τις γραφικές παραστάσεις $x(t)$, $y(t)$, $v_x(t)$, $v_y(t)$, $y(x)$. Για τις γραφικές παραστάσεις θα χρειαστείτε τα αρχεία gnuplot [animate2D.gpl](#) και [animate3D.gpl](#) από τα Tools του συνοδευτικού λογισμικού.

Διάλεξη 4

Θέματα

- Κίνηση σε μονοδιάστατο και δισδιάστατο κουτί.
- Σφάλματα

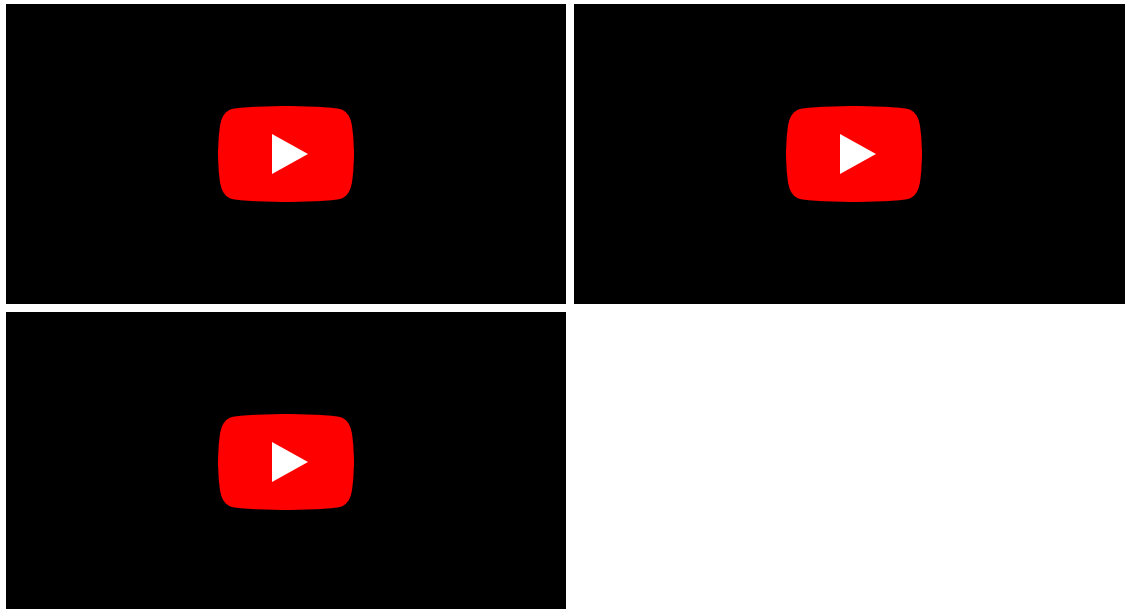
Βιβλιογραφία

- Βιβλίο διδάσκοντα, παράγραφοι 2.3, 2.4.

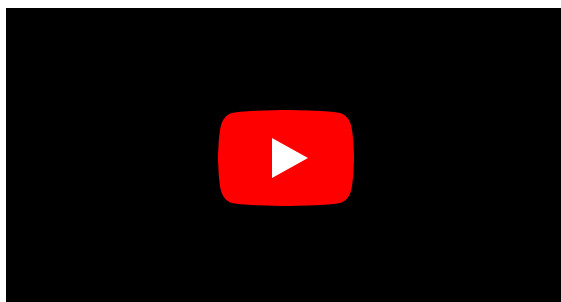
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 18/3/2021.



Εξάσκηση

- Υλοποιήστε τα προγράμματα της παραγράφου 2.3 και 2.4. Σε κάθε περίπτωση τρέξτε τα και φτιάξτε τις γραφικές παραστάσεις $x(t)$, $y(t)$, $v_x(t)$, $v_y(t)$, $y(x)$.

Διάλεξη 5

Θέματα

- Αριθμητική Λύση Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων με αρχικές συνθήκες.
- Μέθοδοι Euler.

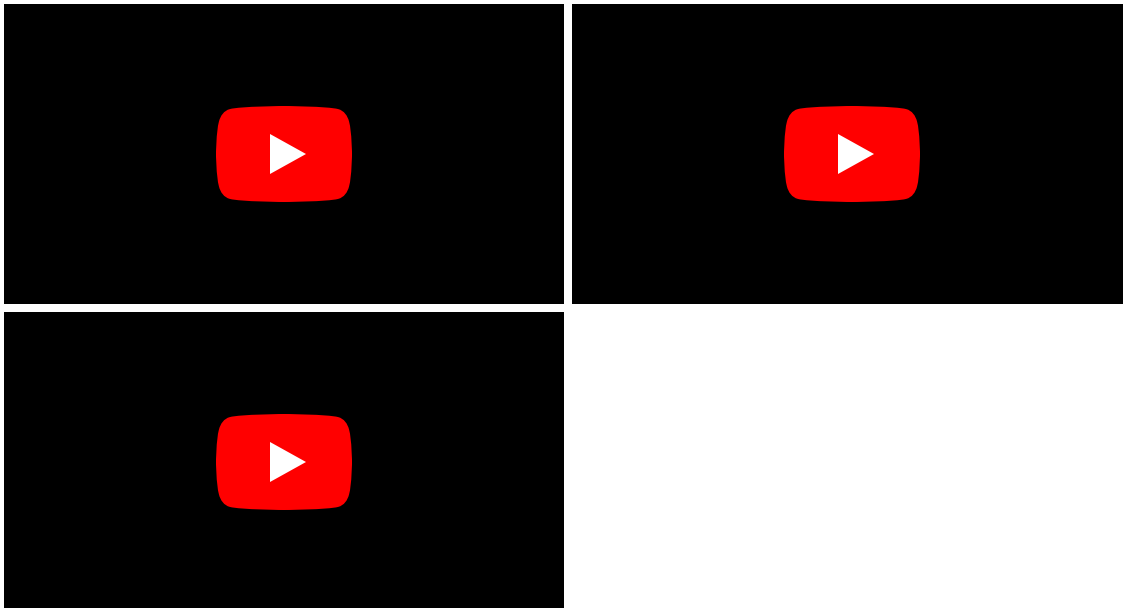
Βιβλιογραφία

- Βιβλίο διδάσκοντα, Κεφάλαιο 4, παράγραφοι 4.1, 4.2.
- Ο πηγαίος κώδικας που γράψαμε στο μάθημα: `euler.f90` (και με `real(8)`).

