Metody Obliczeniowe Fizyki i Techniki
Laboratorium 1
Dynamika punktu materialnego 1D

Krzysztof Tondera III rok

20.03.2021

Ciało o masie m=1 kg porusza się w potencjale:

$$V(x) - exp(-x^2) - 1.2exp(-(x-2)^2) \tag{1}$$

w chwili początkowej ciało znajduje się w spoczynku v=0, a jego położenie odpowiada energii potencjalnej E=-0.6 [J]. Aby zaimplementować te informacje wykorzystano poniższe funkcje:

[1]:
```
def fun_potential(x):
return -np.exp(-x**2)-1.2*np.exp(-(x-2)**2) #[J]

def fun(x):
return fun_potential(x)-E
```

1 Zad 1

Celem pierwszego zadania było wyznaczenie punktu zwrotnego ruchu ciała V(x)=E oraz obszar dostępny dla ruchu ciała $\forall_x$V(x)$\leq$E. W tym celu wykorzystano metodę bisekcji oraz metodę Newtona-Raphsona.

1.0.1 Metoda bisekcji

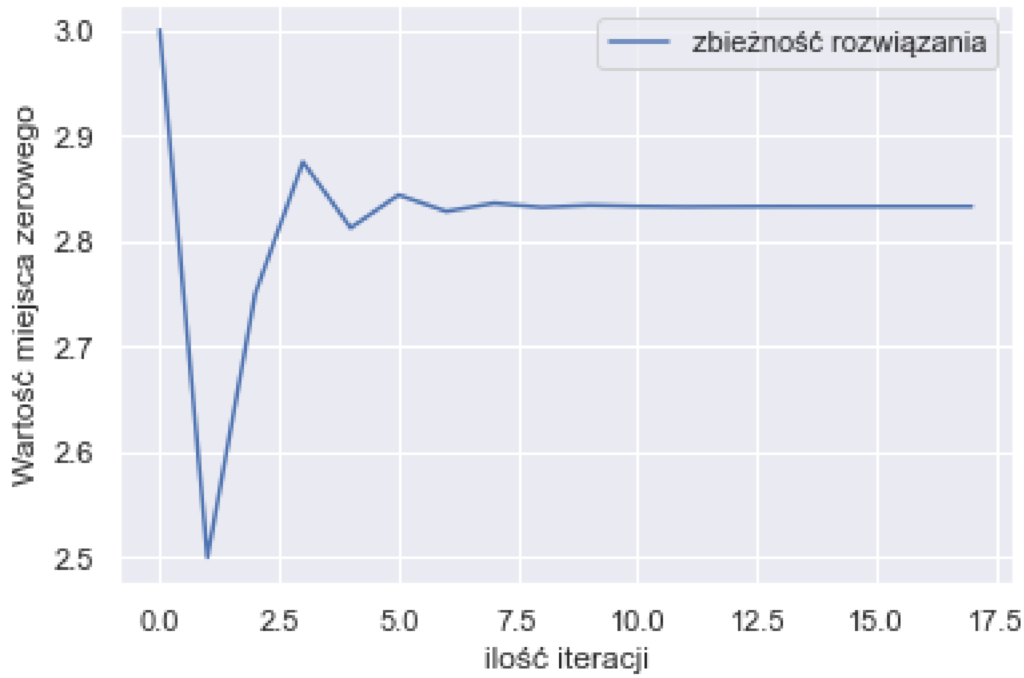
W tej metodzie znajdowaliśmy końce przedziału w których funkcja V(x)-E zmienia znak. Następnie liczono znak funkcji w środku przedziału i odpowiednio zwężano przedział do połowy jej długości. Proces ten powtarzano aż do otrzymania odpowiedniej dokładności wyniku ($\epsilon = 10^{-5}$). W tym celu zaimplementowano funkcję:

[2]:
```
def fun_bisek(f,a,b):
    assert (f(a)>0 and f(b)<0) or (f(a)<0 and f(b)>0), "Złe punkty graniczne"
    m_tab=[]
    mi=(a+b)/2
    while abs(a-b)>eps:
        m_tab.append(mi)
        if f(a)*f(mi)<0: b=mi
        elif f(b)*f(mi)<0: a=mi
        mi=(a+b)/2

    print("Miejsce zerowe funkcji to: {:.5f}".format(mi))
    plt.plot(m_tab,label="zbieżność rozwiązania")
    plt.xlabel("ilość iteracji")
    plt.ylabel("Wartość miejsca zerowego")
    plt.legend()
```

```
    plt.grid(True)
    plt.show()

fun_bisek(fun,2,4)
```

```
Miejsce zerowe funkcji to: 2.83288
```

A następnie przedstawiono graficznie tempo zbieżności rozwiązania:



1.0.2 Metoda Newtona-Raphsona

Aby uzyskać szybie tempo zbieżności użyto metody Newtona-Raphsona w której:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{2}$$

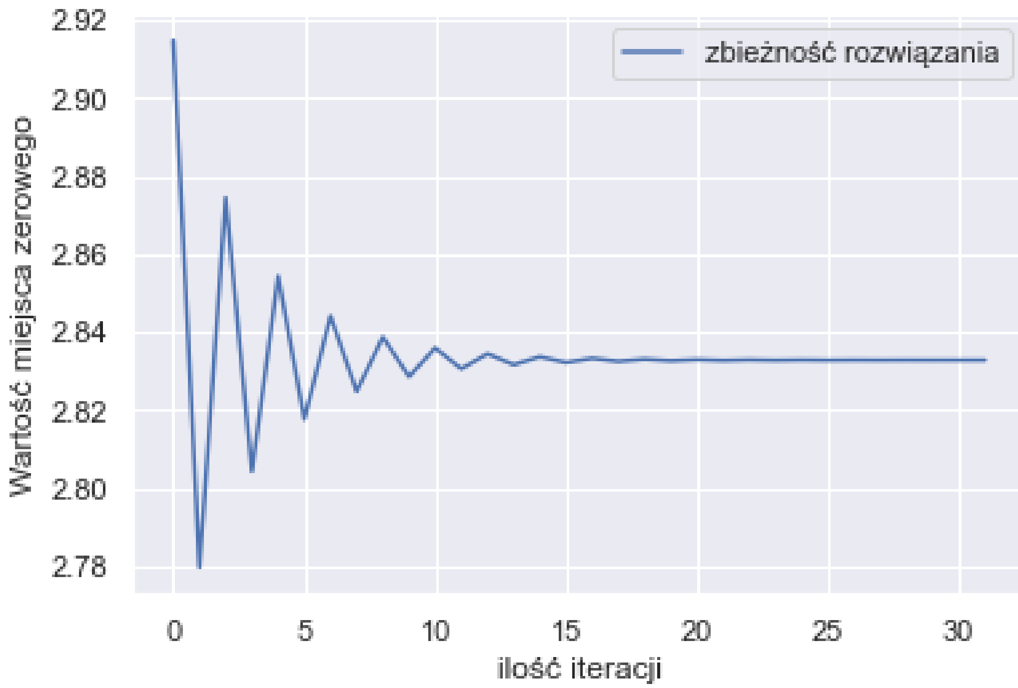
gdzie x_n to przybliżenie zera w n-tej iteracji. Zrealizowano to za pomocą poniższej funkcji:

[3]:
```
def fun_newton_raphson(f,a,dx):
    tab_xn=[]
    x_n=a
    x_n1=x_n-f(x_n)/diff(f,x_n,dx)
    while abs(x_n - x_n1) > eps :
        x_n=x_n1
        x_n1=x_n-f(x_n)/diff(f,x_n,dx)
        tab_xn.append(x_n1)

    #print(tab_xn)
    print("Miejsce zerowe funkcji to: {:.5f}".format(x_n1))
    plt.plot(tab_xn,label="zbieżność rozwiązania")
    plt.xlabel("ilość iteracji")
```

```
    plt.ylabel("Wartość miejsca zerowego")
    plt.legend()
    plt.grid(True)
    plt.show()

fun_newton_raphson(fun,3,1)
```

```
Miejsce zerowe funkcji to: 2.83288
```

A następnie udokumentowano tempo zbieżności:



2 Zad2

Kolejnym zadaniem było całkowanie równań ruchu jawnym schematem Eulera. W tym celu napisano funkcje obliczające wartość położenia i prędkości w jawnym schemacie Eulera:

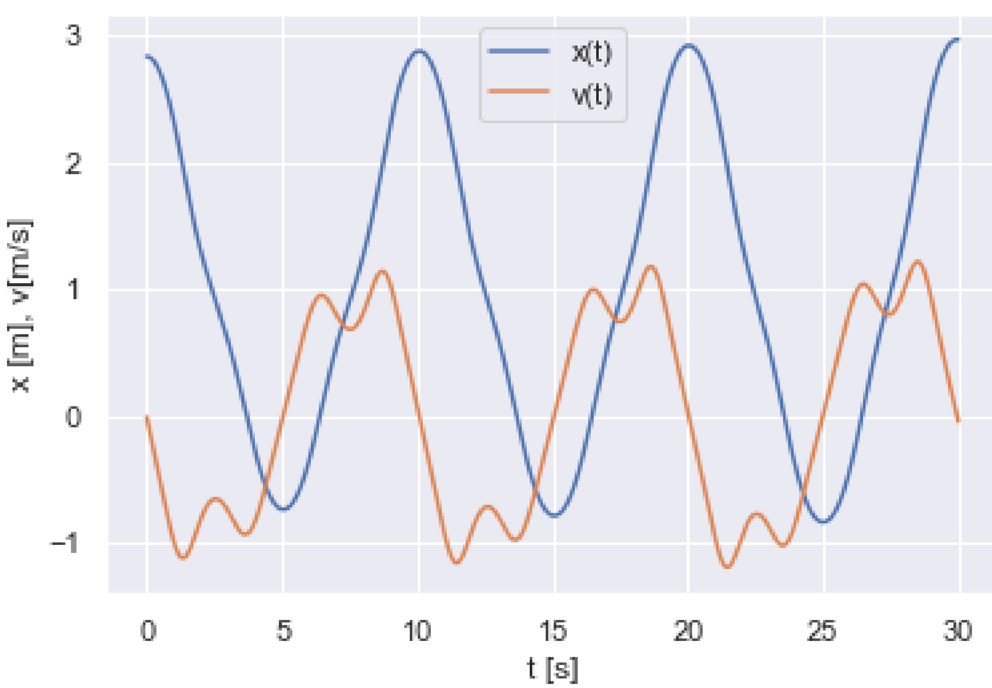
$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t \tag{3}$$

$$v_{n+1} = v_n - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n}\Delta t \tag{4}$$

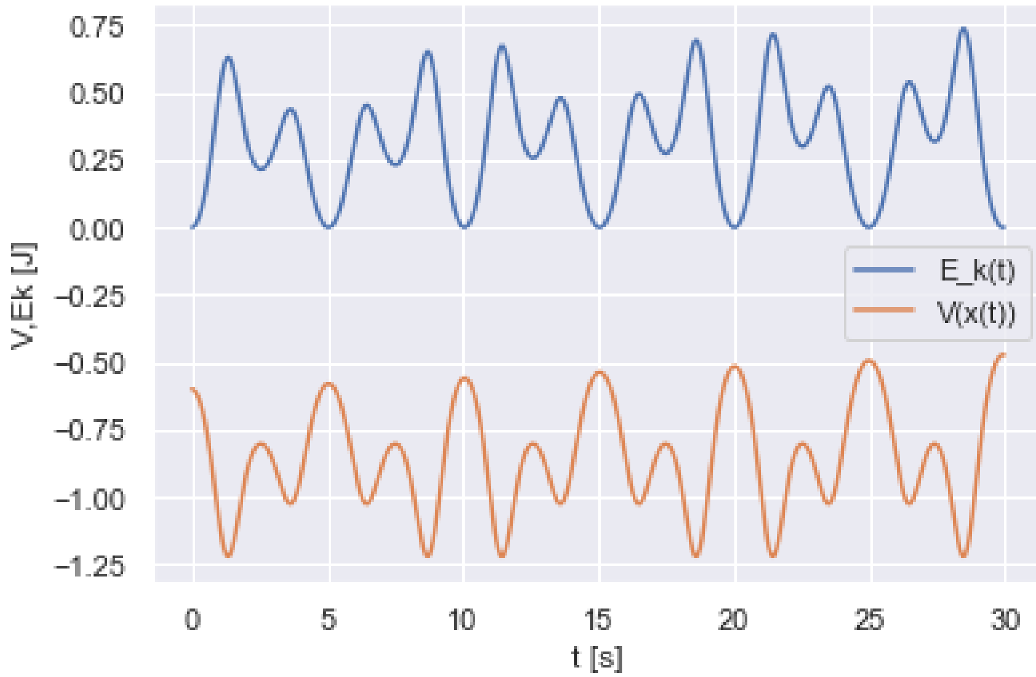
```
[4]: def fun_diff(x):
         return 2*x*np.exp(-x**2)-1.2*(-2*x+4)*np.exp(-(x-2)**2)

     def x_t(x,v0,dt):
         return x+v0*dt

     def v_t(x,v0,dt):
         return v0-(1/m)*fun_diff(x)*dt
```

```
def fun_Ek(v):
    return m*v**2/2

def fun_euler(x0,v0,dt,t):
    x_tab=[]
    v_tab=[]
    Ek_tab=[]
    V_tab=[]
    E_tab=[]

    for i in t:
        temp=x0
        x0=x_t(x0,v0,dt)
        v0=v_t(temp,v0,dt)
        ek=fun_Ek(v0)
        v=fun_potential(x0)
        ene=ek+v

        x_tab.append(x0)
        v_tab.append(v0)
        Ek_tab.append(ek)
        V_tab.append(v)
        E_tab.append(ene)

    return (x_tab,v_tab,Ek_tab,V_tab,E_tab)
```

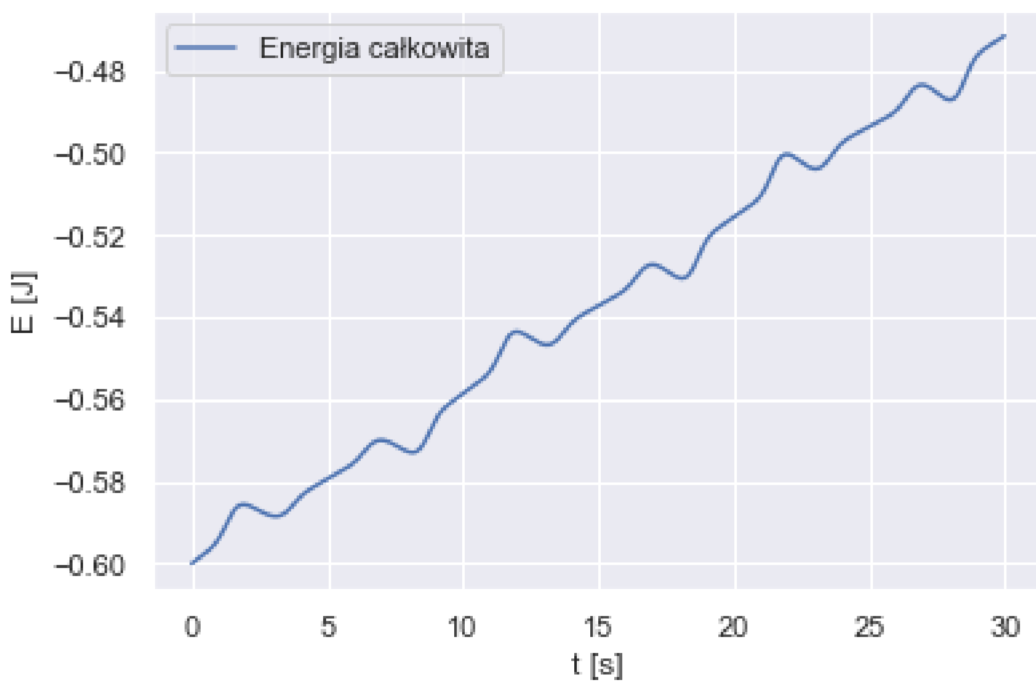
Następnie narysowano wykresy:



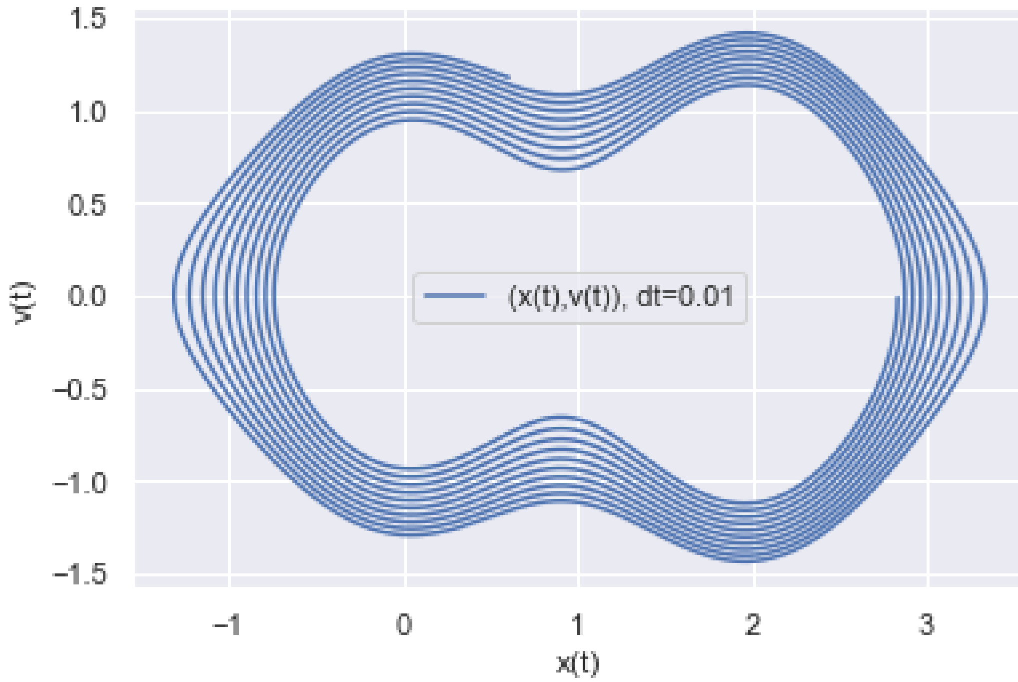
Wykres x(t) oraz v(t)



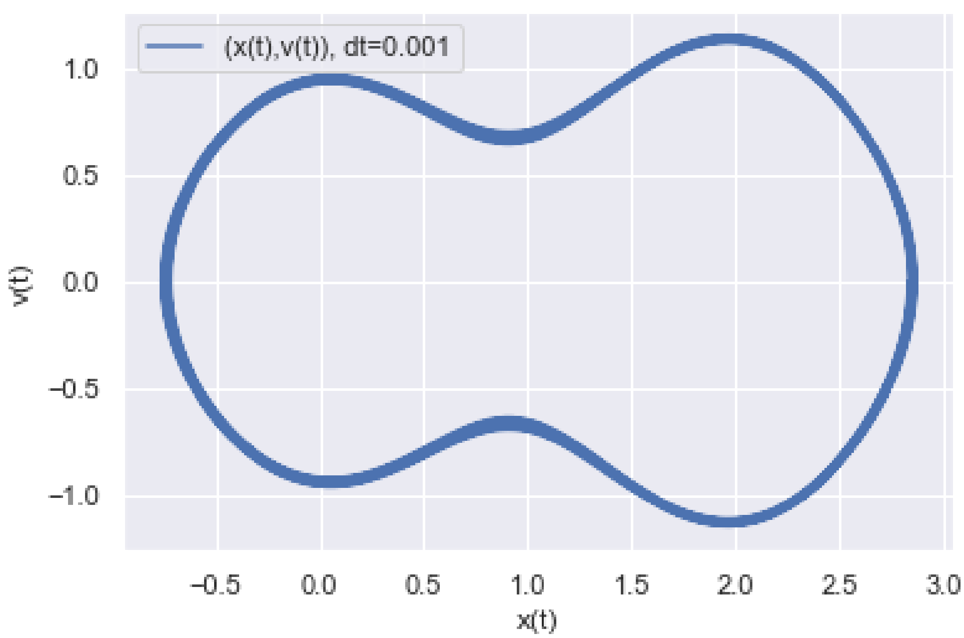
Wykres energii kinetycznej i potencjału



Wykres energii całkowitej $E = E_k(t) + V(x(t))$



Portret fazowy (x(t),v(t)) dla Δt=0.01



Portret fazowy (x(t),v(t)) dla Δt=0.1

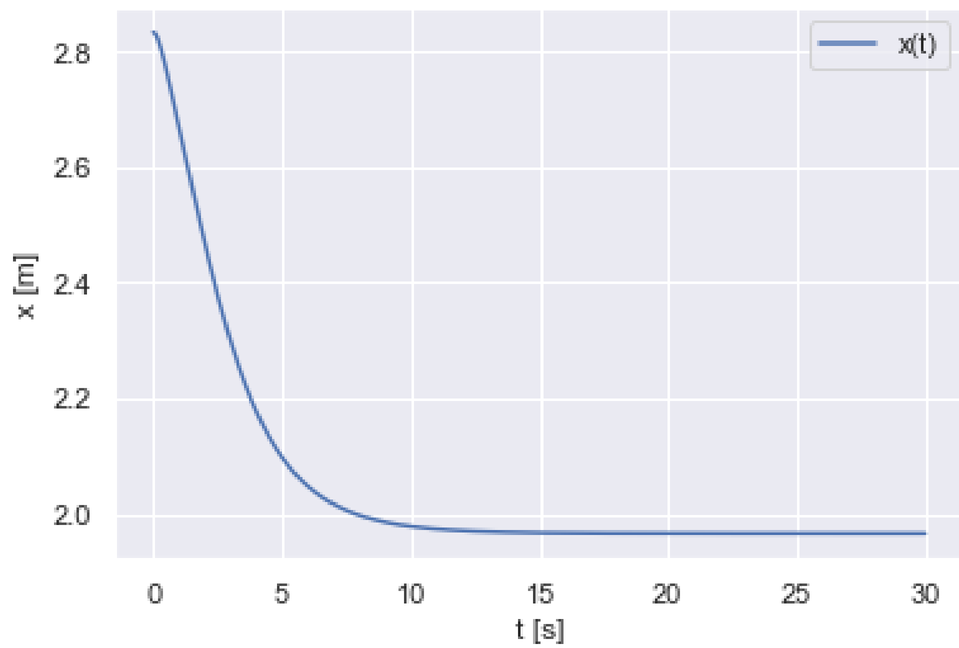
3 Zad3

Celem trzeciego zadania było całkowanie równań z oporami ruchu. W tym przypadku wzór na prędkość przyjmuje postać:

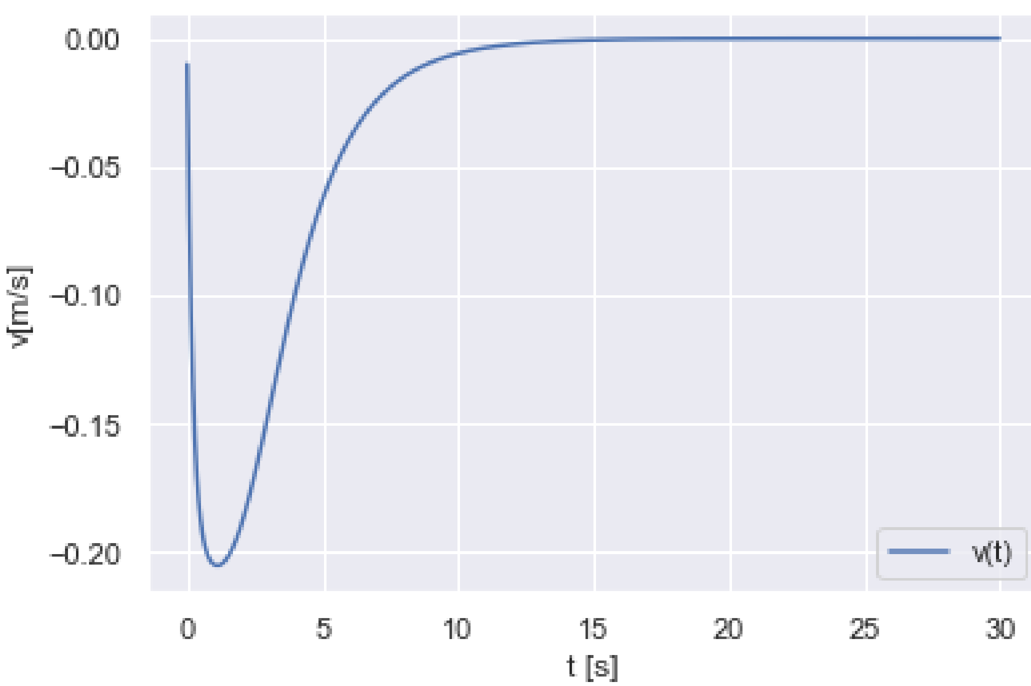
$$v_{n+1} = v_n - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n}\Delta t - \alpha v_n \Delta t \tag{5}$$

Zaimplementowano prędkosć w tej formie do funkcji całukącej równania ruchu jawnym schematem Eulera.

