Rodzina algorytmów Verleta

dr inż. Szymon Maćkowiak

Algorytm Verleta - standardowy

źródło: M. P. Allen, D. J. Tildesley, „Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press, 1987.

Algorytm Verleta to jeden z najczęściej wykorzystywanych algorytmów w kontekście badań układów wielu ciał. Wymyślony przez Loopa Verleta w 1967 roku opiera się na rozwijaniu funkcji położenia w szereg Taylora o krok Δt w przód i krok Δt w tył, a następnie na dodaniu uzyskanych wyników stronami.

Algorytm Verleta - standardowy

źródło: M. P. Allen, D. J. Tildesley, „Computer Simulation of Liquids”, Oxford University Press, 1987.

$$\boldsymbol{r}(t_0+\Delta t)=\boldsymbol{r}(t_0)+\frac{\boldsymbol{r}'(t_0)}{1!}\Delta t^1+\frac{\boldsymbol{r}''(t_0)}{2!}\Delta t^2+\frac{\boldsymbol{r}'''(t_0)}{3!}\Delta t^3+\cdots$$

$$+\quad \boldsymbol{r}(t_0-\Delta t)=\boldsymbol{r}(t_0)-\frac{\boldsymbol{r}'(t_0)}{1!}\Delta t^1+\frac{\boldsymbol{r}''(t_0)}{2!}\Delta t^2-\frac{\boldsymbol{r}'''(t_0)}{3!}\Delta t^3+\cdots$$

dodajemy stronami oba równania

$$\boldsymbol{r}(t_0+\Delta t)+\boldsymbol{r}(t_0-\Delta t)\approx 2\boldsymbol{r}(t_0)+\boldsymbol{r}''(t_0)\Delta t^2+\cdots$$

$$\boxed{\begin{gathered}\boldsymbol{r}(t_0+\Delta t)=2\boldsymbol{r}(t_0)-\boldsymbol{r}(t_0-\Delta t)+\boldsymbol{r}''(t_0)\Delta t^2 \\ \boldsymbol{v}(t_0)=\frac{\boldsymbol{r}(t_0+\Delta t)-\boldsymbol{r}(t_0-\Delta t)}{2\Delta t}\end{gathered}}+\cdots$$

Algorytm Verleta – leap frog

źródło: M. P. Allen, D. J. Tildesley, „Computer Simulation of Liquids”, Oxford University Press, 1987.

$$\boldsymbol{r}(t_0 + \Delta t) = \boldsymbol{r}(t_0) + \Delta \mathrm{t} \cdot \boldsymbol{v}(t_0 + 1/2 \cdot \Delta t)$$

$$\boldsymbol{v}(t_0 + 1/2 \cdot \Delta t) = \boldsymbol{v}(t_0 - 1/2 \cdot \Delta t) + \Delta t \cdot \boldsymbol{a}(t_0)$$

$$\boldsymbol{v}(t_0) = 1/2 \cdot (\boldsymbol{v}(t_0 + 1/2 \cdot \Delta t) + \boldsymbol{v}(t_0 - 1/2 \cdot \Delta t))$$