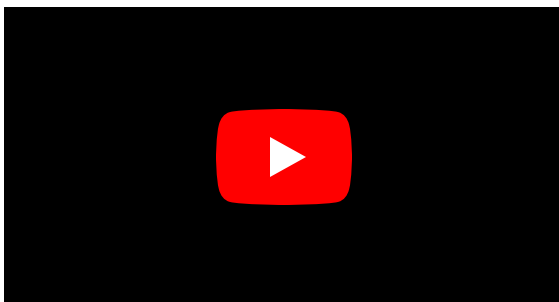
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 22/3/2021.



Εξάσκηση

- **Άσκηση:** Άσκηση 4.5 του βιβλίου
- **Άσκηση:** Μελετήστε το απλό εκκρεμές για $g=10$, $l=1$ και αρχικές συνθήκες $\omega(0)=0$ και $\theta(0)=0.1, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0, 3.0$ rad. Κάντε τη γραφική παράσταση $\theta(t)$ για $0 \leq t \leq 10$. Στη συνέχεια, μελετήστε το απλό εκκρεμές $\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l}(\theta - \frac{1}{6}\theta^3)$ το οποίο είναι κατάλληλο μόνο για μικρές γωνίες $|\theta| \ll 1$. Για κάθε αρχική συνθήκη $\omega(0)=0$ και $\theta(0)=0.1, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0, 3.0$ rad κάντε τη γραφική παράσταση $\theta(t)$ για τα δύο παραπάνω μοντέλα μαζί καθώς και με τη γνωστή αναλυτική λύση του $\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l}\theta$. Για ποιες αρχικές γωνίες η διαφορά των τιμών γίνεται μεγαλύτερη από 10%;
- **Άσκηση:** Για κάθε μέθοδο δοκιμάστε να προσδιορίσετε τις δυνατότητες σύγκλισης κάθε μεθόδου. Παρατηρήστε τις αποκλίσεις στην περίοδο/πλάτος κλπ για κάθε μέθοδο όπως ζητάει η άσκηση για διάφορες τιμές του βήματος ολοκλήρωσης Δt .
- **Άσκηση:** Αντικαταστήστε τις δηλώσεις (declarations) `REAL` με `REAL(8)` και επαναλάβετε. Παρατηρήστε διαφορά στην ποιότητα των αποτελεσμάτων; Τι συμπέρασμα βγάξετε;

Διάλεξη 6

Θέματα

- Λογιστική Απεικόνιση.

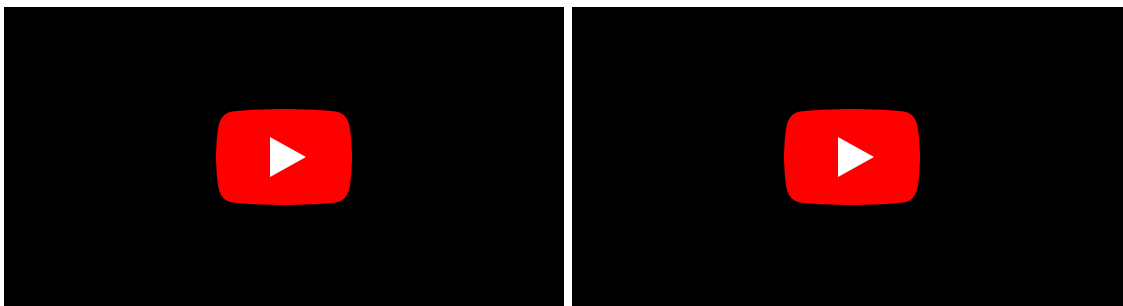
Βιβλιογραφία

- Βιβλίο διδάσκοντα, Κεφάλαιο 3

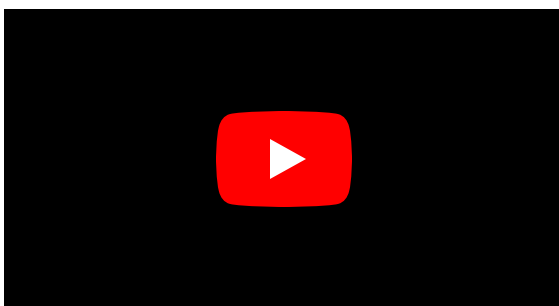
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 29/3/2021.



Εξάσκηση

- Γράψτε κώδικά που να υπολογίζει μία τροχιά της διακριτής λογιστικής εξίσωσης (Λύση: [logistic.f90](#))
- Γράψτε κώδικά που να υπολογίζει το διάγραμμα διακλάδωσης της διακριτής λογιστικής εξίσωσης (Λύση: [bifurcate.f90](#))
- Μελετήστε την εξάρτηση των τροχιών από τις αρχικές συνθήκες για $r = 0.5, 0.99, 1.1, 2.0, 2.99, 3.01, 3.3, 3.5, 3.55, 3.58, 3.6, 3.7, 4.0, 3.84, 3.85$. Παρατηρήστε την αρχική μεταβατική περίοδο (transient state) που εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες. Μετά από πόσα βήματα ~~σταθαισ~~ στην σταθερή κατάσταση σε κάθε περίπτωση; Εξαρτάται αυτό από την αρχική τιμή;

