xPhO Physics Club

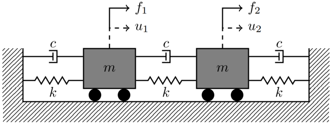
Phương pháp số trong mô phỏng

Người trình bày: Nguyễn Phúc Việt Khoa

Biên soạn: Nguyễn Phúc Việt Khoa, Nguyễn Việt Cường, Nguyễn Thành Long

Mục lục

Biểu diễn bài toán dao động dưới dạng ma trận



Hình: 2 dofs system

Phương trình động lực học:

$$\begin{cases} m\ddot{u}_1 + 2c\dot{u}_1 - c\dot{u}_2 + 2ku_1 - ku_2 = f_1 \\ m\ddot{u}_2 + 2c\dot{u}_2 - c\dot{u}_1 + 2ku_2 - ku_1 = f_2 \end{cases} \tag{1}$$

Biểu diễn dưới dạng ma trận:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}} \underbrace{\begin{bmatrix} \ddot{u}_1 \\ \ddot{u}_2 \end{bmatrix}}_{\ddot{\mathbf{u}}} + \underbrace{\begin{bmatrix} 2c & -c \\ -c & 2c \end{bmatrix}}_{\mathbf{C}} \underbrace{\begin{bmatrix} \dot{u}_1 \\ \dot{u}_2 \end{bmatrix}}_{\dot{\mathbf{u}}} + \underbrace{\begin{bmatrix} 2k & -k \\ -k & 2k \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}} \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}} = \underbrace{\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{f}} \tag{2}$$

PT tổng quát:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f} \tag{3}$$

Mục lục

Các bậc tự do dao động với cùng sự phụ thuộc theo thời gian nên chúng ta có:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \mathbf{X}cos(\Omega t) \tag{4}$$

Thay vào 3 ta có:

$$(\mathbf{K} - \Omega^2 \mathbf{M})\mathbf{X} = 0 \tag{5}$$

Ta đưa về bài toán tìm trị riêng và vector riêng của ma trận. PT có nghiệm khác 0 khi:

$$det(\mathbf{K} - \Omega^2 \mathbf{M}) = 0 \tag{6}$$

Dao động tự do - Không cản (c = 0, f1=f2=0)

Ta tìm được 2 giá trị của tần số riêng:

$$\Omega^2 = \Omega_1^2 = \frac{k}{m} \quad \text{và} \quad \Omega^2 = \Omega_2^2 = \frac{3k}{m} \tag{7}$$

Vector riêng của hệ là:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{và} \quad \mathbf{X} = \mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{8}$$

Nghiệm tổng quát của hệ là:

$$\mathbf{u} = \underbrace{\left(A_1 \cos\left(\Omega_1 t\right) + B_1 \sin\left(\Omega_1 t\right)\right) \mathbf{X}_1}_{\text{Mode 1}} + \underbrace{\left(A_2 \cos\left(\Omega_2 t\right) + B_2 \sin\left(\Omega_2 t\right)\right) \mathbf{X}_2}_{\text{Mode 2}} \tag{9}$$

Mục lục

Xét trường hợp $f_1 = F_1 \cos(\omega t)$ và $f_2 = F_2 \cos(\omega t)$.

Đặt $\mathbf{f} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \end{bmatrix} \cos(\omega t) = \mathbf{F} \cos(\omega t)$ va $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} \cos(\omega t) = \mathbf{U} \cos(\omega t)$.

Thay vào phương trình (3) ta có:

$$\mathbf{U} = (-\omega^2 \mathbf{M} + \mathbf{K})^{-1} \mathbf{F}. \tag{10}$$

Từ đó ta tính được U_1 và U_2:

$$U_1 = \frac{F_1(2k - m\omega^2) + F_2 k}{(k - m\omega^2)(3k - m\omega^2)} \quad \text{và} \quad U_2 = \frac{F_1 k + F_2(2k - m\omega^2)}{(k - m\omega^2)(3k - m\omega^2)} \tag{11}$$

Biểu diễn PT dưới dạng số phức. Đặt $\mathbf{f} = \mathbf{F}e^{j\omega t}$ va $\mathbf{u} = \mathbf{U}e^{j\omega t}$, từ đó tính được:

$$\mathbf{U} = \left(-\omega^2\mathbf{M} + j\omega\mathbf{C} + \mathbf{K}\right)^{-1}\mathbf{F} \tag{12}$$