Algorytm Verleta – prędkościowy

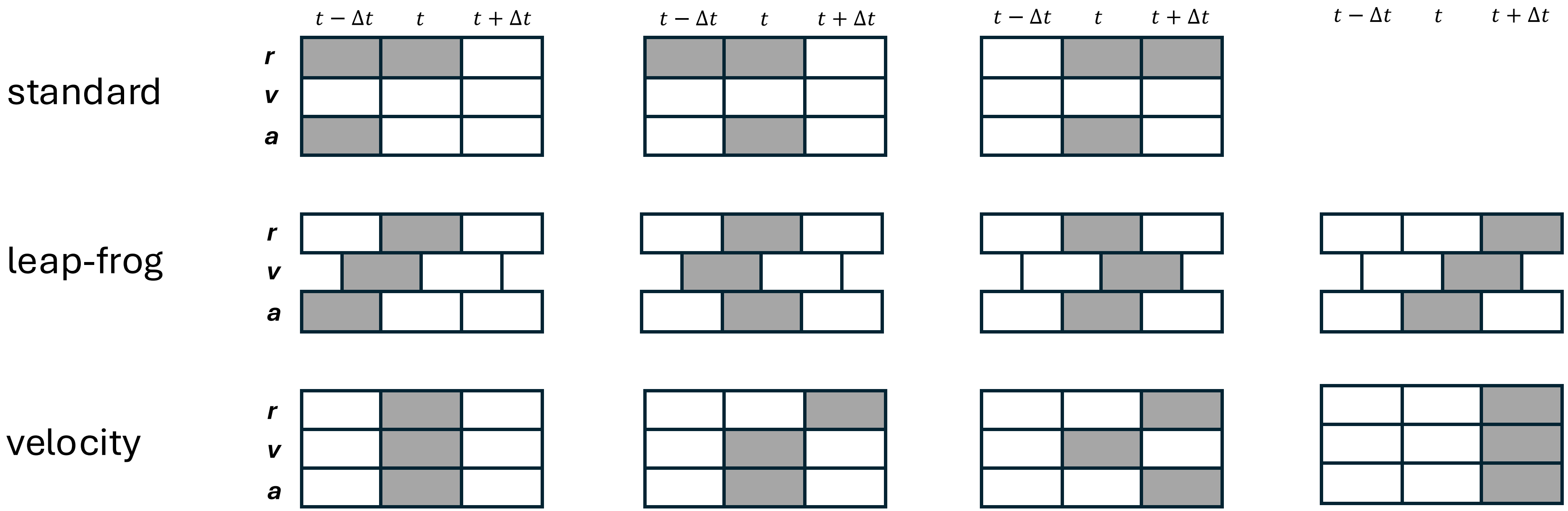
źródło: M. P. Allen, D. J. Tildesley, „Computer Simulation of Liquids”, Oxford University Press, 1987.

$$\boldsymbol{r}(t_0 + \Delta t) = \boldsymbol{r}(t_0) + \Delta \mathrm{t} \cdot \boldsymbol{v}(t_0) + 1/2 \cdot \Delta t^2 \boldsymbol{a}(t_0)$$

$$\boldsymbol{v}(t_0 + \Delta t) = \boldsymbol{v}(t_0) + 1/2 \cdot \Delta t[\boldsymbol{a}(t_0) + \boldsymbol{a}(t_0 + \Delta t)]$$

Algorytm Verleta - standardowy

źródło: M. P. Allen, D. J. Tildesley, „Computer Simulation of Liquids”, Oxford University Press, 1987.