Processing math: 0%

- Αφού περάσετε την μεταβατική φάση, μελετήστε τις τιμές που παίρνει η ακολουθία. Για ποιές τιμές είναι σημείο ισορροπίας, για ποιές k -περιοδική λύση και για ποιές χασοτική;
- Φτιάξτε το διάγραμμα διακλάδωσης στο διάστημα έτσι ώστε να φαίνονται καθαρά τα πρώτα σημεία διακλάδωσης. Τι παρατηρείτε;
- Φτιάξτε το διάγραμμα διακλάδωσης στο διάστημα $\ln \ln [3.82, 3.86]$ έτσι ώστε να φαίνονται καθαρά τα πρώτα σημεία διακλάδωσης. Τι παρατηρείτε;

Διάλεξη 7

Θέματα

- Λογιστική Απεικόνιση
- Σταθερά σημεία, μελέτη ευστάθειας
- Υπολογισμός σταθερών σημείων και κύκλων με τη μέθοδο Newton-Raphson
- Εκθέτες Liapunov

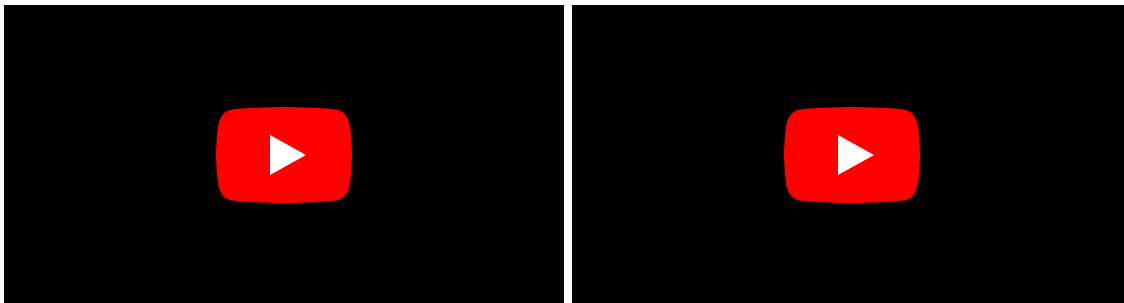
Βιβλιογραφία

- Βιβλίο διδάσκοντα, Κεφάλαιο 3
- Ο πηγαίος κώδικας που γράψαμε στο μάθημα: [nr.f90](#), [nr3.f90](#), [liapunov2.f90](#), [liapunov3.f90](#)

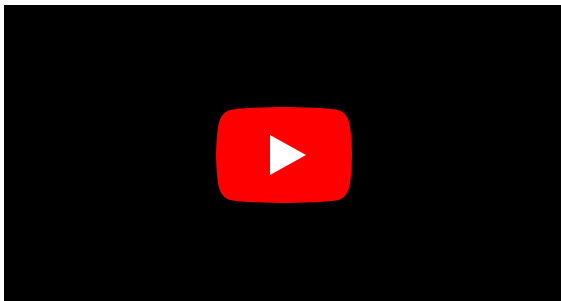
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 5/4/2021.



Εξάσκηση

- Στην κβαντομηχανική θέλουμε να λύσουμε την εξίσωση $\epsilon \tan \epsilon = \sqrt{\rho^2 - \epsilon^2}$, όπου $\epsilon = \sqrt{\frac{m L^2}{2 \hbar^2} E}$, $\rho = \sqrt{\frac{m V_0 L^2}{2 \hbar^2}}$ συνδέονται με το ενεργειακό φάσμα E των δέσμιων καταστάσεων ενός σωματιδίου μάζας m σε ένα πηγάδι δυναμικού πλάτους L και βάθους V_0 . Κάντε τη γραφική παράσταση

Processing math: 0%

των συναρτήσεων $\sqrt{\rho^2 - \epsilon^2}$ και $\tan \epsilon$ για $\rho=8$ και βρείτε γραφικά τις τρεις ρίζες της εξίσωσης. Στη συνέχεια γράψτε πρόγραμμα που να υλοποιεί τη μέθοδο Newton-Raphson για τη λύση της εξίσωσης $g(\epsilon) = \sqrt{\rho^2 - \epsilon^2} - \tan \epsilon = 0$. Επιλέξτε αρχικές τιμές για τον αλγόριθμο που θα συγκλίνουν σε κάθε μια από τις τρεις ρίζες. (Λύση)

Τι παρατηρείτε για τα διαστήματα των αρχικών τιμών που "έλκονται" σε κάθε μια από τις ρίζες; Επιλέξτε τιμές $0.2 \leq x_0 \leq 7.0$ με βήμα $\Delta \epsilon = 0.01$. (Λύση)

- Θεωρήστε το πολυώνυμο $g(x) = x^3 - 2x^2 - 11x + 12$. Βρείτε τις ρίζες που δίνει η μέθοδος Newton-Raphson αν επιλέξετε $x_0 = 2.35287527, 2.35284172, 2.35283735, 2.352836327, 2.352836323$. Τι συμπεραίνετε για το πεδίο έλκησης (basin of attraction) των εν λόγω ριζών του πολυωνύμου; Κάντε τη γραφική παράσταση του πολυωνύμου σε περιοχή γύρω από τις ρίζες του και δοκιμάστε αρχικά σημεία που θα συγκλίνουν σε κάθε μία από αυτές.
- Γράψτε πρόγραμμα που να βρίσκει τα σταθερά σημεία της $x = f^{(k)}(x)$, όπου $f(x) = r x (1-x)$ η λογιστική απεικόνιση. Το πρόγραμμα να υπολογίζει και την τιμή της παραγώγου $|f^{(k)}(x^*)|$. Να βρείτε τους ευσταθείς k -κύκλους της λογιστικής απεικόνισης για $r = 0.5, 1.25, 2, 3.1, 2.9, 3.1, 3.4, 3.48, 3.55$. (Λύση)
- Να γράψετε πρόγραμμα που να υπολογίζει τον εκθέτη Liapunov της λογιστικής απεικόνισης από τη σχέση $\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \ln |f'(x_k)|$. Να υπολογίσετε το αποτέλεσμα για $r = 3.8$ χρησιμοποιώντας ως αρχικά σημεία τα $x_0 = 0.2, 0.35, 0.5, 0.75$ και από τη διαφορά των αποτελεσμάτων να εκτιμήσετε το σφάλμα προσδιορισμού του λ . Πάρτε αρχικά $n = 3000$ και μετά $n = 70,000$. Τι παρατηρείτε; Μπορείτε να φτάσετε $n = 2,000,000$ και να δείτε τη διαφορά; (Λύση)
- Να υπολογίσετε τον εκθέτη Liapunov της λογιστικής απεικόνισης για $2.4 < r < 4$. Να κάνετε τη γραφική παράσταση $\lambda(r)$ και να εκτιμήσετε για ποιες τιμές του r το σύστημα περνάει από περιοδική σε μη περιοδική συμπεριφορά. (Λύση)

