1. Wstęp

Zadaniem pierwszych komputerów było symulowanie trajektorii pocisków. Obecnie symulacje komputerowe dzięki dynamicznemu rozwojowi technologii komputerowych stały się ważnym narzędziem wielu dziedzin nauki takich jak fizyka, biologia czy chemia. Coraz szerzej wykorzystywane są też w szeroko rozumianej rozrywce. Atrakcyjność filmów i gier komputerowych zwiększa się np. przez realizm dodawany w formie odpowiedniego ruchu obiektów w tworzonych scenach, ich wzajemną interakcją. Sprowadza się to do modelowania odpowiednich zjawisk fizycznych.

Skuteczne zastosowanie symulacji poprzedzone musi być stworzeniem odpowiedniego modelu badanego środowiska. W swojej pracy stworzyłem kilka prostych modeli układów fizycznych w celu symulacji ich zachowania dla różnych warunków początkowych. Badanie dynamiki owych modeli możliwe jest oczywiście dzięki zastosowaniu metod numerycznych. Symulacja dynamiki przeprowadzona może być wieloma algorytmami. Wybór optymalnego jest jednym ze stawianych tej pracy zadań. Moja praca w głównej mierze składa się z opisu i porównania tych metod pod względem dokładności i złożoności czasowej. Podsumowaniem całej pracy jest aplikacja prezentująca praktyczne zastosowanie powyższych zagadnień. Jej atutem jest prezentacja wyników za pomocą grafiki 3D generowanej za pomocą biblioteki OpenGL [5, 6, 10, 12, 13, 14], tworząc trójwymiarowe animacje układów symulowanych w czasie rzeczywistym.

2. Algorytmy

2.1. Równanie ruchu – przedstawienie problemu

Równanie ruchu [1] dla pojedynczego punktu materialnego w jednym wymiarze o działającej na niego określonej sile wypadkowej przybiera prostą postać równania różniczkowego drugiego rzędu:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F_w}{m}, \tag{1}$$

gdzie:

F_w – siła wypadkowa,
x – położenie punktu na osi X,
m – masa punktu.

Najprostszym sposobem rozwiązania równania Newtona (1) opisującego przyspieszenie punktu materialnego jest przekształcenie go do układu dwóch równań sprzężonych pierwszego rzędu.

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

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F_w}{m} \tag{3}$$

W przeprowadzanej symulacji rozwiązywanym zagadnieniem jest położenie punktu w zależności od czasu. Znane są położenie i prędkość w chwili początkowej, a także działające na cząstkę siły. Znając równania (2) i (3) można użyć którejś z opisanych niżej metod numerycznych do rozwiązania zadanego problemu i znalezienia prędkości oraz położenia punktu materialnego w każdej chwili czasu.

2.2. Metoda Eulera

W swej klasycznej postaci jest to jedna z najprostszych metod numerycznych [7, 15]. Służy ona przede wszystkim do rozwiązywania równań różniczkowych pierwszego stopnia. Zakładając znajomość pochodnej $x'(t)$ funkcji zmiennej rzeczywistej $x(t)$ i jej wartość początkową w punkcie t_0, można obliczyć wartość tej funkcji w punkcie $t_0+\Delta t$ i następnych. Algorytm odpowiada rozwiązaniu za pomocą rozwinięcia w szereg Taylora (4, 5):

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + \frac{x'(t_0)}{1!} \cdot \Delta t^1 + \frac{x''(t_0)}{2!} \cdot \Delta t^2 + \ldots \qquad (4)$$

$$x(t_0 + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{(n)}(t_0)}{n!} \Big|_{t_0} \cdot \Delta t^n, \qquad (5)$$

w którym zachowano tylko pierwsze pochodne:

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + \frac{x'(t_0)}{1!} \cdot \Delta t^1 \qquad (6)$$

Co jest równoważne:

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + x'(t_0) \cdot \Delta t \qquad (7)$$

Błąd metody dąży do zera dla Δt dążącego do zera. Obcięcie rozwiązania do wyrazu Δt w potędze pierwszej oznacza, że metoda ta ma dokładność jedynie pierwszego rzędu względem rozwinięcia w szereg Taylora. Błąd obcięcia wynosi zatem $O(\Delta t^2)$. To powoduje względnie szybką rozbieżność algorytmu.