Ta có:

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{(2F_1 + F_2)\,k - F_1 m\omega^2 + jc\,(2F_1 + F_2)\,\omega}{(jc\omega + k - m\omega^2)\,(3jc\omega + 3k - m\omega^2)} \\ U_2 &= \frac{(F_1 + 2F_2)\,k - F_2 m\omega^2 + jc\,(F_1 + 2F_2)\,\omega}{(jc\omega + k - m\omega^2)\,(3jc\omega + 3k - m\omega^2)} \end{aligned} \tag{13}$$

Biên độ của U_1 và U_2:

$$\begin{aligned}
|U_1| &= \frac{\sqrt{(2cF_1\omega + cF_2\omega)^2 + (2F_1k + F_2k - F_1m\omega^2)^2}}{\sqrt{c^2\omega^2 + (k - m\omega^2)^2}\sqrt{9c^2\omega^2 + (m\omega^2 - 3k)^2}} \\
|U_2| &= \frac{\sqrt{(cF_1\omega + 2cF_2\omega)^2 + (F_1k + 2F_2k - F_2m\omega^2)^2}}{\sqrt{c^2\omega^2 + (k - m\omega^2)^2}\sqrt{9c^2\omega^2 + (m\omega^2 - 3k)^2}}
\end{aligned} \tag{14}$$

Mục lục

Miền tích phân thời gian sẽ được rời rạc hóa thành các bước thời gian:
$t_0, t_1, t_2, t_3, t_4, \ldots, t_n$ với $\Delta t = (t_n - t_0)/n$
Phương pháp Runge-Kutta được sử dụng để giải phương trình đạo hàm bậc nhất :
$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i \mathbf{k}_i \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n), \\
\mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_n + c_2 h, \mathbf{u}_n + h(a_{21}\mathbf{k}_1)), \\
\mathbf{k}_3 &= \mathbf{f}(t_n + c_3 h, \mathbf{u}_n + h(a_{31}\mathbf{k}_1 + a_{32}\mathbf{k}_2)), \\
&\vdots \\
\mathbf{k}_s &= \mathbf{f}(t_n + c_s h, \mathbf{u}_n + h(a_{s1}\mathbf{k}_1 + a_{s2}\mathbf{k}_2 + \cdots + a_{s,s-1}\mathbf{k}_{s-1})).
\end{aligned} \tag{16}$$

Phương pháp Runge-Kutta

Ma trận Butcher

$$
\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
c_2 & a_{21} & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_s &
\end{array}
\tag{17}
$$

Runge-Kutta bậc 2

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
1/2 & 1/2 & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}
$$

Runge-Kutta bậc 4 (RK4)

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
1/2 & 1/2 & & & \\
1/2 & 0 & 1/2 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6
\end{array}
$$

Runge-Kutta 3/8

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
1/3 & 1/3 & & & \\
2/3 & -1/3 & 1 & & \\
1 & 1 & -1 & 1 & \\
\hline
 & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8
\end{array}
$$

Áp dụng:
PT 3 là 1 phương trình đạo hàm bậc 2. Để sử dụng thuật toán Runge-Kutta, chúng ta cần thực hiện đổi biến để đưa PT 3 về đạo hàm bậc nhất.
Đặt $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}$ và $\mathbf{u}_2 = \dot{\mathbf{u}}$. Ta có: $\dot{\mathbf{u}}_1 = \dot{\mathbf{u}}$ va $\dot{\mathbf{u}}_2 = \ddot{\mathbf{u}}$.

$$\begin{aligned}
&\begin{cases} \dot{\mathbf{u}}_1 &= \mathbf{u}_2 \\ \dot{\mathbf{u}}_2 &= \mathbf{M}^{-1}\left(-\mathbf{K}\mathbf{u}_1 - \mathbf{C}\mathbf{u}_2 + \mathbf{f}\right) \end{cases} \\
\Rightarrow &\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}}_1 \\ \dot{\mathbf{u}}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K} & -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{O} \\ \mathbf{M}^{-1}\mathbf{f} \end{bmatrix} \\
\Leftrightarrow &\dot{\mathbf{U}} = \mathbf{A}\mathbf{U} + \mathbf{B}
\end{aligned} \tag{18}$$