Διάλεξη 8

Θέματα

- Εξίσωση διάχυσης και απαγωγής θερμότητας σε μία διάσταση
- Αριθμητική επίλυση εξίσωση απαγωγής θερμότητας σε μία διάσταση

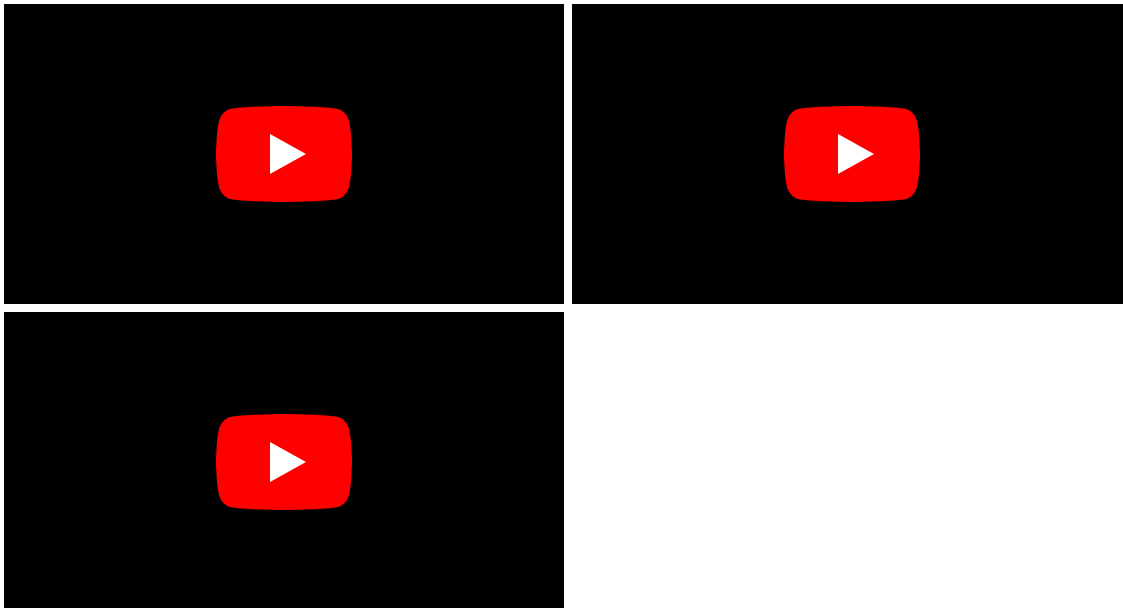
Βιβλιογραφία

- Βιβλίο διδάσκοντα, παράγραφοι 8.1-8.5.
- Ο πηγαίος κώδικας που γράψαμε στο μάθημα: [diffusion.f90](#)

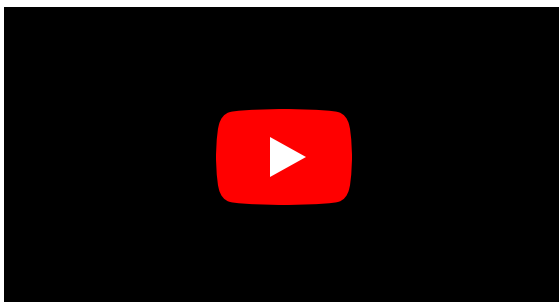
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 12/4/2021.



Εξάσκηση

- Γράψτε πρόγραμμα που να υλοποιεί τον αλγόριθμο που περιγράφεται στην παράγραφο 3.2 με αρχική συνθήκη $u(x,0) = \sin(\pi x)$ (Λύση: [diffusion.f90](#))
- Να τρέξετε το πρόγραμμα για τιμές των παραμέτρων με αποδεκτή τιμή της παραμέτρου Courant $\Delta t/\Delta x^2 < 1/2$. Ενδεικτικά οι δοκιμές σας μπορούν να γίνουν για $N_x=10$, $N_t=100$, και τελικό χρόνο $t_f = 0.4$
- Να φτιάξετε τρισδιάστατη γραφική παράσταση της συνάρτησης $u(x,t)$ και να τη μελετήσετε. Επαναλάβετε βάζοντας λογαριθμική κλίμακα στον άξονα των z .
- Να φτιάξετε στο ίδιο διαγραμμα τη διδιάστατη γραφική παράσταση $(x,u(x,t))$ για δεδομένες τιμές του t . Παραστήστε τις καμπύλες για βήμα χρόνου $j=3, 6, 10, 20, 30, 50, 80, 100, 200$.
- Ελέγξτε το αριθμητικό αποτέλεσμα αν και πόσο αποκλίνει από την αναλυτική λύση $u(x,t) = \sin(\pi x) \exp(-\pi^2 t)$.
- Φτιάξτε τις γραφικές παραστάσεις των καμπύλων $(t,u(x,t))$ για δεδομένες τιμές του x . Επιλέξτε σημεία κοντά στο μέσο, τέταρτο και άκρο του διαστήματος $[0,1]$. Βάλτε λογαριθμική κλίμακα στον άξονα των z . Τι παρατηρείτε;
- Δοκιμάστε τα παραπάνω για μεγάλες τιμές της παραμέτρου Courant. Ενδεικτικά πάρτε $N_x=10$, $N_t=100$, και τελικό χρόνο $t_f = 2.0$
- Αλλάξτε τις αρχικές συνθήκες σε $u(x,0) = \sin(2\pi x)$ και επαναλάβετε. Τι παρατηρείτε;
- Αλλάξτε τις αρχικές συνθήκες σε $u(x,0) = 0$ εκτός από το $u(0.5,0) = 1$ και επαναλάβετε. Τι παρατηρείτε;

