Numerické řešení pohybových rovnic Verletovými metodami

Úkol

Numericky řešte pohybové rovnice zadaných systémů. Zkoumejte závislost přesnosti řešení na nastavení integračních parametrů.

Použitý software

Mathematica CalcCenter

Zadané systémy

1. Jednorozměrný lineární harmonický oscilátor

Pohybová rovnice jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru o hmotnosti m je

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = F(x(t)), \text{ kde } F(x(t)) = -kx(t) \tag{1}$$

a k je kladná konstanta. Často se tato homogenní lineární diferenciální rovnice s konstantními koeficienty přepisuje do tvaru (viz také úloha č. 1)

$$\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 x(t) = 0\,, \tag{2}$$

kde $\omega = \sqrt{k/m}$ je úhlová frekvence oscilátoru.

2. Planeta pohybující se kolem Slunce podle Newtonova gravitačního zákona

Přitažlivá síla Slunce o hmotnosti M, umístěného v počátku soustavy souřadnic, působící na planetu o hmotnosti m v poloze $\vec{r}$ má vyjádření

$$\vec{F}(\vec{r}(t)) = -\kappa\frac{mM}{|\vec{r}(t)|^3}\vec{r}(t), \tag{3}$$

kde κ je gravitační konstanta. Tento problém odehrávající se v rovině můžeme v kartézských souřadnicích s využitím $\vec{r} = (x(t), y(t))$ zapsat pomocí pohybové rovnice

$$m\frac{\mathrm{d}^2 (x(t), y(t))}{\mathrm{d}t^2} = -\kappa\frac{mM}{\left(x(t)^2 + y(t)^2\right)^{\frac{3}{2}}}(x(t), y(t)). \tag{4}$$

Teorie

Vývoj systému v čase se dá získat řešením pohybových rovnic. Podle klasické fyziky Newtonovy pohybové rovnice[1] dávají do souvislosti zrychlení částic se silami působícími na částice (2. Newtonův pohybový zákon)

$$m_i\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \vec{F}_i\,,\ i = 1, 2, ..., N, \tag{5}$$

což je soustava $3N$ obyčejných diferenciálních rovnic 2. řádu. Příslušné počáteční podmínky tvoří obvykle polohy $\vec{r}_i$ a rychlosti $\frac{\mathrm{d}\vec{r}_i}{\mathrm{d}t}$ částic v počátečním čase. Spojité funkce se na počítači

[1] V teoretické fyzice jste se setkali také Lagrangeovými či Hamiltonovými pohybovými rovnicemi, pohybovou rovnicí nerelativistické kvantové mechaniky je Schrödingerova rovnice.

musí zaznamenávat v diskrétních bodech, většinou tvaru *t* = *t* + *ih*, kde *h* je malý časový úsek, zvaný integrační krok a *i* je nezáporné celé číslo.

Jednou z jednoduchých metod numerické integrace rovnice (5) je Verletova metoda, která využívá přepisu druhé derivace pomocí diferencí. Použijme např. symetrickou diferenční formuli druhého řádu

$$\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}_i}{\mathrm{d}t^2}(t) = \frac{\vec{r}_i(t-h) - 2\vec{r}(t)_i + \vec{r}_i(t+h)}{h^2} + O(h^2). \tag{6}$$

Po jejím dosazení do pohybové rovnice (2) a zanedbání chyby $O(h^2)$ dostaneme

$$\vec{r}_i(t+h) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t-h) + h^2\frac{\vec{F}_i(t)}{m_i}, \tag{7}$$

což je rekurentní předpis, kterým ze znalosti poloh částic v čase *t* a *t* – *h* a znalosti sil v čase *t* vypočteme nové polohy částic v čase *t* + *h*. Pro zadání počáteční polohy a rychlosti v počátečním čase t_0 nám schází už jen znalost předchozí polohy $\vec{r}_i(t_0 - h)$. Tu můžeme získat např. z věty o prvním diferenciálu

$$\vec{r}_i(t_0 - h) = r_i(t_0) - h\frac{\mathrm{d}\vec{r}_i}{\mathrm{d}t}(t_0) + O(h^2). \tag{8}$$