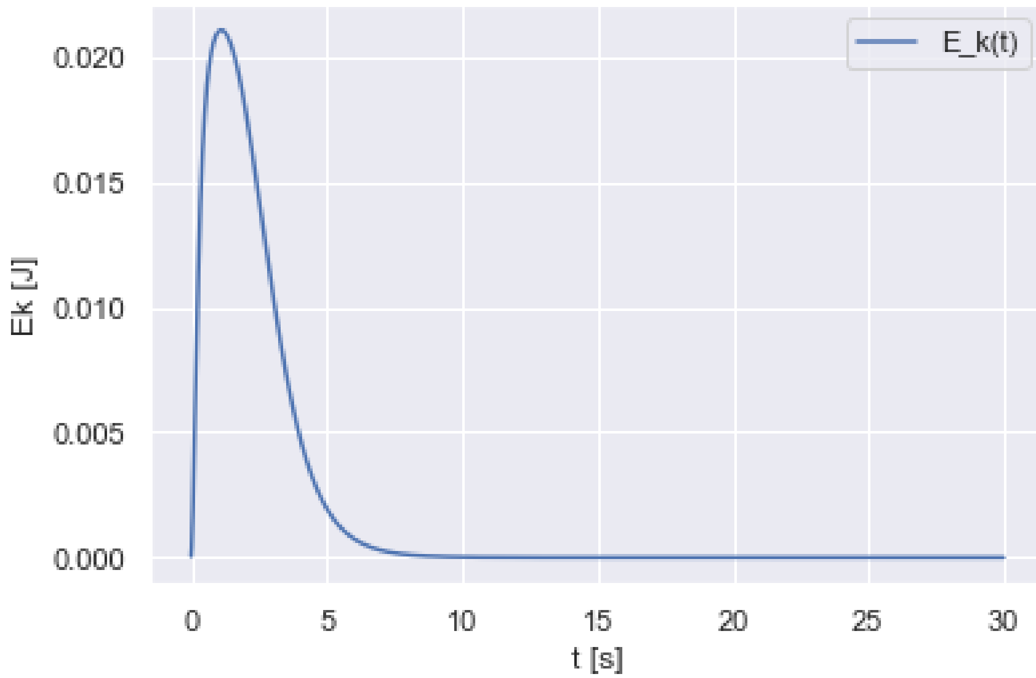
3.1 α=5, Δt=0.01



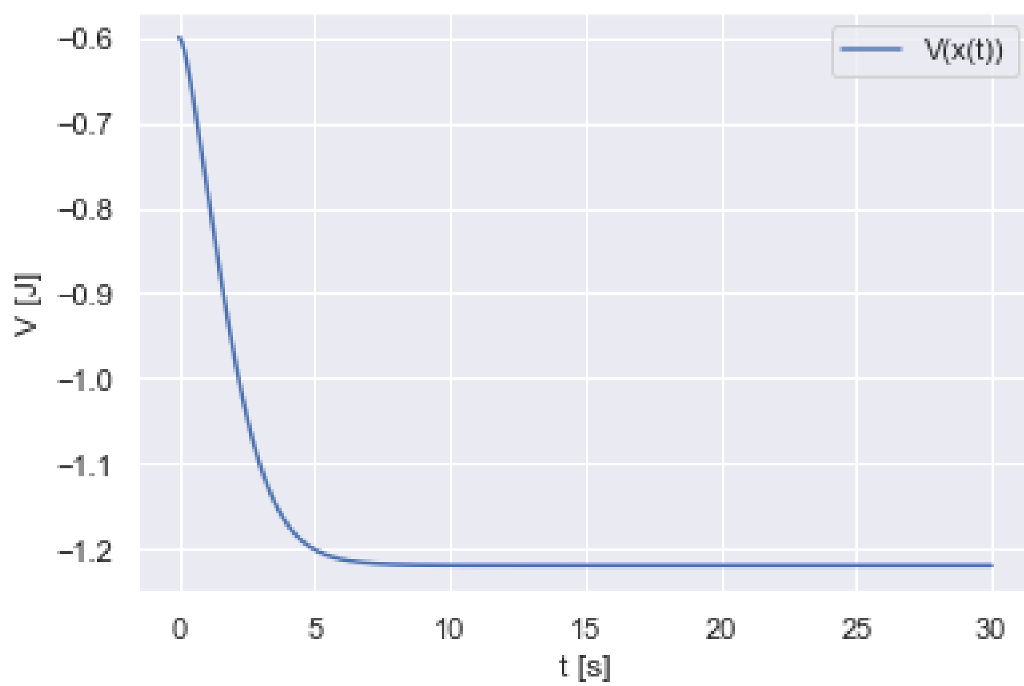
Wykres x(t)



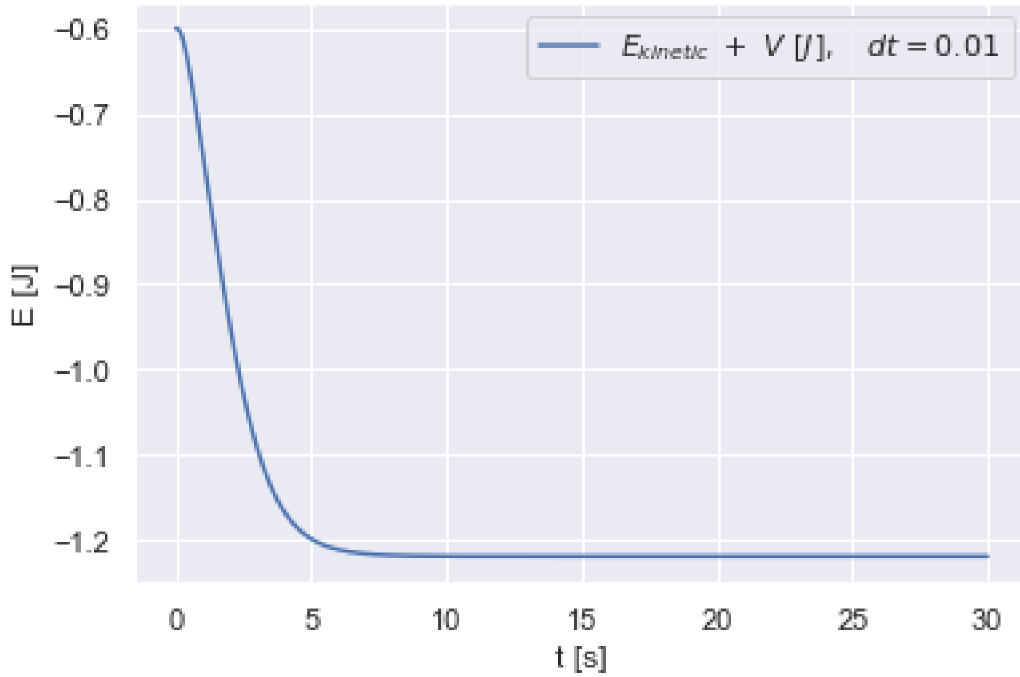
Wykres v(t)