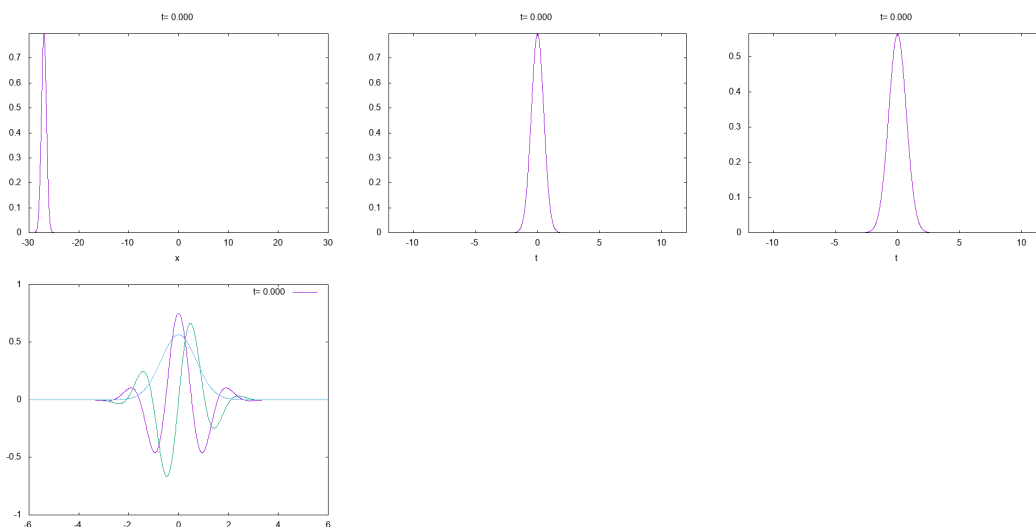
Διάλεξη 9

Θέματα

- Κβαντική Δυναμική - η χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger
- Σκέδαση σε φράγμα/πηγάδι δυναμικού
- Ο αρμονικός ταλαντωτής

Βιβλιογραφία

- Συμπληρωματικές σημειώσεις διδάσκοντα Παράγραφοι 1.1-1.6 (και συνοδευτικό λογισμικό)
- Ο πηγαίος κώδικας που γράψαμε στο στη διάλεξη



Στον οριζόντιο άξονα είναι η θέση x , ενώ στον κατακόρυφο η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματιδίου $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ στη θέση x τη χρονική στιγμή t

1η εικόνα: Κίνηση/σκέδαση αρχικά Γκαουσιανού κυματοπακέτου μέσα/πάνω στα τοιχώματα, ενός απειρόβαθου πηγαδιού δυναμικού ($-30 < x < 30$)

2η εικόνα: Χρονική εξέλιξη Γκαουσιανού κυματοπακέτου στο δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή

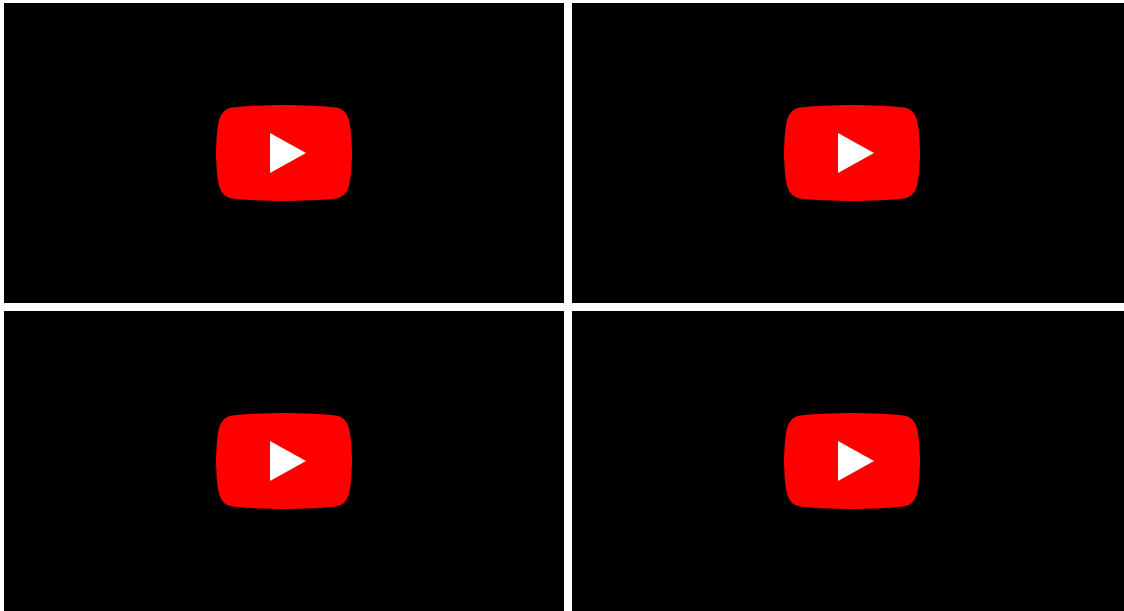
3η εικόνα: Χρονική εξέλιξη στο δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή μίας coherent state

4η εικόνα: Χρονική εξέλιξη στο δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή μίας coherent state (πυκνότητα πιθανότητας $\rho(x,t)$ μαζί με $\text{Re}(\psi(x,t))$, $\text{Im}(\psi(x,t))$)

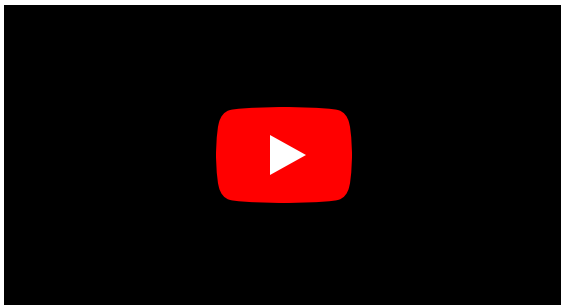
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στο παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένη η διάλεξη που έγινε εξ'αποστάσεως στις 19/4/2021.



