

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите
Директор ВШТМиМФ,
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН
_____ А. М. Кривцов
«_____» _____ 2023 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА-ТОЧКИ В
КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ ОТТАЛКИВАНИЯ

по направлению подготовки
01.03.03 «Механика и математическое моделирование»
профиль
01.03.03_03 Математическое моделирование процессов нефтегазодобычи

Выполнил
студент гр. 5030103/90301

А.А. Чеботин

Руководитель
профессор ВШТМиМФ, д. ф.-м. н.,

Е.А. Иванова

Санкт-Петербург
2023

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ПЕТРА ВЕЛИКОГО**

Физико-механический институт

Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А. М. Кривцов

« _____ » _____ 2023 г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Чеботин Александру, гр. 5030103/90301

1. Тема работы: Численное моделирование движения тела-точки в кулоновском поле отталкивания
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 05.06.2023
3. Исходные данные по работе: основным источником литературы является учебное пособие Zhilin, P.A.: Rigid Body Dynamics. Polytechnic University Publishing House, St. Petersburg (2015).
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): исследование численных методов решения прикладной задачи, реализация алгоритмов решения задачи на языке программирования, визуализация численного решения.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
6. Консультанты по работе: отсутствуют.
7. Дата выдачи задания: 27.02.2023

Руководитель ВКР _____ Е.А. Иванова, профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

Задание принял к исполнению 27.02.2023

Студент _____ А.А. Чеботин

РЕФЕРАТ

На 70 с., 77 рисунков, 3 таблицы, 3 приложения

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА-ТОЧКИ, КУЛОНОВСКОЕ ПОЛЕ, СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ, СОХРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ.

Данная работа посвящена численному моделированию движения тела-точки в кулоновском поле отталкивания. Рассмотрены тело-точка и неподвижный кулоновский центр. Выведена система дифференциальных уравнений, описывающая взаимодействие тела-точки с кулоновским центром. Приведено сравнение численных методов решения системы дифференциальных уравнений. Результаты проанализированы на предмет сохранения энергии. Разработано графическое приложение с анимацией трехмерного движения.

ABSTRACT

70 pages, 77 figures, 3 tables, 3 appendices

KEYWORDS: MODELING OF BODY-POINT MOTION, COULOMB FIELD, SYMPLECTIC METHODS, ENERGY CONSERVATION.

This work was devoted to numerical modeling of a body-point motion in the field of Coulomb repulsion. A body-point and a fixed Coulomb center are considered. A system of differential equations is derived that describes the interaction of a body-point with a Coulomb center. A comparison of numerical methods for solving a system of differential equations is given. The results are analyzed for the conservation on energy. A graphical application has been developed that animates three-dimensional movement.

СОДЕРЖАНИЕ

Список сокращений и условных обозначений	6
Словарь терминов	7
ВВЕДЕНИЕ	8
ГЛАВА 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ	9
1.1. Динамические структуры тела-точки	9
1.2. Вывод уравнений движения	10
1.3. Приведение уравнений движения к виду, удобному для численного интегрирования	11
1.4. Выбор начальных условий	11
ГЛАВА 2. ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА-ТОЧКИ	13
2.1. Метод Рунге-Кутты 4-го порядка	13
2.2. Метод Адамса-Башфорта 4-го порядка	15
2.3. Симплектический интегратор	15
2.4. Построение симплектических интеграторов высоких порядков	17
2.5. Адаптация симплектических интеграторов для системы уравнений движения тела-точки	22
2.6. Выводы	23
ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ	24
3.1. Анимация движения тела-точки и интерфейс приложения	24
3.2. Численные решения и энергия, полученные разными схемами	25
ГЛАВА 4. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ	37
4.1. Зависимость относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении прицельного расстояния d	37
4.2. Зависимость относительного отклонения энергии от первоначального значения от расстояния L	39
4.3. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении шага интегрирования h	40
4.4. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения в зависимости от шага интегрирования h	42
4.5. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении K_x	44
4.6. Зависимость времени численного решения задачи о движении тела-точки в кулоновском поле от количества шагов n	45
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	47
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	50

Приложение 1. Некоторые примеры траектории тела-точки	52
Приложение 2. О количестве промежуточных шагов в схеме симплектического интегратора порядка $2n$	68
Приложение 3. О гамильтонианах	69

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

РК-4 Метод Рунге-Кутты 4-го порядка.