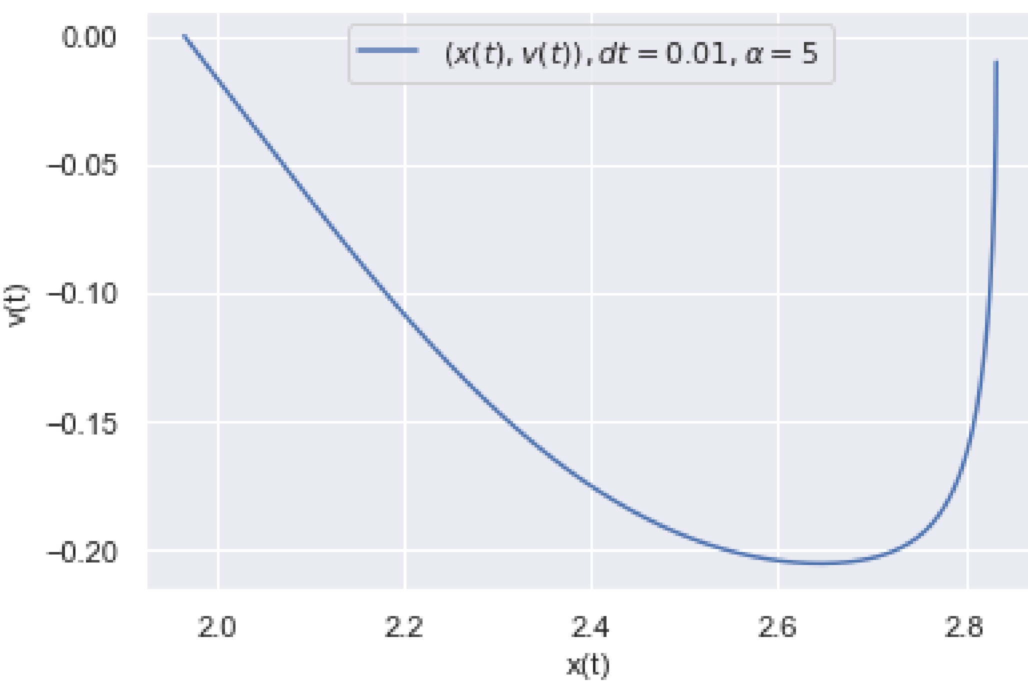
Wykres $E_k(t)$



Wykres $V(t)$

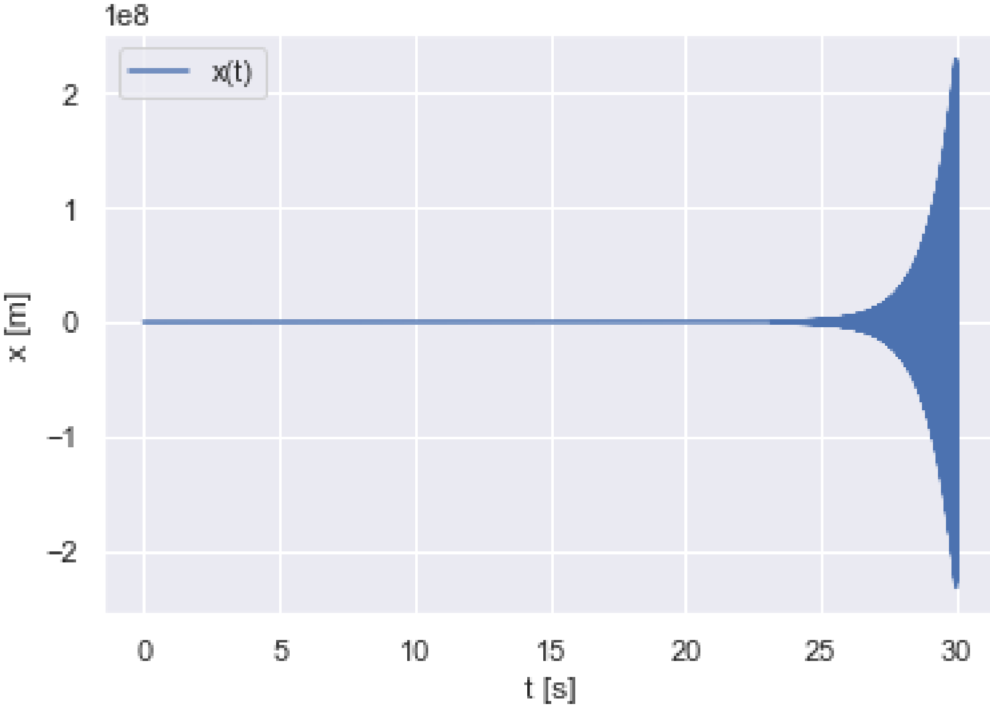


Wykres energii całkowitej $E = E_k(t) + V(x(t))$

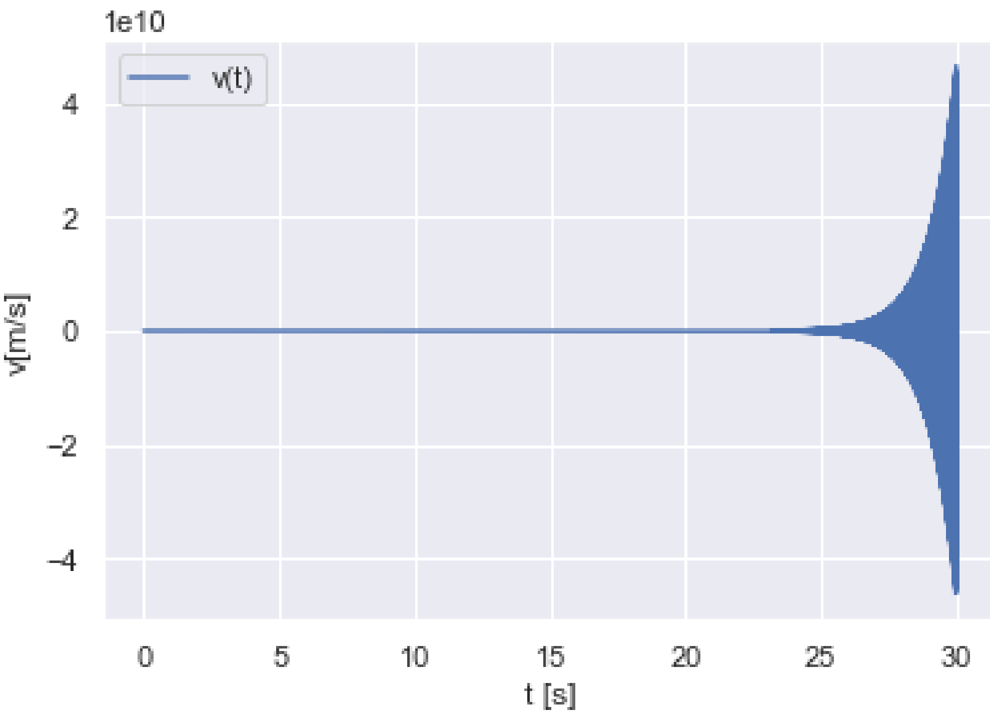


Portret fazowy (x(t),v(t)) dla α=5 i Δt=0.01

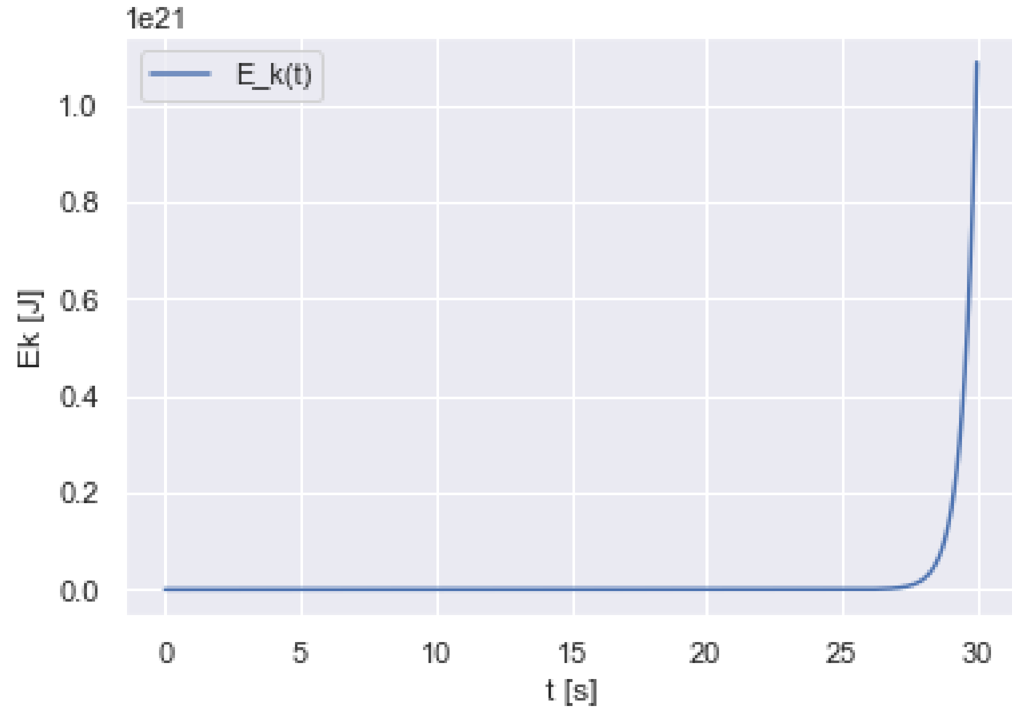
3.2 α=201, Δt=0.01



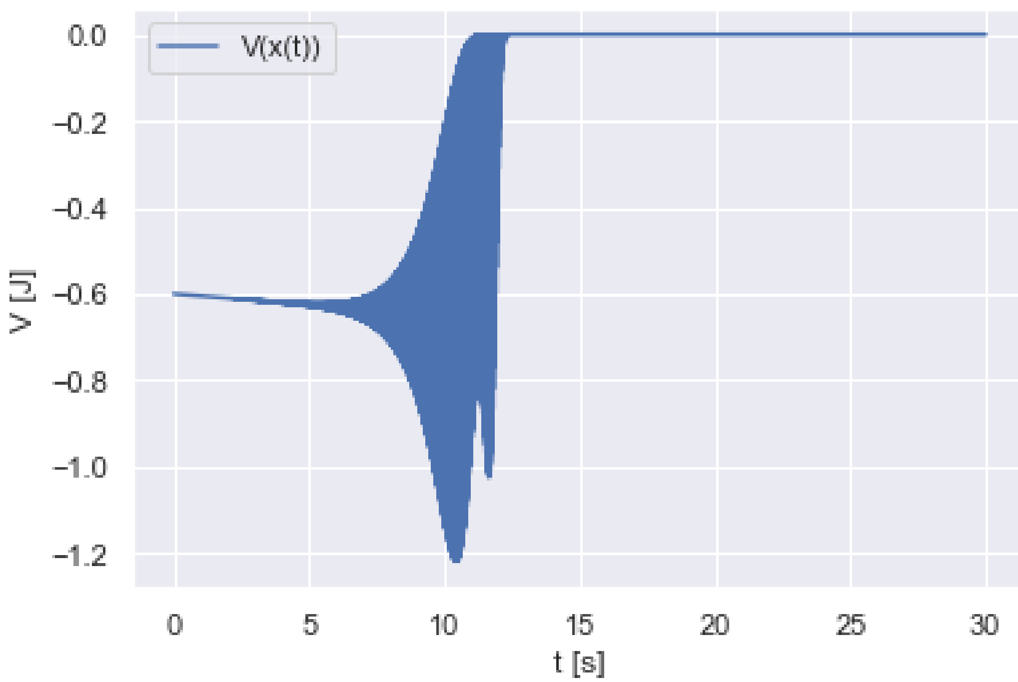
Wykres x(t)



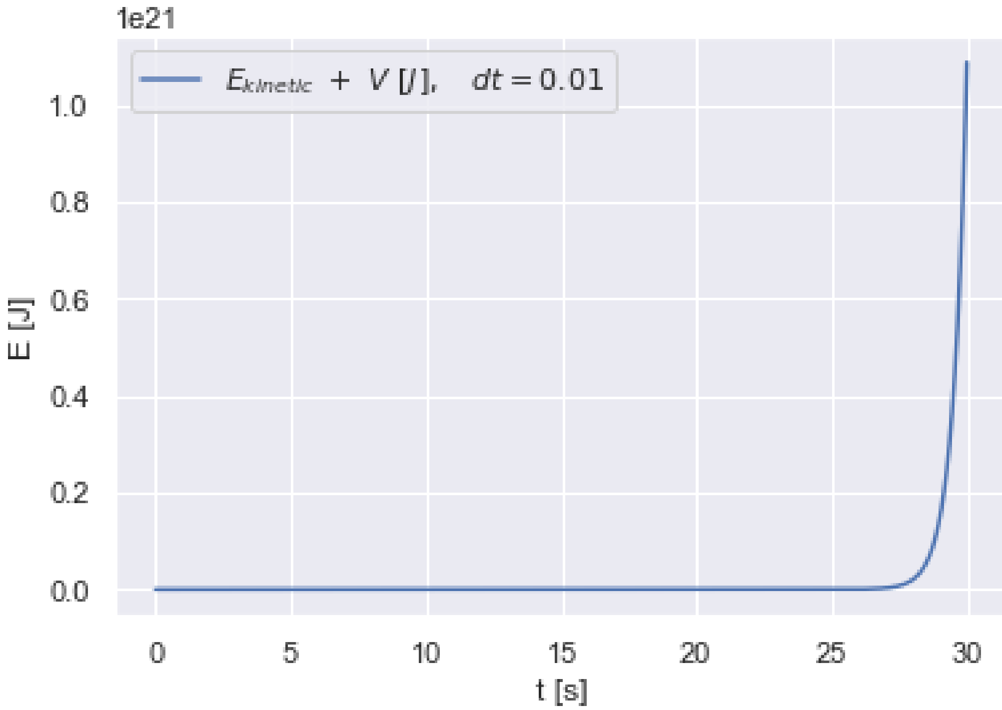