Διάλεξη 10

Θέματα

- Εξάσκηση

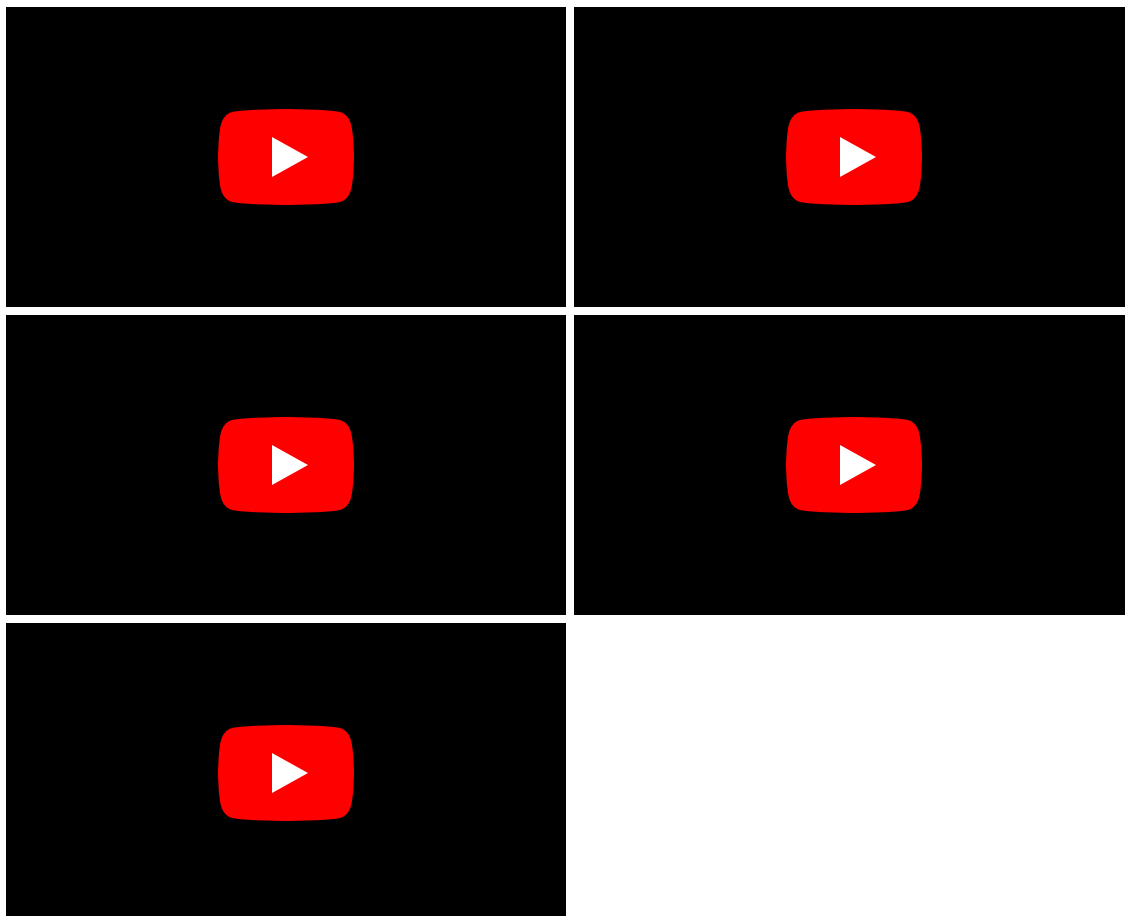
Εξάσκηση

- Μελετήστε τον τρόπο διεξαγωγής και τη σχετική διαδικασία των εξετάσεων. Θα σας βοηθήσει να μην χάσετε χρόνο την ημέρα που θα εξεταστείτε.
- Εξασκηθείτε με βάση τα ενδεικτικά θέματα για τις επερχόμενες εξετάσεις.
- Ενδεικτικά θέματα, ομάδα 2.
- Ενδεικτικά θέματα, ομάδα 3.

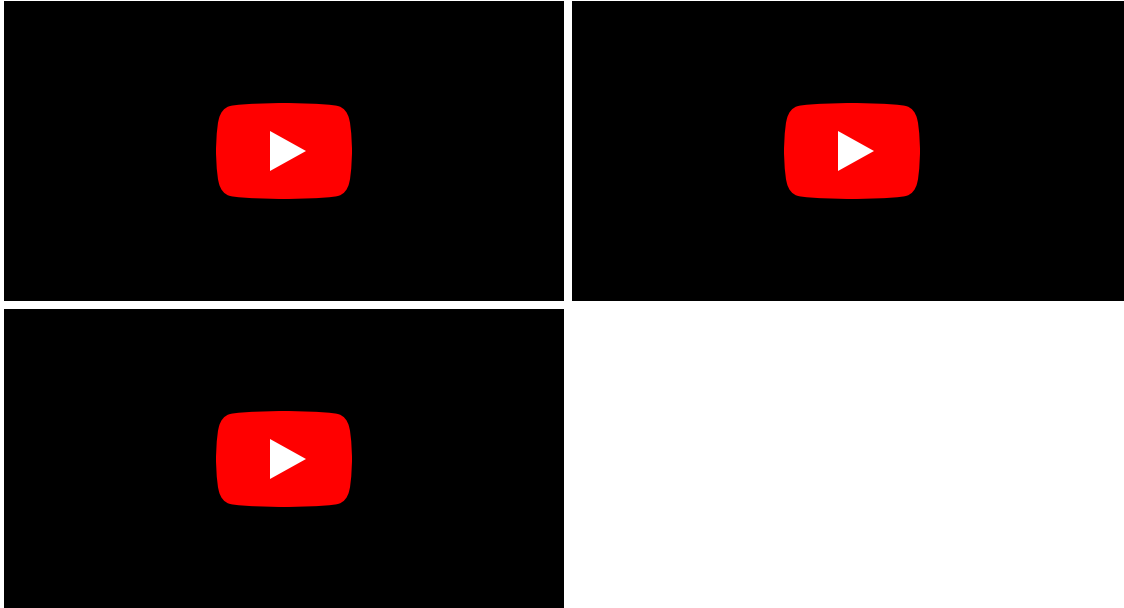
Σχετικές Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από το διδάσκοντα σε θέματα συναφή με τη διάλεξη. Οι διαλέξεις που γίνονται στο εργαστήριο και οι διαλέξεις που παρουσιάζονται στα βίντεο δεν ταυτίζονται ως προς τα θέματα και την παρουσίαση, αλλά έχουν σημαντική επικάλυψη.