АВ-4 Метод Адамса-Башфорта 4-го порядка.

НУ Начальное условие.

СЛОВАРЬ ТЕРМИНОВ

Прицельное расстояние — расстояние вдоль перпендикуляра от пути частицы до центра поля, к которому приближается частица.

Динамические структуры тела-точки — кинетическая энергия, количество движения и собственный кинетический момент тела-точки.

Симплектический интегратор — численная схема интегрирования дифференциальных уравнений.

Разностная схема — схема решения дифференциального уравнения, в котором исходная функция заменяется на последовательность значений на сетке точек.

Тело-точка — это частица, которая занимает нулевой объем в пространстве, обладает трансляционными и вращательными степенями свободы и характеризуется массой и двумя тензорами инерции, один из которых симметричный, а другой – произвольный.

ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является изучение различных методов численного интегрирования уравнений движения тела-точки в поле кулоновского отталкивания с точки зрения достигаемой точности, величины шага интегрирования и продолжительности интервала вычислений.

Приводятся особенности некоторых методов, которые могут быть использованы для решения поставленной задачи, а далее для систем дифференциальных уравнений движения тела-точки составляется разностная схема в соответствии с численным методом интегрирования.

Движение тела-точки определяется дифференциальными уравнениями, которые не имеют аналитического решения, соответственно для изучения движения требуются численные методы. Часто системы имеют определенные инварианты, которые численные методы не обязательно могут сохранять. К таким инвариантам относятся, к примеру, сохранение энергии или углового момента. Возмущения, вносимые численными методами, могут быть значительными, особенно при большом времени моделирования. Поэтому для интегрирования движения тела-точки в кулоновском поле наиболее подходящими и обоснованными являются численные методы интегрирования, хорошо сохраняющие энергию системы. Такие методы называются симплектическими.

Выбор подходящего численного метода зависит от конкретной задачи, и любые изменения в постановке задачи могут привести к тому, что одни методы станут работать лучше других. Каждая система дифференциальных уравнений требует индивидуального исследования для выбора оптимального численного метода.

В данной работе будет разработан пакет программ для численного интегрирования уравнений движения, а не только одна программа, что является более целесообразным. В зависимости от конкретной задачи можно комбинировать быстрый симплектический метод или очень точный, но медленный метод более высокого порядка. В данной работе сравнены популярные схемы численного интегрирования с симплектическими интеграторами. К последним относится интегратор, построенный по достаточно новому методу, разработанному японским математиком Харуо Йошида в 1990 году и описанному в статье [15].

ГЛАВА 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В данной главе выводится система дифференциальных уравнений движения тела-точки в кулоновском поле, далее система приводится к виду, удобному для численного интегрирования. Обсуждаются начальные условия.

1.1. Динамические структуры тела-точки

В данной задаче мы будем рассматривать как исходный объект тело-точку. В отличие от материальной точки, рассматриваемой в ньютоновской механике, тело-точка совершает не только трансляционные, но и вращательные движения. Известно, что траектория движения материальной точки лежит в фиксированной плоскости, проходящей через начало координат, поэтому такая простейшая базовая модель классической механики имеет ограниченную область применимости. Тело-точка — это частица, которая занимает нулевой объем в пространстве, обладает трансляционными и вращательными степенями свободы и характеризуется массой и двумя тензорами инерции, один из которых симметричный, а другой — произвольный. Формальным определением тела-точки является задание её кинетической энергии как квадратичной формы трансляционной и угловой скоростей, коэффициентами которой являются тензоры инерции:

$$K = \frac{1}{2} m \underline{v} \cdot \underline{v} + \underline{v} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\omega} + \frac{1}{2} \underline{\omega} \cdot \underline{J} \cdot \underline{\omega}, \quad (1.1)$$

где тензоры второго ранга \underline{B} , \underline{J} – тензоры инерции тела-точки, скалярный множитель m – масса тела-точки, \underline{v} и $\underline{\omega}$ – векторы трансляционной и угловой скоростей.