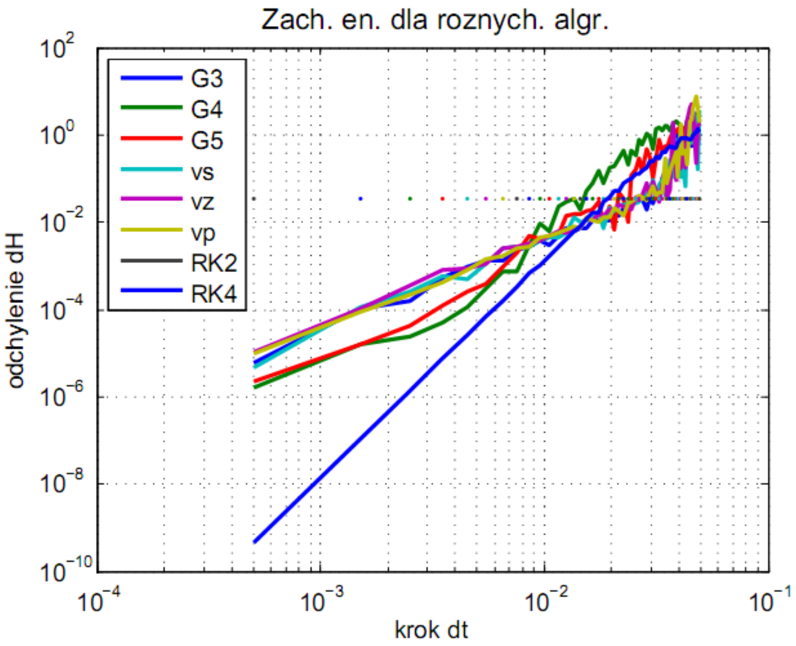


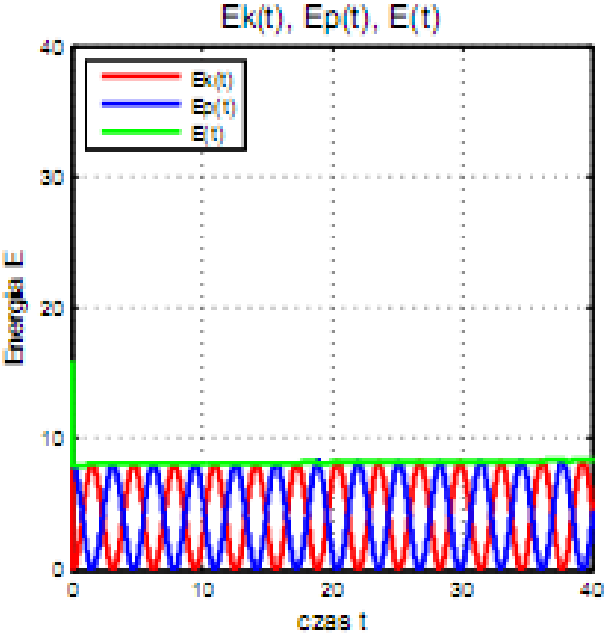
Badanie poprawności działania programu

Tworząc program stoimy przed następującym pytaniem – czy nasz program liczy dobrze?
Czy nie popełniliśmy żadnego błędu na etapie implementacji?
Jak to sprawdzić?

Metody:
- Monitorowanie całek ruchu (energii całkowitej, pędu, momentu pędu, środka masy)
- Badanie odchylenia standardowego energii w funkcji kroku czasowego.

$$dH = \sqrt{\left\langle \left(E_0 - E_C\right)^2 \right\rangle}$$





Oscylator harmoniczny niettłumiony 1D

Wyrażenie opisujące dynamikę oscylatora harmonicznego to równanie różniczkowe drugiego rzędu, jednorodne, o stałych współczynnikach.

$$m\ddot{x} + k\dot{x} = 0 \ \rightarrow \ddot{x} + \omega^2\dot{x} = 0$$

W zależności od dobranych warunków początkowych otrzymujemy:

$$x(t) = A\cos\omega t \qquad x(t) = A\sin\omega t$$

Zadanie 1

Rozwiązać numerycznie równanie różniczkowe niettłumionego oscylatora harmonicznego korzystając z algorytmu Verleta w wariancie podstawowym. Wykonać wykresy x(t), v(t), a(t), wykres przestrzeni fazowej p(x), sprawdzić zachowanie energii w czasie oraz odchylenia standardowego energii całkowitej od kroku czasowego (w skali logarytmicznej).

Praca domowa

Wykonane programy/symulacje proszę przenieść do dokumentu tekstowego i odesłać na adres szymon.mackowiak@put.poznan.pl. Dokument powinien być w formacie pdf, posiadać w nagłówku dane autora, następnie kolejno: treść zadania, kod rozwiązania, wykresy z komentarzem, wnioski.

Zadanie 2
Rozwiązać numerycznie równanie różniczkowe **nietłumionego** oscylatora harmonicznego korzystając z algorytmów z rodziny Verleta (standard, leap-frog i prędkościowy). Wykonać wykresy x(t), v(t), a(t), wykres przestrzeni fazowej p(x), sprawdzić zachowanie energii w czasie oraz odchylenia standardowego energii całkowitej od kroku czasowego (w skali logarytmicznej). Uwzględnić fakt, że ze względu na tłumienie, energia całkowita zmienia się.

Zadanie 3
Rozwiązać numerycznie równanie różniczkowe **tłumionego** oscylatora harmonicznego korzystając ze wszystkich poznanych algorytmów z rodziny Verleta (standard, leap-frog, prędkościowy). Wykonać wykresy x(t), v(t), a(t), wykres przestrzeni fazowej p(x), sprawdzić zachowanie energii w czasie oraz odchylenia standardowego energii całkowitej od kroku czasowego (w skali logarytmicznej). Uwzględnić fakt, że ze względu na tłumienie, energia całkowita zmienia się.