Trên python, phương pháp RK4 có sẵn trong thư viện **scipy.integrate**. Để sử dụng chúng ta dùng hàm **odeint**

Phương pháp Newmark xấp xỉ các đạo hàm bậc nhất và bậc hai như sau:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{u}}_{n+1} &\approx \dot{\mathbf{u}}_n + (1-\gamma)\Delta t\ddot{\mathbf{u}}_n + \gamma\Delta t\ddot{\mathbf{u}}_{n+1}\\ \mathbf{u}_{n+1} &\approx \mathbf{u}_n + \Delta t\dot{\mathbf{u}}_n + (1/2-\beta)\,(\Delta t)^2\ddot{\mathbf{u}}_n + \beta(\Delta t)^2\ddot{\mathbf{u}}_{n+1}\end{aligned} \tag{19}$$

(γ, β) là các tham số Newmark. Một vài giá trị thường được sử dụng là $(1/2, 1/4)$, $(1/2, 1/6)$, $(1/2, 0)$.
Thay các xấp xỉ 19 vào PT 3:

$$\begin{aligned}\ddot{\mathbf{u}}_{n+1} = \mathbf{S}^{-1}\Big[\mathbf{f}_{n+1} - \Big[\mathbf{C}\left(\dot{\mathbf{u}}_n\right.&\left.+(1-\gamma)\Delta t\ddot{\mathbf{u}}_n\right)\\ &-\mathbf{K}\left(\mathbf{u}_n + \Delta t\dot{\mathbf{u}}_n + (1/2-\beta)\,(\Delta t)^2\ddot{\mathbf{u}}_n\right)\Big]\end{aligned} \tag{20}$$

Với $\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{C}\gamma\Delta t + \mathbf{K}\beta(\Delta t)^2$.

Áp dụng:

- Xác định Δt, các tham số Newmark (γ, β) và ma trận $\mathbf{S}$,
- Tại t_0, xác định vector $\mathbf{f}_0 = \mathbf{f}(t_0)$ và các điều kiện ban đầu của hệ ($\mathbf{u}_0$ va $\dot{\mathbf{u}}_0$),
- Tinh $\ddot{\mathbf{u}}_0$ theo công thức $\ddot{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{M}^{-1}\left(\mathbf{f}_0 - \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}}_0 - \mathbf{K}\mathbf{u}_0\right)$,
- Với mỗi $t_0, t_1, t_2, \ldots, t_n$. Xác định $\mathbf{f}_{n+1}$ và tính $\ddot{\mathbf{u}}_{n+1}$ va $\mathbf{u}_{n+1}, \dot{\mathbf{u}}_{n+1}$ theo các công thức Newmark.

Mục lục

Ví dụ

PT Poisson:

$$
\begin{aligned}
-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= x \quad x \in (0,1) \\
u(0) &= 2 \quad \text{(điều kiện biên Dirichlet)} \\
\frac{\partial u}{\partial x}(1) &= 1 \quad \text{(điều kiện biên Neumann)}
\end{aligned}
\tag{21}
$$

Nghiệm chính xác của nó là:

$$
u(x) = \frac{-x^3 + 9x + 12}{6} \tag{22}
$$

Ta sẽ áp dụng các phương pháp số để giải phương trình đó và so sánh với nghiệm chính xác của nó.

Dạng mạnh chính là dạng biểu diễn của phương trình vi phân. Nghiệm của phương trình thỏa mãn với mọi điểm trong miền xác định.

$$
\begin{aligned}
-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= x \quad x \in (0,1) \\
u(0) &= 2 \quad \text{(điều kiện biên Dirichlet)} \\
\frac{\partial u}{\partial x}(1) &= 1 \quad \text{(điều kiện biên Neumann)}
\end{aligned}
\tag{23}
$$

Được biểu diễn dưới dạng tích phân của tích phương trình dạng mạnh với một hàm thử trên miền xác định.
PP Ritz-Galerkin: xấp xỉ nghiệm u của PT Poisson bằng 1 nghiệm u^h.

$$R_\Omega = -\frac{\partial^2 u^h}{\partial x^2} - x \neq 0 \quad x \in (0,1) \text{ va } R_{\partial\Omega} = \frac{\partial u^h}{\partial x}(1) - 1 \neq 0 \tag{24}$$