Рассмотрим движение тела-точки в поле кулоновского центра. Предположим, что центр является точечным и его положение фиксировано в начале координат. Экспериментальный закон Кулона утверждает, что сила взаимодействия с силовым центром происходит по закону

$$\underline{F} = -\frac{A}{R^3} \underline{R} \quad (1.2)$$

где \underline{R} – вектор из начала координат в точку нахождения частицы, A - константа кулоновского взаимодействия. Аналогичное уравнение имеет место для закона всемирного тяготения. Мы будем рассматривать тело-точку, тензоры инерции

которой представляют собой шаровые тензоры

$$K = \frac{1}{2}m\underline{v} \cdot \underline{v} + B\underline{v} \cdot \underline{\omega} + \frac{1}{2}J\underline{\omega} \cdot \underline{\omega}, \quad (1.3)$$

Кинетическая энергия тела-точки, по определению, является положительно определенной функцией своих аргументов. Определим количество движения \underline{K}_1 и собственный кинетический момент \underline{K}_2 :

$$\underline{K}_1 = \frac{\partial K}{\partial \underline{v}} = m\underline{v} + B\underline{\omega} \quad (1.4)$$

$$\underline{K}_2 = \frac{\partial K}{\partial \underline{\omega}} = B\underline{v} + J\underline{\omega} \quad (1.5)$$

Полный кинетический момент \underline{K}_2^Q относительно опорной точки Q , которую ради удобства выберем совпадающей с силовым центром, равен

$$\underline{K}_2^Q = \underline{R} \times \underline{K}_1 + \underline{K}_2 \quad (1.6)$$

1.2. Вывод уравнений движения

Выведем уравнения движения тела-точки, воспользовавшись теоретическими сведениями из предыдущего параграфа. Движение тела-точки описывается двумя законами динамики Эйлера:

$$\begin{cases} \frac{d\underline{K}_1}{dt} = \underline{F} = -\frac{A}{R^3}\underline{R} \\ \frac{d\underline{K}_2^Q}{dt} = \underline{M}^Q = 0 \end{cases}$$

Подставим конкретные выражения количества движения и кинетического момента в данную систему, рассмотрим уравнения по-отдельности:

$$\begin{aligned} \frac{d(m\underline{v} + B\underline{\omega})}{dt} &= m\underline{\dot{v}} + B\underline{\dot{\omega}} = -\frac{A}{R^3}\underline{R} \\ \frac{d(\underline{R} \times \underline{K}_1 + \underline{K}_2)}{dt} &= \underline{\dot{R}} \times B\underline{\omega} + B\underline{\dot{v}} + \underline{J}\underline{\dot{\omega}} = 0 \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили следующую замкнутую систему дифференциальных уравнений движения тела-точки:

$$\begin{cases} m\underline{\dot{v}} + B\underline{\dot{\omega}} = -\frac{A}{R^3}\underline{R} \\ B\underline{\dot{v}} + \underline{J}\underline{\dot{\omega}} = B\underline{\omega} \times \underline{\dot{R}}, \end{cases} \quad (1.7)$$

где \underline{R} , \underline{v} , $\underline{\omega}$ – трёхмерные векторы. После добавления 3 векторных (или 9 скалярных) начальных условий, получим задачу Коши:

$$\underline{R}(0) = \underline{R}_0, \quad \underline{v}(0) = \underline{v}_0, \quad \underline{\omega}(0) = \underline{\omega}_0 \quad (1.8)$$

Решение данной системы будет зависеть от девяти скалярных начальных условий и от параметров системы B, J, m, A .