Στα settings του YouTube viewer, επιλέξτε **High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο.



Στα παρακάτω βίντεο είναι καταγεγραμμένες οι διαλέξεις που έγιναν εξ'αποστάσεως στις 10/5/2021, 17/5/2021 και 24/5/2021. Δυστυχώς η διάλεξη της 17/5 διακόπηκε λόγω τεχνικών προβλημάτων στο δίκτυο στο 2:55:00 περίπου.



Βιντεοδιαλέξεις

Διαλέξεις από τον Συγγραφέα πάνω σε επιλεγμένα κεφάλαια του βιβλίου

Εικονικές διαλέξεις από τον συγγραφέα σε θέματα συναφή με μερικά από τα κεφάλαια του βιβλίου. Το υλικό είναι βοηθητικό για το μάθημα Προγραμματισμός με Εφαρμογές στην Επιστήμη του Μηχανικού (Επιστημονικός Προγραμματισμός) του 4ου Εξαμήνου της Σχολής ΕΜΦΕ, ΕΜΠ. Στα settings του YouTube viewer, **επιλέξτε High Definition (1080p HD)** για την ευκρινή θέαση των λεπτομερειών στο βίντεο. Δείτε και τη σχετική λίστα στο youtube.

- Κεφάλαιο 1: Υπολογιστής
 1. **Λειτουργικό Σύστημα και Σύστημα Αρχείων:** Στόχοι μαθήματος, Επιλογές Linux/Fortran, Linux, Σύστημα Αρχείων (filesystem), Διαδρομές σε αρχεία (path), Απόλυτη και σχετική διαδρομή
 2. **Βασικές Εντολές Διαχείρισης Αρχείων:** Φλοιός, γραμμή εντολών, δομή εντολών, εντολές διαχείρισης καταλόγων (cd, pwd, mkdir, rmdir), εντολές διαχείρισης αρχείων (cp, mv, rm, chmod), προνόμια πρόσβασης, μεταβλητές περιβάλλοντος, PATH, αναζήτηση βοήθειας
 3. **Εντολές Επεξεργασίας Κειμένου:** Εντολές φλοιού επεξεργασίας κειμένου. cat, head, tail, less, sort, awk
 4. **stdin/stdout/stderr, ανακατεύθυνση και piping:** stdin/stdout/stderr, ανακατεύθυνση, piping, παραδείγματα
 5. **Emacs:** Χρήση του editor Emacs
 6. **Fortran:** Εισαγωγή στη Γλώσσα Προγραμματισμού Fortran
 7. **Gnuplot:** Απεικόνιση δεδομένων με το gnuplot, απεικόνιση συναρτήσεων, 2-διάστατες γραφικές παραστάσεις, εκφράσεις, απεικόνιση δεδομένων εξωτερικών προγραμμάτων, εγγραφή γραφικής παράστασης σε αρχείο, 3-διάστατες γραφικές παραστάσεις, παραμετρικές γραφικές παραστάσεις, (μη γραμμικές) προσαρμογές δεδομένων σε συναρτήσεις
 8. **Shell Scripting:** Σενάρια φλοιού στο φλοιό tcsh, μεταβλητές, εργαλεία για ονόματα αρχείων, επαναλήψεις foreach και while, if, command substitution, here documents
- Κεφάλαιο 2: Περιγραφή της Κίνησης
 1. **Κίνηση στο Επίπεδο:** Εξίσωση τροχιάς, κινηματικές ποσότητες, απεικόνιση τροχιάς στο επίπεδο, ομαλή κυκλική κίνηση, γραφικές παραστάσεις τροχιών με το gnuplot, animation τροχιάς
 2. **Κίνηση στο Χώρο:** Απεικόνιση τροχιάς στο χώρο, κίνηση φορτίου σε σταθερό μαγνητικό πεδίο, 3-διάστατες γραφικές παραστάσεις καμπύλων με το gnuplot, animation τροχιάς στο χώρο
 3. **Άσκηση: Κίνηση στο Επίπεδο:** Απλό εκκρεμές, βολή στο πεδίο βαρύτητας με αντίσταση αέρα
 4. **Το Μονοδιάστατο Κουτί:** Σωματίδιο σε μονοδιάστατο κουτί, συστηματικά σφάλματα διακριτοποίησης των εξισώσεων κίνησης, μελέτη ακρίβειας πράξεων μεταβλητών real
 5. **Άσκηση: Το Δισδιάστατο Κουτί:** Κίνηση ελεύθερου σωματιδίου περιορισμένου στο επίπεδο, άσκηση: βολή μίνι γκολφ
 6. **Θέμα Εξετάσεων: Basketball:** Κίνηση σωματιδίου με την επίδραση σταθερής δύναμης και εμπόδια
- Κεφάλαιο 3: Λογιστική Απεικόνιση
 1. **Λογιστική Απεικόνιση: Εισαγωγή:** Σταθερά σημεία, ευστάθεια σταθερών σημείων, κριτήρια ευστάθειας, διακλάδωση (bifurcation), 2^n κύκλοι