Wykres v(t)



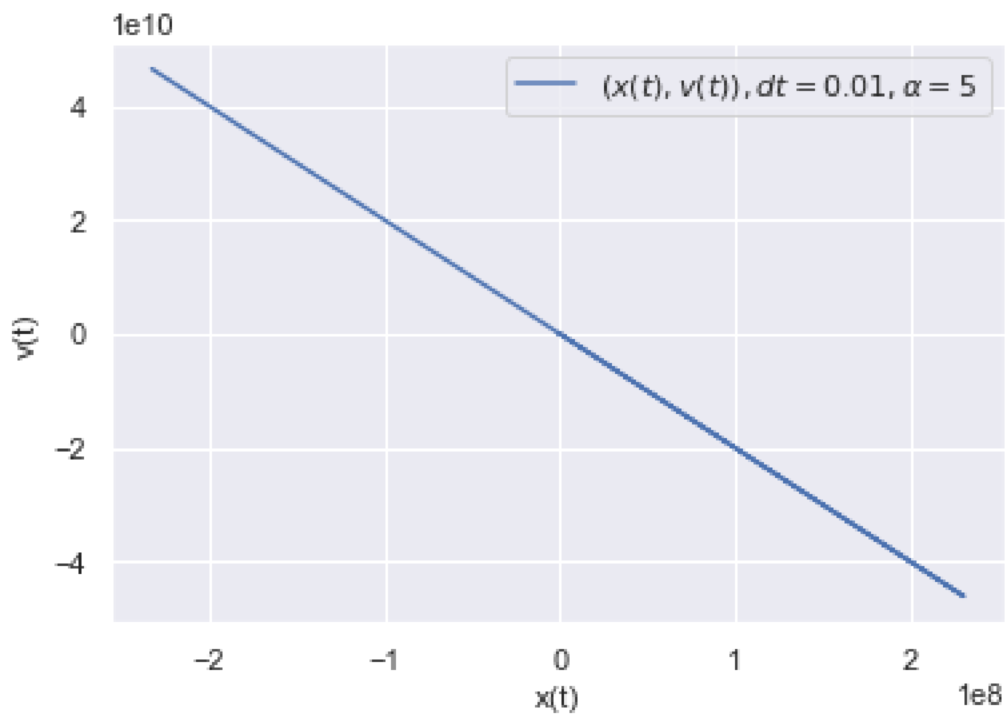
Wykres $E_k(t)$



Wykres $V(t)$



Wykres energii całkowitej $E = E_k(t) + V(x(t))$



Portret fazowy (x(t),v(t)) dla α=5 i Δt=0.01

4 Zad4

Celem czwartego zadania było przedstawienie iteracja we wzorze trapezów (wykonanie kroku czasowego) i obliczanie x_{n+1} oraz v_{n+1} na podstawie średniej arytmetycznej z chwili n i n+1:

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + \frac{\Delta t}{2}(v_{n+1} + v_n) \\
v_{n+1} &= v_n + \frac{\Delta T}{2}(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} - \alpha v_n)
\end{aligned} \tag{6}
$$

Ze względu na obecność prędkości z chwili n+1 po prawej stronie równania, wykonanie kroku czasowego wymagało rozwiązania układu równań nieliniowych $F_1 = 0$ oraz $F_2 = 0$:

$$
\begin{aligned}
F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) &= x_{n+1} - x_n - \frac{\Delta t}{2} v_{n+1} - \frac{\Delta t}{2} v_n \\
F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) &= v_{n+1 -} v_n + \frac{\Delta t}{2}(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1}) - \frac{\Delta t}{2}(\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} - \alpha v_n)
\end{aligned} \tag{7}
$$

x_{n+1} oraz v_{n+1} wyznaczono metodą iteracyjną. Przepis metody Newtona po przekształceniach ma postać:

$$
\begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta t}{2} \\ \frac{\Delta t}{2m}\frac{d^2V}{dx^2}|_{{}^{\mu}_{n+1}} & 1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x^{\mu+1}_{n+1} - x^{\mu}_{n+1} \\ v^{\mu+1}_{n+1} - v^{\mu}_{n+1} \end{pmatrix}
= - \begin{pmatrix} F_1(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \\ F_2(x^{\mu}_{n+1}, v^{\mu}_{n+1}) \end{pmatrix} \tag{8}
$$

Poniżej przedstawiono realizację tych obliczeń oraz udokumentowano zbieżność dla pierwszego kroku czasowego.

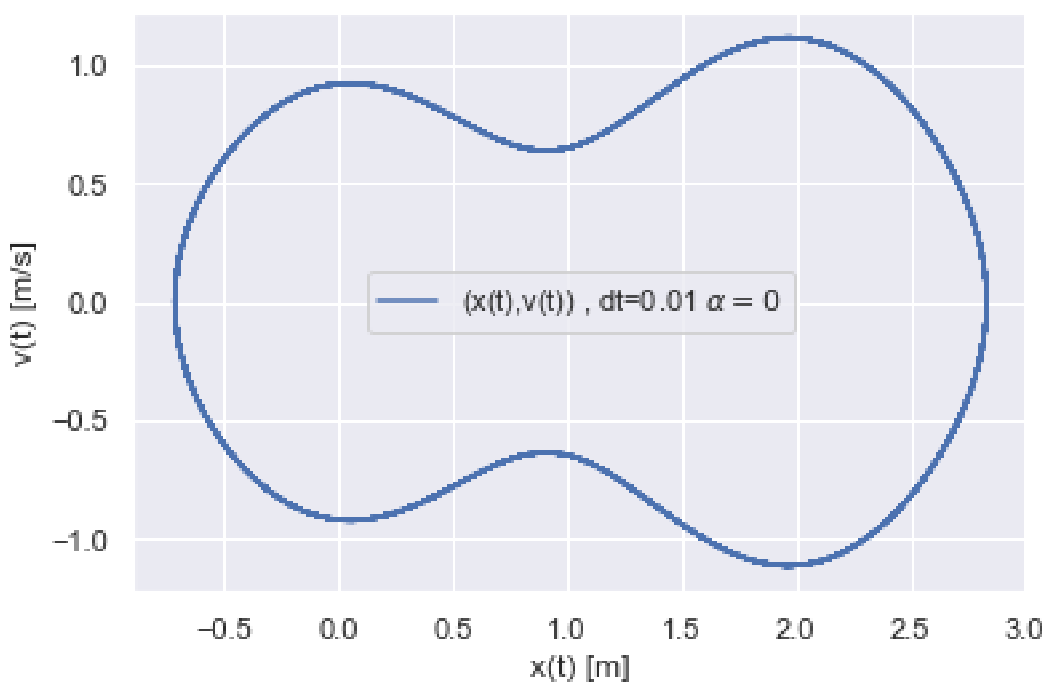
[11]:
```
def f1(x0,v0,x,v,a,dt):
    return x-x0-dt*v/2-dt*v0/2

def f2(x0,v0,x,v,a,dt):
    V1=diff(fun,x,1e-5)
    V0=diff(fun,x0,1e-5)

    return v-v0-(dt/2)*(-V1/m-a*v)-(dt/2)*(-V0/m-a*v0)

def fun_diff2(f,x,dx=1e-5):
    return (f(x+dx)-2*f(x)+f(x-dx))/(dx**2)

for i in range(5):

    A=np.array([[ 1 , -dt/2 ],[ dt*fun_diff2(fun,x)/(2*m) , 1+dt*a/2 ]])
    B=-np.array([f1(x0,v0,x,v,a,dt),f2(x0,v0,x,v,a,dt)])
    C=np.linalg.solve(A,B)
    x=x+C[0]
    v=v+C[1]

    print("i={}:  x={}     v={}     ".format(i,x,v))
```

```
i=0:  x=2.8328299610132976     v=-0.010007797340398762
i=1:  x=2.832829961013397     v=-0.010007797320576758
i=2:  x=2.832829961013397     v=-0.010007797320576994
i=3:  x=2.832829961013397     v=-0.010007797320576994
i=4:  x=2.832829961013397     v=-0.010007797320576994
```

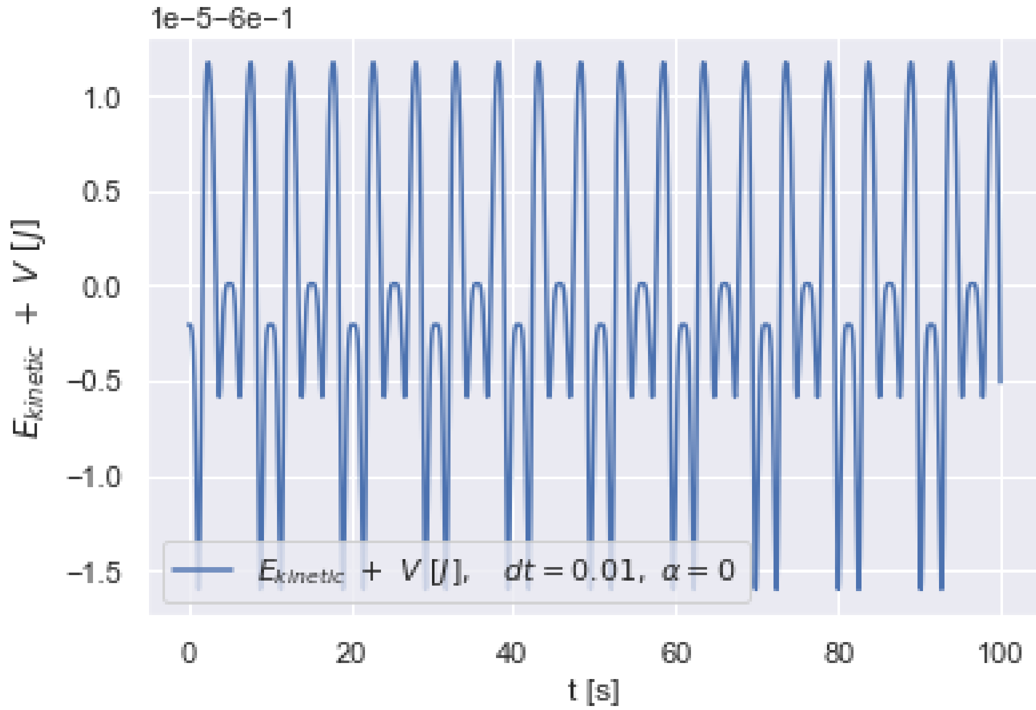
5 Zad5

W ostatnim zadaniu dokonano całkowania równań ruchu metodą trapezów. Skorzystano z formuły z poprzedniego zadania a następnie obliczono dla t∈(0,100)s energię całkowią oraz portret fazowy dla α=0 i Δt=0.01s oraz Δt=0.1