1.3. Приведение уравнений движения к виду, удобному для численного интегрирования

Для численного интегрирования полученной системы, её необходимо привести к виду, удобному для итераций. Домножим первое уравнение системы (1.7) на J , второе на B и вычтем их, получим следующее:

$$(mJ - B^2) \underline{\dot{v}} = -\frac{AJ}{R^3} \underline{R} - B^2 \underline{\omega} \times \underline{v} \quad (1.9)$$

Теперь домножим первое уравнение системы (1.7) на B , второе уравнение – на m и вычтем их, получим:

$$(mJ - B^2) \underline{\dot{\omega}} = -\frac{AB}{R^3} \underline{R} - mB \underline{\omega} \times \underline{v} \quad (1.10)$$

Уравнение (1.9) и (1.10) с добавлением уравнения $\underline{\dot{R}} = \underline{v}$ образуют готовую к численному интегрированию систему уравнений движения тела-точки с начальными условиями (1.8):

$$\begin{cases} (mJ - B^2) \underline{\dot{v}} = -\frac{AJ}{R^3} \underline{R} - B^2 \underline{\omega} \times \underline{v} \\ (mJ - B^2) \underline{\dot{\omega}} = -\frac{AB}{R^3} \underline{R} - mB \underline{\omega} \times \underline{v} \\ \underline{\dot{R}} = \underline{v} \end{cases}$$

Запись в покомпонентном виде очевидна и здесь не будет приводиться. Именно в таком виде будет задаваться система в компьютерной программе.

1.4. Выбор начальных условий

Выберем начальные условия таким образом, чтобы тело-точка налетала на отталкивающий кулоновский центр на определенном прицельном расстоянии. Поскольку силовой центр отталкивающий, мы будем получать траектории движения,

выгнутые от него. Введем следующие два параметра: d - прицельное расстояние, L - расстояние между начальным положением налетающей частицы и кулоновским центром, как показано на рисунке (1.1).

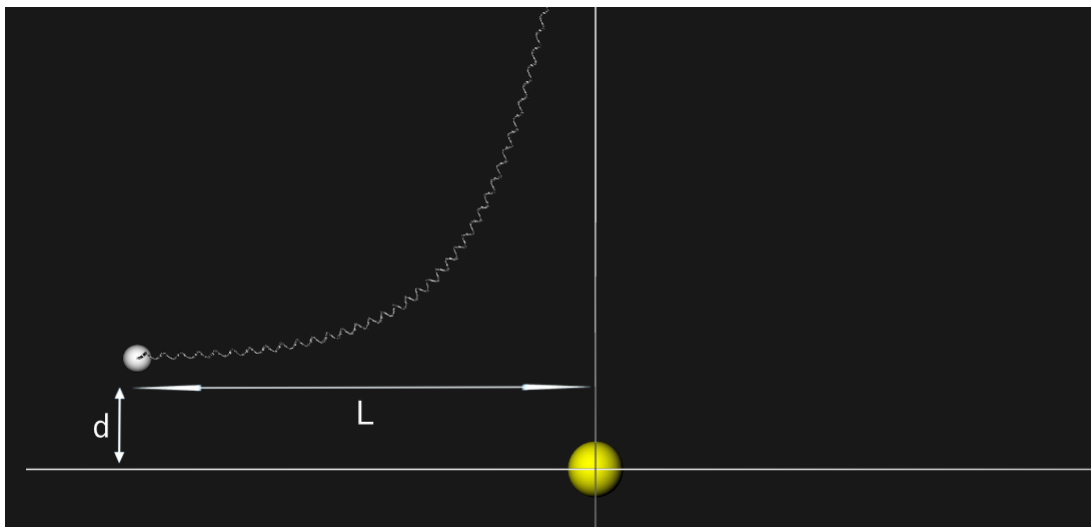


Рис.1.1. Пример траектории тела-точки в кулоновском поле отталкивания

Запишем сначала начальные условия относительно переменных \underline{K}_1 , \underline{K}_2 и \underline{R} следующими:

$$\underline{K}_1(0) = K_1 \underline{i}, \quad K_1 > 0 \quad (1.11)$$

$$\underline{K}_2(0) = -K_z \underline{k} + K_x \underline{i}, \quad K_z > 0 \quad (1.12)$$

$$\underline{R}(0) = \left(d - \frac{K_z}{K_1} \right) \underline{j} - L \underline{i}, \quad d > 0, \quad L > 0, \quad L \gg d \quad (1.13)$$