Postup práce

I. Jednorozměrný lineární harmonický oscilátor (pro redukované jednotky *k* = 1, *m* = 1)

1. Spusťte program Mathematica CalcCenter.
2. Pro později používané konstanty a proměnné nejdříve „vyčistěte“ místo v paměti počítače
```
Clear[h,t,x,v,xold,i,a,xnew,traj,k,l]
```
3. Zvolte si integrační krok
```
h:=0.1
```
4. Zapište počáteční podmínky, např. volte *x*(0) = 0, *v*(0) = 1 (do dalšího řádku přejdete vždy stiskem klávesy `Enter`).
```
t:=0.0
x:=0.0
v:=1.0
```
5. Zapište polohu v čase t_0 – *h* podle rovnice (8) a nastavte index pro cyklus na 1
```
xold=x-h*v;
i=1;
```
6. Připravte hlavní smyčku programu pomocí tzv. cyklu s podmínkou, který bude probíhat tak dlouho, dokud podmínka bude platná. Cyklus zapíšete příkazem
```
While[t<1,
tělo cyklu
]
```
čas v podmínce později můžete měnit.
7. Do těla cyklu (tj. místo výrazu `tělo cyklu` výše) vepište pro redukované jednotky *k* = 1, *m* = 1 výpočet zrychlení a poté novou polohu pomocí rekurentního předpisu Verletovy metody (7)
```
a=-x;
xnew=2*x-xold+a*h^2;
```
8. Nový bod trajektorie zapište společně s aktuálním časem do nově založeného pole (např. s názvem `traj`) pro závěrečné zpracování a vizualizaci řešení
```
traj[i,1]=t;
traj[i,2]=xnew;
```
9. Poslední řádky těla cyklu budou tvořit aktualizace proměnných. Přepište hodnoty novějších poloh do starších a „posuňte“ čas a počitadlo cyklu
```
xold=x;
x=xnew;
```

```
t=t+h;
i=i+1
```

Tímto je cyklus kompletní. Následuje zpracování a vizualizace výsledku.

10. Převeďte pole, ve kterém je zaznamenán čas a poloha na maticový tvar
```
traj=Table[traj[k,l],{k,1,i-1},{l,1,2}];
```
11. Exportujte vypočtené časy a polohy oscilátoru jako tabulku a jako obrázek.
```
Export[”D:\\u06I.txt”,traj,”Table”]
Export[”D:\\u06I.bmp”,ListPlot[traj,”Technical”,”NoPoints”],”BMP”]
```
Cestu pro uložení souborů si samozřejmě upravte podle potřeby a proveďte výpočet stiskem `Shift+Enter`. Celý soubor si uložte.
12. Zkoumejte závislost přesnosti řešení na nastavení integračního kroku h (pro delší čas v podmínce cyklu, alespoň $t < 12.6$). Zvolte hodnoty $h \in \{1.5, 1, 0.75, 0.5, 0.3, 0.2, 0.1, 0.05, 0.01, 0.005\}$. Nezapomeňte při změně h měnit i názvy exportovaných souborů `*.txt` a `*.bmp`, v opačném případě se Vám bude jejich obsah přepisovat.
13. Porovnejte výsledky vizuálně – zhodnoťte průběhy v grafech.
14. Sestavte tabulku srovnávající hodnotu polohy $x(t)$ ve vybraných časech $t \in \{3, 6, 9, 12\}$ pro hodnoty integračních kroků výše v bodu 10 postupu. Data získáte z příslušných `*.txt` souborů. Do této tabulky přidejte také přesnou hodnotu (analytické řešení je v úloze č. 1).