Gọi v là hàm thử:

$$\int_0^1 v R_\Omega dx + v(1) R_{\partial\Omega} = 0 \Rightarrow \int_0^1 v\left(-\frac{\partial^2 u^h}{\partial x^2} - x\right) dx + v(1)\left(\frac{\partial u^h}{\partial x}(1) - 1\right) = 0 \tag{25}$$

$$\Rightarrow \int_0^1 \frac{\partial u^h}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x} dx - v(1) - \int_0^1 v x dx = 0 \tag{26}$$

Mục lục

Phương pháp số - Phương pháp sai phân hữu hạn

Phương pháp sai phân hữu hạn giải trực tiếp PT dạng mạnh
Chuỗi Taylor:

$$\begin{aligned}
f(x+h) &= f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{4!}h^4 + \ldots \\
f(x-h) &= f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_2)}{4!}h^4 + \ldots
\end{aligned} \tag{27}$$

Từ đây ta có các cách để xấp xỉ đạo hàm bậc nhất:

$$\begin{aligned}
f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \text{sai phân tiến} \\
f'(x) &\approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad \text{sai phân lùi} \\
f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad \text{sai phân trung tâm}
\end{aligned} \tag{28}$$

Tương tự, ta có thể xấp xỉ đạo hàm bậc 2:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \tag{29}$$

Áp dụng cho bài toán ví dụ: Giả sử ta chia miền $x \in (0,1)$ thành $N = 3$ điểm cách đều nhau. Theo công thức sai phân ta có:

$$-\frac{u_1 - 2u_2 + u_3}{h^2} = x_2 \tag{30}$$

$$\frac{u_3 - u_2}{h} = 1 \tag{31}$$

Kết hợp với điều kiện biên Dirichlet, ta có hệ phương trình:

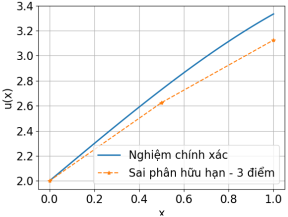
$$\begin{cases} u_1 & & & = 2 \\ u_1/h^2 & -2u_2/h^2 & +u_3/h^2 & = -x_2 \\ & -u_2/h & +u_3/h & = 1 \end{cases} \tag{32}$$

Viết dưới dạng ma trận

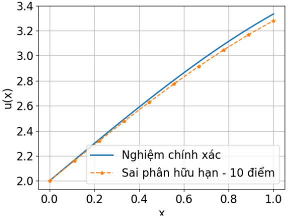
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/h^2 & -2/h^2 & 1/h^2 \\ 0 & -1/h & 1/h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ x_2 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{33}$$

Giải phương trình trên ta sẽ tính được giá trị các nút.

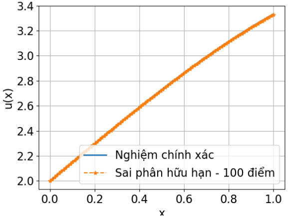
Nghiệm của PT, giải bằng phương pháp sai phân hữu hạn với $N = 3$, $N = 10$ và $N = 100$:



(a) 3 nút

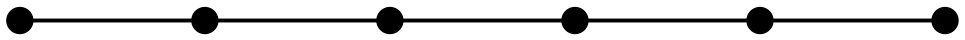


(b) 10 nút

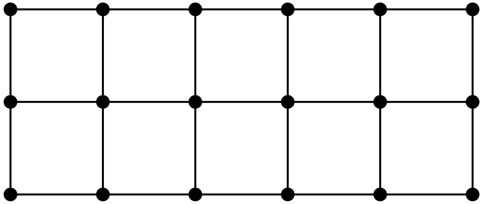


(c) 100 nút

Phương pháp phần tử hữu hạn giải trực tiếp PT dạng yếu 26
Chia miền xác định thành các miền con Ω_e không giao nhau gọi là các phần tử (chia lưới)



(a) 1D



(b) 2D

- Xấp xỉ nghiệm $u^h(x)$

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^{n} N_i(x) u_i = \underbrace{\begin{bmatrix} N_1(x) \dots N_n(x) \end{bmatrix}}_{\mathbf{N}(x)} \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}} \tag{34}$$