Здесь \underline{i} , \underline{j} , \underline{k} – орты декартовой системы координат. Поскольку

$$\underline{K}_1 = m \underline{v} + B \underline{\omega}$$

$$\underline{K}_2 = B \underline{v} + J \underline{\omega},$$

можно вывести начальные условия для \underline{v} и $\underline{\omega}$ в отдельности. Для этого нужно решить СЛАУ 2x2. Решением является:

$$\underline{v}(0) = \frac{BK_x - JK_1}{B^2 - mJ} \underline{i} - \frac{BK_z}{B^2 - mJ} \underline{k} \quad (1.14)$$

$$\underline{\omega}(0) = \frac{BK_1 - mK_x}{B^2 - mJ} \underline{i} + \frac{mK_z}{B^2 - mJ} \underline{k} \quad (1.15)$$

ГЛАВА 2. ПОСТРОЕНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА-ТОЧКИ

Данная глава посвящена различным численным методам интегрирования уравнений движения. Будут построены численные схемы для уравнений движения тела-точки в соответствии с методом. Кроме того, будет дана краткая характеристика каждого метода.

Мы рассмотрим симплектические интеграторы различных порядков, а сравнивать их будем со следующими популярными численными методами решения дифференциальных уравнений: Рунге-Кутты 4-го порядка и Адамса-Башфорта 4-го порядка.

2.1. Метод Рунге-Кутты 4-го порядка

Метод Рунге-Кутты 4-го порядка является одношаговым и явным. Метод четырехэтапный и для вычисления неизвестного i -го значения функции, требуется уточнить это значение 4 раза. Эти уточнения обычно обозначаются как K_1, K_2, K_3, K_4 . Реализуем разностную схему для наших уравнений движения. Поскольку метод относится к одношаговым, то для вычисления i -го значения функции требуется знание только $(i - 1)$ -го.

Значения на 1 этапе метода:

$$\begin{aligned} (mJ - B^2) \underline{K}_{1v} &= -\frac{AJ}{R_{i-1}^3} R_{i-1} - B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \\ (mJ - B^2) \underline{K}_{1\omega} &= -\frac{AB}{R_{i-1}^3} R_{i-1} - mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \\ \underline{K}_{1r} &= \underline{v}_{i-1} \end{aligned}$$

Значения на 2 этапе:

$$(mJ - B^2) \underline{K}_{2v} = -\frac{AJ}{\left[R_{i-1} + \frac{h}{2} \underline{K}_{1r}\right]^3} \left(R_{i-1} + \frac{h}{2} \underline{K}_{1r}\right) - B^2 \left(\underline{\omega}_{i-1} + \frac{h}{2} \underline{K}_{1\omega}\right) \times \left(\underline{v}_{i-1} + \frac{h}{2} \underline{K}_{1v}\right)$$

$$(mJ - B^2) \underline{K}_{2\omega} = -\frac{AB}{[R_{i-1} + \frac{h}{2}K_{1r}]^3} \left(\underline{R}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{1r} \right) - mB \left(\underline{\omega}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{1\omega} \right) \times \left(\underline{v}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{1v} \right)$$

$$\underline{K}_{2r} = \underline{v}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{1r}$$

Значения на 3 этапе:

$$(mJ - B^2) \underline{K}_{3v} = -\frac{AJ}{[R_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2r}]^3} \left(\underline{R}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2r} \right) - B^2 \left(\underline{\omega}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2\omega} \right) \times \left(\underline{v}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2v} \right)$$

$$(mJ - B^2) \underline{K}_{3\omega} = -\frac{AB}{[R_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2r}]^3} \left(\underline{R}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2r} \right) - mB \left(\underline{\omega}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2\omega} \right) \times \left(\underline{v}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2v} \right)$$

$$\underline{K}_{3r} = \underline{v}_{i-1} + \frac{h}{2}K_{2r}$$

Значения на 4 этапе:

$$(mJ - B^2) \underline{K}_{4v} = -\frac{AJ}{[R_{i-1} + hK_{3r}]^3} \left(\underline{R}_{i-1} + hK_{3r} \right) - B^2 \left(\underline{\omega}_{i-1} + hK_{3\omega} \right) \times \left(\underline{v}_{i-1} + hK_{3v} \right)$$

$$(mJ - B^2) \underline{K}_{4\omega} = -\frac{AB}{[R_{i-1} hK_{3r}]^3} \left(\underline{R}_{i-1} + hK_{3r} \right) - mB \left(\underline{\omega}_{i-1} + hK_{3\omega} \right) \times \left(\underline{v}_{i-1} + hK_{3v} \right)$$

$$\underline{K}_{4r} = \underline{v}_{i-1} + hK_{3r}$$

Получим следующую систему, где дифференциальные уравнения заменены на разностные выражения:

$$\begin{cases} \underline{v}_i = \underline{v}_{i-1} + \frac{h}{6} (\underline{K}_{1v} + 2\underline{K}_{2v} + 2\underline{K}_{3v} + \underline{K}_{4v}) \\ \underline{\omega}_i = \underline{\omega}_{i-1} + \frac{h}{6} (\underline{K}_{1\omega} + 2\underline{K}_{2\omega} + 2\underline{K}_{3\omega} + \underline{K}_{4\omega}) \\ \underline{R}_i = \underline{R}_{i-1} + \frac{h}{6} (\underline{K}_{1r} + 2\underline{K}_{2r} + 2\underline{K}_{3r} + \underline{K}_{4r}) \end{cases}$$

В данной разностной схеме h - шаг интегрирования, $\underline{K}_{1v}, \underline{K}_{2v}, \underline{K}_{3v}, \underline{K}_{4v}$ - уточнения вектора трансляционной скорости, $\underline{K}_{1\omega}, \underline{K}_{2\omega}, \underline{K}_{3\omega}, \underline{K}_{4\omega}$ - уточнения для вектора спинорной скорости, $\underline{K}_{1r}, \underline{K}_{2r}, \underline{K}_{3r}, \underline{K}_{4r}$ - уточнения для радиус-вектора. Перейдем теперь к более сложному по конструкции многошаговому методу.

2.2. Метод Адамса-Башфорта 4-го порядка

Многошаговые методы означают, что для вычисления i -го значения функции используются значения на нескольких предыдущих шагах. Формула, определяющая метод Адамса-Башфорта 4-го порядка:

$$y_i = y_{i-1} + \frac{h}{24} (55f(x_{i-1}, y_{i-1}) - 59f(x_{i-2}, y_{i-2}) + 37f(x_{i-3}, y_{i-3}) - 9f(x_{i-4}, y_{i-4})) \quad (2.1)$$

Для начала итераций требуется 4 стартовых значения x и y . Поскольку задача Коши предполагает знание x_0, y_0 , то вычислить остальные 3 можно при помощи Рунге-Кутты 4-го порядка. После этого применяется разностная схема Адамса-Башфорта:

$$\begin{aligned} \underline{v}_i = \underline{v}_{i-1} + \frac{h}{24} \frac{1}{(mJ - B^2)} & \left(-55 \left[\frac{AJ}{R_{i-1}^3} \underline{R}_{i-1} + B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] + \right. \\ & + 59 \left[\frac{AJ}{R_{i-2}^3} \underline{R}_{i-2} + B^2 \underline{\omega}_{i-2} \times \underline{v}_{i-2} \right] - 37 \left[\frac{AJ}{R_{i-3}^3} \underline{R}_{i-3} + B^2 \underline{\omega}_{i-3} \times \underline{v}_{i-3} \right] + \\ & \left. + 9 \left[\frac{AJ}{R_{i-4}^3} \underline{R}_{i-4} + B^2 \underline{\omega}_{i-4} \times \underline{v}_{i-4} \right] \right) \\ \underline{\omega}_i = \underline{\omega}_{i-1} + \frac{h}{24} \frac{1}{(mJ - B^2)} & \left(-55 \left[\frac{AB}{R_{i-1}^3} \underline{R}_{i-1} + mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] + \right. \\ & + 59 \left[\frac{AB}{R_{i-2}^3} \underline{R}_{i-2} + mB \underline{\omega}_{i-2} \times \underline{v}_{i-2} \right] - 37 \left[\frac{AB}{R_{i-3}^3} \underline{R}_{i-3} + mB \underline{\omega}_{i-3} \times \underline{v}_{i-3} \right] + \\ & \left. + 9 \left[\frac{AB}{R_{i-4}^3} \underline{R}_{i-4} + mB \underline{\omega}_{i-4} \times \underline{v}_{i-4} \right] \right) \\ \underline{R}_i = \underline{R}_{i-1} + \frac{h}{24} & \left(55 \underline{v}_{i-1} - 59 \underline{v}_{i-2} + 37 \underline{v}_{i-3} - 9 \underline{v}_{i-4} \right) \end{aligned}$$