2. Σταθερά σημεία, 2^n κύκλοι: Σταθερά σημεία, ευστάθεια σταθερών σημείων, κριτήρια ευστάθειας, διακλάδωση (bifurcation), 2^n κύκλοι
 3. Υπολογισμός Σταθερών Σημείων: Μέθοδος Newton-Raphson, παράδειγμα: ενεργειακό φάσμα σωματιδίου σε τετραγωνικό δυναμικό, επίλυση της $x=f(x)$ με τη μέθοδο Newton-Raphson, επίλυση της $x=f^{(k)}(x)$ με τη μέθοδο Newton-Raphson, σταθερά σημεία της $f^{(k)}(x)$ και μελέτη της ευστάθειάς τους, ευσταθείς k -κύκλοι
 4. Εκθέτες Liapunov: Υπολογισμός εκθέτη Liapunov για τη λογιστική απεικόνιση
 5. Άσκηση: Υπολογισμός Σημείων Διακλάδωσης: Μέθοδος Newton-Raphson για δύο εξισώσεις/δύο μεταβλητές, αριθμητικός υπολογισμός των σημείων διακλάδωσης
 6. Θέμα Εξετάσεων: Απεικόνιση του Hénon: Διάγραμμα διακλάδωσης της απεικόνισης του Hénon
- Κεφάλαιο 4: Δυναμική Σωματιδίου
 1. Ολοκλήρωση Εξισώσεων Νεύτωνα – Μέθοδοι Euler: Δυναμική σωματιδίου στη μία διάσταση, ολοκλήρωση εξισώσεων Νεύτωνα με αρχικές συνθήκες, το απλό εκκρεμές, μέθοδοι Euler, Euler-Cromer, Euler-Verlet, σφάλματα διακριτοποίησης, συστηματικά σφάλματα υπολογισμών καθώς $\Delta t \rightarrow 0$
 2. Παράδειγμα Ολοκλήρωσης Εξισώσεων Κίνησης με Χρήση Μεθόδων Euler: Αριθμητική μελέτη του απλού εκκρεμούς, μελέτη σφαλμάτων διακριτοποίησης, μελέτη συστηματικών σφαλμάτων καθώς $\Delta t \rightarrow 0$
 3. Θέμα Εξετάσεων: Μελέτη Δυναμικού: Περιορισμένη κίνηση σωματιδίου σε δυναμικό $V(x)$, εύρεση σημείων ανάκλασης και σημείου ισορροπίας γραφικά και με τη μέθοδο Newton-Raphson, ολοκλήρωση εξισώσεων κίνησης, μελέτη διατήρησης της μηχανικής ενέργειας
 - Κεφάλαιο 8: Εξίσωση Διάχυσης και Απαγωγής της Θερμότητας
 1. Εισαγωγή: Εξίσωση διάχυσης, τυχαίες διαδρομές, διατήρηση πιθανότητας, συννοριακές συνθήκες, απαγωγή θερμότητας σε ευθύγραμμη λεπτή μεταλλική ράβδο, χωροχρονικό πλέγμα, διακριτοποίηση εξίσωσης διάχυσης, συνθήκες σύγκλισης, παράμετρος Courant
 2. Προγραμματισμός και μελέτη λύσεων: Πρόγραμμα diffusion.f90, απεικόνιση $u(x,t)$, απεικόνιση $u(x,t)$ για δεδομένα x και t , έλεγχος συμφωνίας αριθμητικής και αναλυτικής λύσης
 3. Θέμα Εξετάσεων: Απαγωγή Θερμότητας σε Ανομοιογενή Ράβδο: Εξίσωση απαγωγής θερμότητας με συντελεστή θερμοδιάχυσης που εξαρτάται από το χώρο
 - Κεφάλαιο 1, σημειώσεις: Εξίσωση Schrödinger
 1. Εισαγωγή: Θεωρία: Κβαντική δυναμική από εξίσωση Schrödinger, αρμονικός ταλαντωτής, σχήμα Visscher
 2. Προγραμματισμός: Πρόγραμμα tdse_fd.f90
 3. Ανάλυση αποτελεσμάτων: απεικόνιση $\rho(x,t)$, $\text{Re}(\psi(x,t))$, $\text{Im}(\psi(x,t))$, έλεγχος διατήρησης πιθανότητας, χρονική εξέλιξη κυματοπακέτου, coherent states αρμονικού ταλαντωτή
 4. Άσκηση: Σκέδαση κυματοπακέτου πάνω σε φράγμα/πηγάδι δυναμικού
 - Ασκήσεις
 1. Ασκήσεις (1): Προετοιμασία στη διαδικασία εξέτασης, Άσκηση: Δυναμική εξέλιξης πληθυσμών, Άσκηση: Υπολογισμός σταθερών σημείων με τη μέθοδο Newton-Raphson, Άσκηση: Μελέτη δυναμικής σωματιδίου με τη μέθοδο Euler-Verlet
 2. Ασκήσεις (2): Εξίσωση θερμοδιάχυσης, Άσκηση: Μέθοδος Euler στη δυναμική εξέλιξη πληθυσμών, Άσκηση: Σταθερά σημεία και σημεία διακλάδωσης απεικόνισης
 3. Ασκήσεις (3): Σωματίδιο κινούμενο ελεύθερα μέσα σε τετράγωνο, μελέτη σύγκλισης για $\delta t \rightarrow 0$, Άσκηση: Μελέτη δυναμικής εξέλιξης πληθυσμών με μέθοδο Euler, μελέτη σύγκλισης λύσης καθώς $\delta t \rightarrow 0$
 4. Ασκήσεις (4): Εξισώσεις FitzHugh-Nagumo με όρο διάχυσης, Άσκηση: tent map: διάγραμμα διακλάδωσης και σταθερά σημεία

5. **Ασκήσεις (5):** Εξίσωση Schrödinger, Άσκηση: Σκέδαση κυματοπακέτου πάνω σε φράγμα/πηγάδι δυναμικού