<u>II. Planeta pohybující se kolem Slunce podle Newtonova gravitačního zákona</u>

15. Zkopírujte si soubor *.nb pro lineární harmonický oscilátor, kopii si vhodně nazvěte, soubor otevřete a provádějte v něm postupně změny – rozšíření jednorozměrného problému pro $x(t)$ na dvourozměrný pro $(x(t),y(t))$. Také příkaz `Clear[]` upravte – postupně do závorky vpisujte všechny použité proměnné.
16. Zapište integrační krok, přidejte počáteční podmínky, např. volte $x(0) = 1$, $y(0) = 0$, $v_x(0) = 0$, $v_y(0) = 0.5$, zapište polohu v čase $t_0 - h$ podle rovnice (8) a ponechte index pro cyklus na 0.
```
h:=0.01
t:=0.0
x:=1.0
y:=0.0
vx:=0.0
vy:=0.5
xold=x–h*vx;
yold=y–h*vy;
i=0;
```
17. V cyklu s podmínkou zatím nastavte `t<1`, jako první do těla cyklu vepište posunutí počitadla cyklu a dále výpočet zrychlení podle rovnice (4) s tím, že budete počítat pro redukované jednotky $m = 1$, $M = 1$ a $\kappa = 1$.
```
i=i+1;
ax=-x/(x^2+y^2)^(3/2);
ay=-y/(x^2+y^2)^(3/2);
```
18. Zapište novou polohu pomocí rekurentního předpisu Verletovy metody (7)
```
xnew=2*x–xold+ax*h^2;
ynew=2*y–yold+ay*h^2;
```
19. Pro závěrečné zpracování a vizualizaci řešení nebudeme nyní ukládat čas, ale souřadnice trajektorie.
```
traj[i,1]=xnew;
traj[i,2]=ynew;
```
20. Poslední řádky těla cyklu budou opět tvořit aktualizace proměnných
```
xold=x;
yold=y;
x=xnew;
y=ynew;
t=t+h
```

Tímto je cyklus kompletní. Následuje zpracování a vizualizace výsledku.

21. Opět převeďte pole, ve kterém je zaznamenána trajektorie na maticový tvar a trajektorii planety exportujte jako tabulku a jako obrázek.

```
traj=Table[traj[k,l],{k,1,i},{l,1,2}];
Export["D:\\u06II.txt",traj,"Table"];
Export["D:\\u06II.bmp",ListPlot[traj, "Technical","NoPoints"],"BMP"]
```

    Cestu pro uložení souborů si samozřejmě upravte podle potřeby a proveďte výpočet stiskem `Shift+Enter`.

22. Zkoumejte závislost přesnosti řešení na nastavení integračního kroku h (pro delší čas v podmínce cyklu, alespoň $t < 20$, tj. asi 8 oběhů planety kolem Slunce, které je v počátku souřadnicové soustavy). Zvolte minimálně hodnoty $h \in \{0.1, 0.05, 0.03, 0.01, 0.005\}$. Nezapomeňte při změně h měnit i názvy exportovaných souborů `*.txt` a `*.bmp`, v opačném případě se Vám bude jejich obsah přepisovat.
23. Porovnejte výsledky vizuálně – zhodnoťte navzájem průběhy v grafech. Uveďte do souvislosti s 1. Keplerovým zákonem.

Doporučená literatura

literatura k lekci 7 a 8 kurzu KFY/PMFCH

viz http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce07.pps nebo http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce07.pdf

viz http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce08.pps nebo http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce08.pdf

NEZBEDA, I., KOLAFA, J., KOTRLA, M. *Úvod do počítačových simulací. Metody Monte Carlo a molekulární dynamiky.* Praha: Karolinum, 2003.

KALUS, R., HRIVŇÁK D. *Breviář vyšší matematiky*. Ostrava: Ostravská univerzita, 2001.

FULFORD, G., FORRESTER, P., JONES, A. *Modelling with Differential and Difference Equations.* Cambridge: Cambridge University Press, 1997.

manuál k software Mathematica CalcCenter