Dynamika punktu materialnego

B. Szafran, A. Mreńca-Kolasińska

4 marca 2025

Zastosujemy metody całkowania układu równań pierwszego rzędu, z tego jedną dedykowaną wyłącznie do dynamiki Newtona (Schemat Verleta). Nauczymy się stosować algorytm doboru kroku czasowego do oczekiwanej dokładności. Nauczymy się rozwiązywać układ równań nieliniowych. Zobaczymy, że niekiedy korzystne jest stosowanie schematów niejawnych (sch. trapezów).

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

$$\phi(x) = -\exp(-x^2/l_1^2) - 8\exp(-(x-2)^2/l_2^2)[J], \tag{1}$$

gdzie $l_1 = 1$ m, $l_2 = 1/\sqrt{8}$ m. W chwili początkowej ciało znajduje się w spoczynku $v = 0$ w punkcie $x = 2.8$m Ruch opisuje para równań pierwszego rzędu:
(1) Definicja prędkości:

$$\frac{dx}{dt} \equiv v \tag{2}$$

(2) II zasada Newtona:

$$\frac{dv}{dt} = a \tag{3}$$

Oznaczamy $x_n \equiv x(n\Delta t)$, $v_n \equiv v(n\Delta t)$,$a_n \equiv a(n\Delta t)$. Będziemy całkować równania przy pomocy kilku schematów:

(1) Jawny schemat Eulera

$$x_{n+1} = x_n + v_n\Delta t \tag{4}$$

$$v_{n+1} = v_n + a_n\Delta t \tag{5}$$

gdzie pochodna z V obliczymy przy pomocy np. centralnego ilorazu różnicowego. Przy siłach wyłącznie potencjalnych $a_n = -\frac{1}{m}\frac{d\phi}{dx}|_{x_n}$.

$$\frac{d\phi}{dx}|_{x_n} = \frac{\phi(x_n+\Delta x) - \phi(x_n-\Delta x)}{2\Delta x} \tag{6}$$

z np. $\Delta x = 0.001$.

Rząd dokładności metody: pierwszy.

(2) Schemat prędkościowy Verleta

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n \Delta t^2 \tag{7}$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2}(a_n + a_{n+1}) \tag{8}$$

Rząd dokładności: drugi (dla położenia).

(3) Schemat RK4

Dla równania: $\frac{du}{dt} = f(u)$ liczymy cztery tzw. predyktory wartości prawej strony w wybranych chwilach czasowych między t a $t + \Delta t$

$k_1 = f(u_n)$, następnie kolejno

$k_2 = f(u_n + \frac{\Delta t}{2} k_1)$

$k_3 = f(u_n + \frac{\Delta t}{2} k_2)$

$k_4 = f(u_n + \Delta t k_3)$,

na podstawie, których ustalamy wynik w kolejnej chwili czasowej

$u_{n+1} = u_n + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$

RK4 można zastosować do układu równań, w tym do naszego problemu:

$k_1^1 = v_n$; $k_1^2 = a(x_n, v_n)$,

$k_2^1 = v_n + \frac{\Delta t}{2} k_1^2$; $k_2^2 = a(x_n + \frac{\Delta t}{2} k_1^1, v_n + \frac{\Delta t}{2} k_1^2)$

$k_3^1 = v_n + \frac{\Delta t}{2} k_2^2$; $k_3^2 = a(x_n + \frac{\Delta t}{2} k_2^1, v_n + \frac{\Delta t}{2} k_2^2)$

$k_4^1 = v_n + \Delta t k_3^2$; $k_4^2 = a(x_n + \Delta t k_3^1, v_n + \Delta t k_3^2)$

$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{6}(k_1^1 + 2k_2^1 + 2k_3^1 + k_4^1)$

$v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{6}(k_1^2 + 2k_2^2 + 2k_3^2 + k_4^2)$

Rząd dokładności metody: czwarty.

zadanie 1. Całkowanie równań ruchu (25 pkt). Interesują nas zależności $x(t)$, $v(t)$, portret fazowy $v(x)$ zachowanie energii całkowitej w funkcji czasu do $t = 100$. Scałkować równania trzema podanymi wyżej schematami. Jak zachowują się metody w zależności od Δt.

Zbadać tempo zbieżności metod. Skupmy uwagę na chwili czasowej $t = 10$. W jakim tempie, zmniejszając Δt, wyniki dążą do granicy $\Delta t \to 0$?

W sprawozdaniu: wnioski poparte wynikami rachunków.

Kontrola kroku czasowego

Idea: Ustalamy tolerowany błąd tol. Porównujemy wyniki pojedynczego kroku $2\Delta t$ z dwoma krokami Δt. Oznaczenia: $W(\Delta t)$ - przepis metody różnicowej dla kroku Δt, u – wynik różnicowy dla kroku $2\Delta t$, u' - wynik różnicowy dla kroku Δt

Liczymy:

1. rachunek z krokiem $2\Delta t$: $u_{k+2} = u_k + W(2\Delta t)$,
2. rachunek z krokiem Δt: 2 kroki aby dojść do chwili $t + 2\Delta t$
3. pierwszy krok $u'_{k+1} = u_k + W(\Delta t)$
4. drugi krok $u'_{k+2} = u'_{k+1} + W(\Delta t)$
5. u' jest bliższe dokładnemu. oszacowanie błędu: $\epsilon = |\frac{u'_{k+2} - u_{k+2}}{2^d - 1}|$ (d to rząd dokładności stosowanej metody). Szacujemy błędy na położenie i prędkość. Za ϵ bierzemy większy z błędów na położenie i prędkość.
6. jeśli $\epsilon \leqslant \mathrm{tol}$ akceptujemy krok, przyjmujemy wyliczone wartości u'_{k+2} dla chwili $t = t + 2\Delta t$. Jeśli natomiast $\epsilon > \mathrm{tol}$, wyliczone u'_{k+2} zapominamy, zostajemy w chwili t i podejmujemy ponownie próbę wyznaczenia akceptowalnych wartości.
7. Niezależnie od tego co stało się w punkcie 6 (czy zaakceptowaliśmy wyliczone wartości u' czy nie) zmieniamy krok czasowy: $\Delta t(nowy) = c\Delta t \left(\frac{\mathrm{tol}}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{d+1}}$, z parametrem bezpieczeństwa c, np. $c = 0.9$
8. wracamy do punktu 1, chyba że rachunek objął cały interesujący nas czas.

zadanie 2. całkowanie równań ruchu ze zmiennym krokiem czasowym (25 pkt). Wprowadzić kontrolowany krok czasowy do wyżej zastosowanych metod. Porównać wyniki trzech metod dla wybranej tolerancji położenia. Porównać kroki czasowe dobrane przez algorytm przy tej samej tolerancji błędu dla trzech metod całkowania równań Newtona. Jaką liczbę kroków wykonują te 3 metody aby dotrzeć do chwili czasowej 100? W sprawozdaniu: wnioski udokumentowane wynikami rachunków.

Dodajemy **opory ruchu** do wyrażenia na przyspieszenie:
$a = \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{d\phi}{dx} - \alpha v$, z parametrem tłumienia $\alpha > 0$.

zadanie 3. (25 pkt). Opisać ruch wg wielkości z zadania 1 z metodą z zadania 2. Pominąć schemat Verleta. Interesują nas wartości $\alpha = 0.5, 5$.

Całkowanie równań ruchu wzorem trapezów

We wzorze trapezów prawa strona każdego z równań na położenie i prędkość brana jest na podstawie średniej arytmetycznej z chwil n oraz $n + 1$

- $x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{2}(v_{n+1} + v_n)$

- $v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1} - \frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} - \alpha v_n\right)$

Ze względu na obecność położenia i prędkości w chwili $n+1$ po prawej stronie schematów wykonanie kroku czasowego wymaga rozwiązania układu równań nieliniowych $F_1 = 0$ oraz $F_2 = 0$ dla $F_{1,2}$ zdefiniowanych jako

- $F_1(x_{n+1}, v_{n+1}) = x_{n+1} - x_n - \frac{\Delta t}{2}v_{n+1} - \frac{\Delta t}{2}v_n$
- $F_2(x_{n+1}, v_{n+1}) = v_{n+1} - v_n - \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_{n+1}} - \alpha v_{n+1}\right) - \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{1}{m}\frac{dV}{dx}|_{x_n} - \alpha v_n\right)$

Miejsce zerowe, układu, czyli wartości x_{n+1} oraz v_{n+1} wyznaczymy iteracyjną metodą Newtona. x^μ_{n+1} oraz v^μ_{n+1} oznaczają wartości uzyskane w μ-tej iteracji. Przy tych oznaczeniach przepis metody Newtona dla układu równań ma postać:

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial F_1}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_1}{\partial v_{n+1}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_{n+1}} & \frac{\partial F_2}{\partial v_{n+1}} \end{array}\right)_{|x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}} \left(\begin{array}{c} (\Delta x)^\mu \\ (\Delta v)^\mu \end{array}\right) = -\left(\begin{array}{c} F_1(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \\ F_2(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \end{array}\right), \tag{9}$$

która przy naszym układzie równań redukuje się do

$$\left(\begin{array}{cc} 1 & -\frac{\Delta t}{2} \\ \frac{\Delta t}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2}|_{x^\mu_{n+1}} & 1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} (\Delta x)^\mu \\ (\Delta v)^\mu \end{array}\right) = -\left(\begin{array}{c} F_1(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \\ F_2(x^\mu_{n+1}, v^\mu_{n+1}) \end{array}\right) \tag{10}$$

i z której wyliczamy $x^{\mu+1}_{n+1}$ i $v^{\mu+1}_{n+1}$ w kolejnej iteracji jako:

- $x^{\mu+1}_{n+1} = x^\mu_{n+1} + (\Delta x)^\mu$
- $v^{\mu+1}_{n+1} = v^\mu_{n+1} + (\Delta v)^\mu$

przy czym przyjmujemy $x^{\mu=0}_{n+1} = x_n,\ v^{\mu=0}_{n+1} = v_n$. Iterujemy aż wartości się zbiegną. Drugą pochodną potencjału możemy wyliczyć w sposób przybliżony korzystając z ilorazu różnicowego $\frac{d^2\phi}{dx^2}|_{x_n} = \frac{\phi(x_n+\Delta x) - 2\phi(x_n) + \phi(x_n+\Delta x)}{\Delta x^2}$.

zadanie 4. Całkowanie równań ruchu metodą trapezów (25 pkt). Powtórzyć zadanie 3 metodą trapezów.

W sprawozdaniu: udokumentowane Wnioski.