Zastosowanie metody Eulera do rozwiązania równania Newtona (1) jest następujące:

1. W pierwszej kolejności obliczana jest prędkość na podstawie zadanego przyspieszenia:

$$v_1 = v_0 + dv \qquad (8)$$

$$dv = \frac{F_w}{m} \cdot dt \qquad (9)$$

2. Następnie korzystając z obliczonej prędkości wyznaczane jest położenie:

$$x_1 = x_0 + dx \qquad (10)$$

$$dx = v_1 \cdot dt \qquad (11)$$

2.3 Metoda punktu środkowego - MidPoint

Metoda ta jest szczególną postacią metody Rungego-Kutty [7, 9, 15]. Należy ona do klasy schematów dwustopniowych. Oznacza to, że wartość funkcji $f(x, t)$ musi być obliczana dwa razy dla każdego wyznaczenia wartości funkcji x w punkcie $t_0+\Delta t$. Idea metody MidPoint może być zapisana w trzech wyrażeniach:

$$k_1 = \Delta t \cdot f(x_0, t_0) \qquad (12)$$

Powyższe równanie jest algorytmicznym zapisem metody Eulera. Na podstawie wartości początkowych i długości interwału czasowego obliczana jest wartość funkcji x w punkcie $t_0+\Delta t$ zapisana jako k_1.

$$k_2 = \Delta t \cdot f(x_0 + \frac{1}{2} \cdot k_1, t_0 + \frac{1}{2} \cdot \Delta t) \tag{13}$$

W (13) ponownie wykonywane jest całkowanie w celu znalezienia wartości f w punkcie odpowiadającym połowie k_1 wyznaczonej w kroku poprzednim, a następnie obliczana jest wielkość k_2. Końcowa wartość funkcji x w punkcie $t_0+\Delta t$ wyznaczona jest za pomocą rozwiązania z równania (13) i wartości początkowej.

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + k_2 \tag{14}$$

Dokładność metody MidPoint jest drugiego rzędu. Uzyskuje się to dzięki podzieleniu przedziału całkowania na dwie części. Nazwa metody pochodzi stąd, że rozwiązanie wyliczane w (13) wykorzystuje punkt środkowy rozwiązania (12).

Metodę MidPoint można wykorzystać do rozwiązania równania Newtona w sposób opisany w poniższych punktach:

1. Na podstawie znajomości położenia, prędkości i przyspieszenia w chwili t_0 obliczane są współczynniki k_1:

$$k_{1v} = \Delta t \cdot \frac{F_w}{m} \tag{15}$$

$$k_{1x} = \Delta t \cdot v_0 \tag{16}$$

2. Wartość siły wypadkowej aktualizowana jest dla połowy rozwiązania otrzymanego w punkcie pierwszym, a następnie wyliczane są współczynniki k_2:

$$k_{2v} = \Delta t \cdot \frac{F_w}{m} \tag{17}$$

$$k_{2x} = \Delta t \cdot \frac{1}{2} \cdot k_{1v} \tag{18}$$

3. Ostatecznie wartości prędkości i położenia w punkcie $t_0+\Delta t$ dane są wzorami:

$$v_1 = v_0 + k_{2v} \tag{19}$$

$$x_1 = x_0 + k_{2x} \tag{20}$$

2.4. Metoda Runge-Kutty czwartego rzędu

Metoda Runge-Kutty czwartego rzędu (RK4) [7, 9, 15] jest rozszerzeniem metody punktu środkowego o kolejne dwa kroki. Aby obliczyć wartość funkcji x w punkcie $t_0+\Delta t$ należy obliczyć wartość funkcji $f(x, t)$ czterokrotnie. Kompletny algorytm RK4 jest podobny do metody MidPoint, która w istocie jest metodą Runge-Kutty drugiego rzędu, przy czym zwiększona zostaje ilość dodatkowych obliczeń. Schemat jest następujący:

$$k_1 = \Delta t \cdot f(x_0, t_0) \tag{21}$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f(x_0 + \frac{1}{2} \cdot k_1, t_0 + \frac{1}{2} \cdot \Delta t) \tag{22}$$

Pierwsze dwa kroki są identyczne jak w metodzie punktu środkowego.

$$k_3 = \Delta t \cdot f(x_0 + \frac{1}{2} \cdot k_2, t_0 + \frac{1}{2} \cdot \Delta t) \tag{23}$$

W kolejnym kroku analogicznie do poprzedniego wyznaczana jest wartość funkcji f, z tą różnicą, że przedział całkowania określa połowa wartości obliczonej w kroku poprzednim k_2.

$$k_4 = \Delta t \cdot f(x_0 + k_3, t_0 + \Delta t) \tag{24}$$

Ostatni krok metody to znalezienie ostatniego współczynnika k_4 całkowaniem metodą prostokątów. Wartość funkcji x w punkcie $t_0+\Delta t$ obliczana jest na podstawie znajomości wartości początkowej $x(t_0)$ oraz wyznaczonych w czterech krokach współczynników k_1, k_2, k_3 i k_4:

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4) \tag{25}$$

Metoda RK4 przewyższa metodę MidPoint dwukrotnie pod względem dokładności. Oznacza to, że dla dwukrotnie większego interwału czasowego może uzyskać wyniki równie wiarygodne.

Równanie Newtona rozwiązuje się metodą RK4 zgodnie z następującym algorytmem:

1. Na podstawie znajomości położenia, prędkości i przyspieszenia w chwili t_0 obliczane są współczynniki k_1:

$$k_{1v} = \Delta t \cdot \frac{F_w}{m} \tag{26}$$

$$k_{1x} = \Delta t \cdot v_0 \tag{27}$$

2. Wartość siły wypadkowej aktualizowana jest dla połowy rozwiązania otrzymanego w punkcie pierwszym, a następnie wyliczane są współczynniki k_2:

$$k_{2v} = \Delta t \cdot \frac{F_w}{m} \tag{28}$$

$$k_{2x} = \Delta t \cdot \frac{1}{2} \cdot k_{1v} \tag{29}$$

3. Siła wypadkowa jest ponownie aktualizowana w punkcie wyznaczonym przez połowę rozwiązania z punktu drugiego:

$$k_{3v} = \Delta t \cdot \frac{F_w}{m} \tag{30}$$

$$k_{3x} = \Delta t \cdot \frac{1}{2} \cdot k_{2v} \tag{31}$$

4. Ostatnie współczynniki potrzebne do wyznaczenia prędkości i położenia w chwili następnej obliczane są po ostatniej aktualizacji siły wypadkowej w punkcie wyznaczonym przez rozwiązanie z punktu poprzedniego:

$$k_{4v} = \Delta t \cdot \frac{F_w}{m} \tag{32}$$

$$k_{4x} = \Delta t \cdot k_{3v} \tag{33}$$

5. Prędkość i położenie w chwili następnej obliczane są na podstawie prędkości i położenia początkowego i sumy współczynników zsumowanych z odpowiednimi wagami:

$$x_1 = x_0 + \frac{1}{6} \cdot (k_{1x} + 2 \cdot k_{2x} + 2 \cdot k_{3x} + k_{4x}) \tag{34}$$

$$v_1 = v_0 + \frac{1}{6} \cdot (k_{1v} + 2 \cdot k_{2v} + 2 \cdot k_{3v} + k_{4v}) \tag{35}$$