xPhO Physics Club

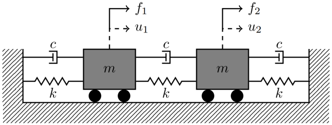
Phương pháp số trong mô phỏng

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

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

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:

$$U_1 = \frac{F_1(2k - m\omega^2) + F_2k}{(k - m\omega^2)(3k - m\omega^2)} \quad \text{và} \quad U_2 = \frac{F_1k + F_2(2k - m\omega^2)}{(k - m\omega^2)(3k - m\omega^2)} \tag{11}$$

Dao động cưỡng bức - Có giảm chấn ($c \neq 0$, $f1 \neq 0$, $f2 \neq 0$)

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:

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

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

Phương pháp Runge-Kutta

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 :
$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$

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

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

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:

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

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.

Mục lục

Phương trình vi phân - Phương trình dạng mạnh

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:

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

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

Mục lục

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

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

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:

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

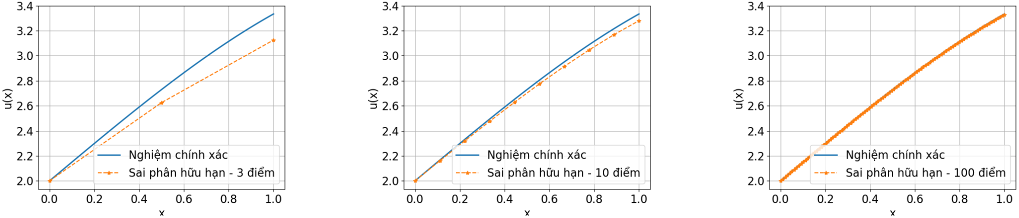
Viết dưới dạng ma trận

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

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

Phương pháp số - Phương pháp sai phân hữu hạn

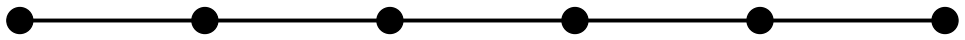
Nghiệm của PT, giải bằng phương pháp sai phân hữu hạn với $N = 3$, $N = 10$ và $N = 100$:



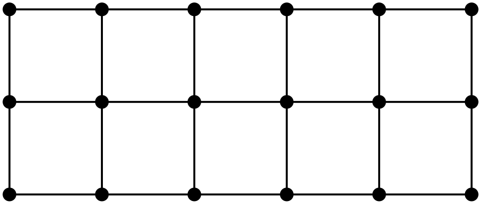
(a) 3 nút (b) 10 nút (c) 100 nút

Phương pháp số - Phương pháp phần tử hữu hạn

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:

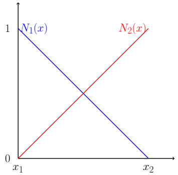
$$\Rightarrow \mathbf{u} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{F} \tag{37}$$

- 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.

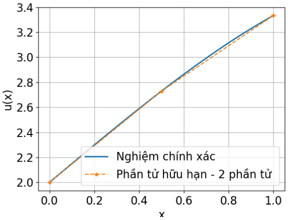
$\mathbf{u} = [u_1 \ u_2 \ u_3]^T$: vector bậc tự do của các nút.

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

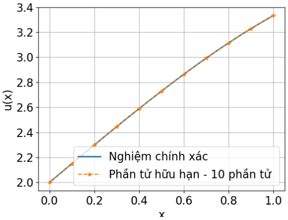
$$\begin{bmatrix} K_{11}^{e1} & K_{12}^{e1} & 0 \\ K_{21}^{e1} & K_{22}^{e1} + K_{22}^{e2} & K_{23}^{e2} \\ 0 & K_{32}^{e2} & K_{33}^{e2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} F_1^{e1} \\ F_2^{e1} + F_2^{e2} \\ F_3^{e2}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

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

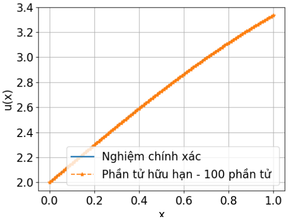
Nghiệm của PT, giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn với 2, 10 và 100 phần tử:



(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.