Hàm thử v sẽ được chọn sao cho nó có cùng hàm nội suy với nghiệm xấp xỉ u^h (nguyên lý Bubnov-Galerkin)

$$v(x) = \sum_{i=1}^{n} N_i(x) v_i = \mathbf{N}(x)\mathbf{v} \tag{35}$$

Thay các xấp xỉ này vào PT 26:

$$\underbrace{\left(\int_0^1 \left(\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x}\right)^T \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} dx\right)}_{\mathbf{K}} \mathbf{u} = \underbrace{[\mathbf{N}(1)]^T + \int_0^1 [\mathbf{N}(x)]^T x dx}_{\mathbf{F}} \tag{36}$$

Giải PT trên:

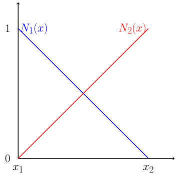
$$\Rightarrow \mathbf{u} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{F} \tag{37}$$

- Hàm nội suy $\mathbf{N}(x)$

Hàm đa thức thỏa mãn tính chất $N_i(x_i) = 1$ và $N_i(x_j) = 0$ với $j \neq i$

Xét trường hợp 1D:

$$\begin{aligned} N_1(x) &= \frac{1}{x_2 - x_1}(x_2 - x) \\ N_2(x) &= \frac{1}{x_2 - x_1}(x - x_1) \end{aligned} \tag{38}$$



Hình: Hàm nội suy 1D, tuyến tính

- Lắp ghép các phần tử

Xét với trường hợp miền xác định 1D được chia thành 2 phần tử $e1$ và $e2$. Áp dụng các phương trình trên, ta xác định được ma trận $\mathbf{K}^{e1}$, $\mathbf{K}^{e2}$ và các vector $\mathbf{F}^{e1}$, $\mathbf{F}^{e2}$ tương ứng với mỗi phần tử.

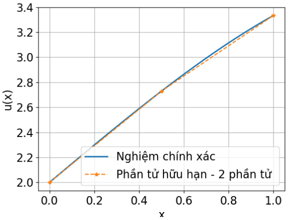
$\mathbf{u} = [u_1 \; u_2 \; u_3]^T$: vector bậc tự do của các nút.

Lưu ý rằng: $u_2 = u_2^{e1} + u_1^{e2}$. Hệ ma trận cho vector $\mathbf{u}$ được viết lại như sau

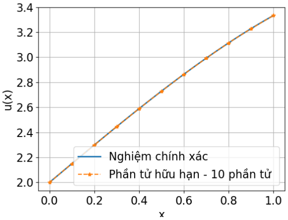
$$\begin{bmatrix} K_{11}^{e1} & K_{12}^{e1} & 0 \\ K_{21}^{e1} & K_{22}^{e1} + K_{22}^{e2} & K_{23}^{e2} \\ 0 & K_{32}^{e2} & K_{33}^{e2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} F_1^{e1} \\ F_2^{e1} + F_2^{e2} \\ F_3^{e2} \end{bmatrix} \tag{39}$$

Kết hợp với điều kiện biên Dirichlet và giải PT trên, ta thu được giá trị của $\mathbf{u}$. [1]

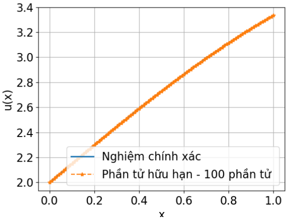
Nghiệm của PT, giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn với 2, 10 và 100 phần tử:



(a) 2 phần tử



(b) 10 phần tử



(c) 100 phần tử

Tài liệu tham khảo I

[1] G. Golub and C. Van Loan, *Matrix Computations* (Johns Hopkins Studies in the Mathematical Sciences). Johns Hopkins University Press, 2013, ISBN: 9781421407944.

[2] H. Langtangen and S. Linge, *Finite Difference Computing with PDEs: A Modern Software Approach* (Texts in Computational Science and Engineering). Springer International Publishing, 2017, ISBN: 9783319554563.

[3] O. Zienkiewicz, R. Taylor, and J. Zhu, *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Butterworth-Heinemann, 2005, ISBN: 9780080472775.

[4] A. Logg, G. N. Wells, and J. Hake, "DOLFIN: a C++/Python finite element library," in *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*, ser. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, A. Logg, K.-A. Mardal, and G. N. Wells, Eds., vol. 84, Springer, 2012, ch. 10.