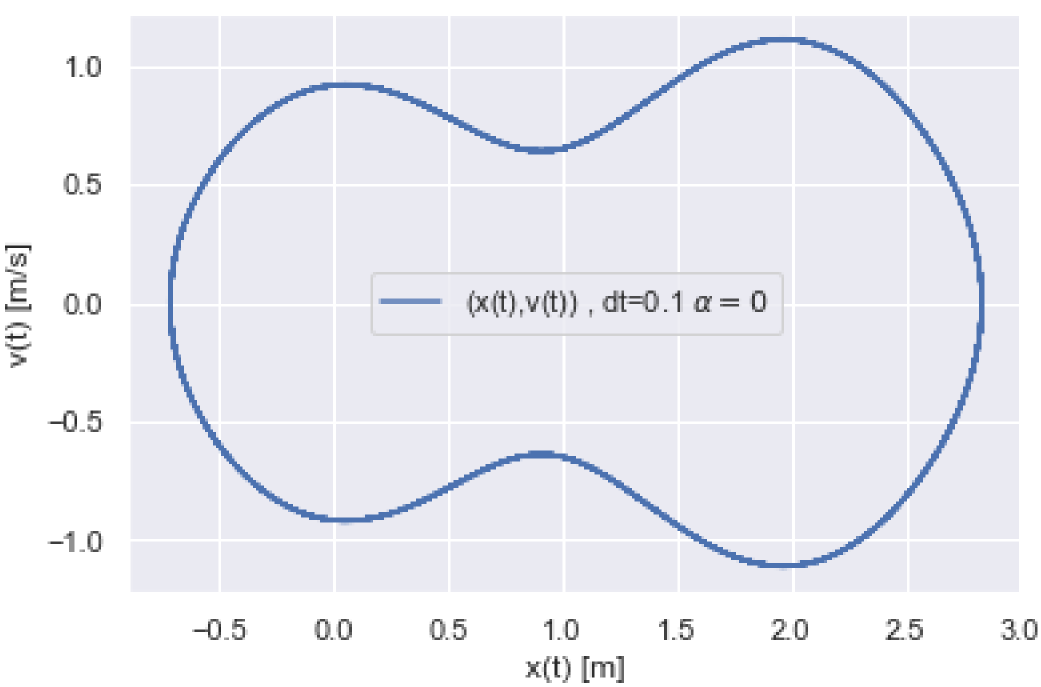
[32]:
```
def trapezy(x0,v0,dt,a,t):
    x_tab=[]
    v_tab=[]
    E_tab=[]

    x=x0
    v=v0

    for i in t:
        for i in range(5):

            A=np.array([[ 1 , -dt/2 ],[ dt/(2*m)*fun_diff2(fun,x_t(x,v,dt)) , 1+dt*a/2 ]])
            B=-np.array([f1(x0,v0,x,v,a,dt),f2(x0,v0,x,v,a,dt)])
            C=np.linalg.solve(A,B)
            x=x+C[0]
            v=v+C[1]

        x0=x
        v0=v

        x_tab.append(x)
        v_tab.append(v)
        E_tab.append(fun_Ek(v)+fun_potential(x))

    return x_tab,v_tab,E_tab
```



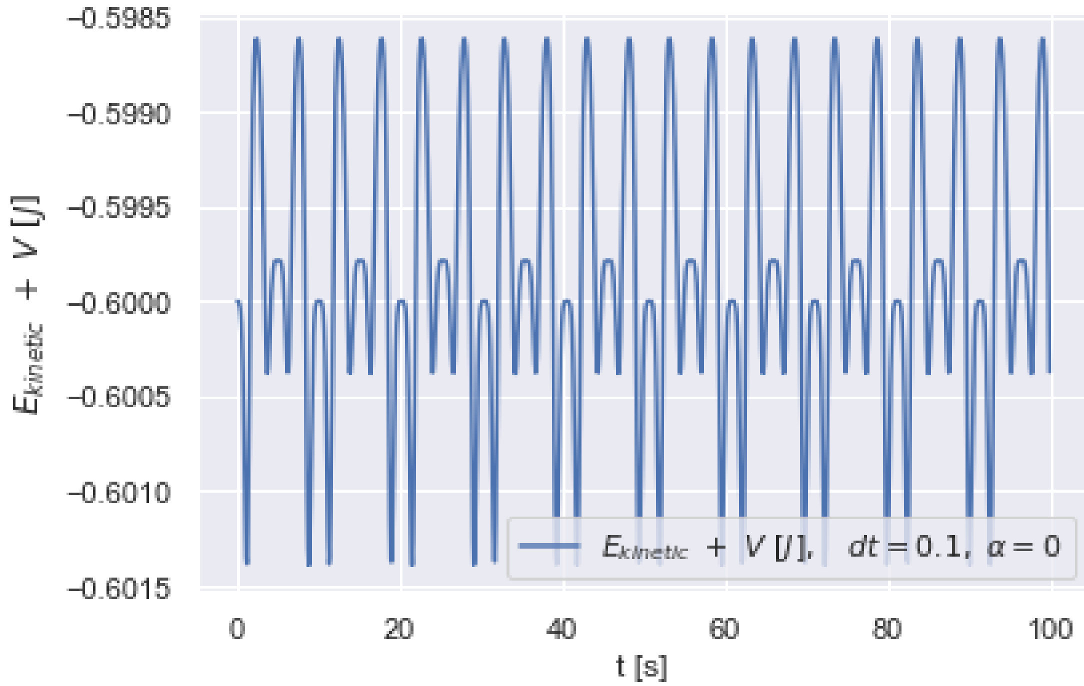
Portret fazowy dla Δt=0.01s i α=0



Energia Całkowita dla Δt=0.01s i α=0

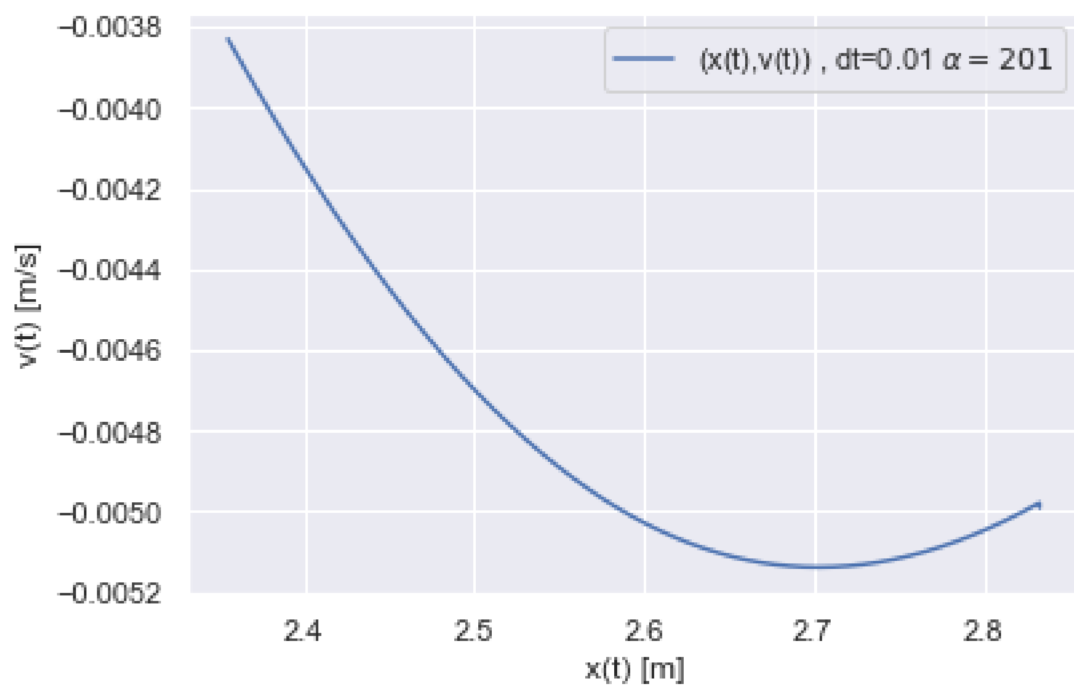


Portret fazowy dla Δt=0.1s i α=0



Energia Całkowita dla Δt=0.1s i α=0

Na końcu pokazano portret fazowy dla równań z oporem ruchu (α=201)



Portret fazowy dla Δt=0.1s i α=201