2.3. Симплектический интегратор

Среди новых численных методов интегрирования, появившихся в последние десятилетия, следует отметить симплектический интегратор 4-го порядка. Данный

метод представляет из себя модификацию метода Верле. Алгоритм порядка $n = 4$ получен Форестом и Рутон в 1990 году. Один шаг по методу делится на 4 промежуточных шага. Построим разностную схему для нашей системы в соответствии с алгоритмом:

$$\begin{aligned}
 \underline{R}_{i-1}^{(1)} &= \underline{R}_{i-1} + C_1 \underline{v}_{i-1} h \\
 \underline{v}_{i-1}^{(1)} &= \underline{v}_{i-1} - D_1 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AJ}{(R_{i-1}^{(1)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(1)} + B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{\omega}_{i-1}^{(1)} &= \underline{\omega}_{i-1} - D_1 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AB}{(R_{i-1}^{(1)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(1)} + mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{R}_{i-1}^{(2)} &= \underline{R}_{i-1}^{(1)} + C_2 \underline{v}_{i-1}^{(1)} h \\
 \underline{v}_{i-1}^{(2)} &= \underline{v}_{i-1}^{(1)} - D_2 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AJ}{(R_{i-1}^{(2)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(2)} + B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{\omega}_{i-1}^{(2)} &= \underline{\omega}_{i-1}^{(1)} - D_2 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AB}{(R_{i-1}^{(2)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(2)} + mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{R}_{i-1}^{(3)} &= \underline{R}_{i-1}^{(2)} + C_3 \underline{v}_{i-1}^{(2)} h \\
 \underline{v}_{i-1}^{(3)} &= \underline{v}_{i-1}^{(2)} - D_3 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AJ}{(R_{i-1}^{(3)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(3)} + B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{\omega}_{i-1}^{(3)} &= \underline{\omega}_{i-1}^{(2)} - D_3 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AB}{(R_{i-1}^{(3)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(3)} + mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \left\{ \begin{aligned}
 \underline{R}_i &= \underline{R}_{i-1}^{(4)} = \underline{R}_{i-1}^{(3)} + C_4 \underline{v}_{i-1}^{(3)} h \\
 \underline{v}_i &= \underline{v}_{i-1}^{(4)} = \underline{v}_{i-1}^{(3)} \\
 \underline{\omega}_i &= \underline{\omega}_{i-1}^{(4)} = \underline{\omega}_{i-1}^{(3)},
 \end{aligned} \right. \tag{2.2}
 \end{aligned}$$

где $\underline{R}_{i-1}^{(n)}$, $\underline{v}_{i-1}^{(n)}$, $\underline{\omega}_{i-1}^{(n)}$ - промежуточные значения радиус-вектора, векторов трансляционной и угловой скоростей на промежуточном шаге n . Значения коэффициентов (c_1, c_2, c_3, c_4) и (d_1, d_2, d_3, d_4) :

$$x_0 \equiv -\frac{2^{\frac{1}{3}}}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}$$

$$x_1 \equiv \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{3}}}$$

$$c_1 = c_4 = \frac{x_1}{2}, \quad c_2 = c_3 = \frac{x_0 + x_1}{2}$$

$$d_1 = d_3 = x_1, \quad d_2 = x_0$$

Наборы численных значений коэффициентов c_k , d_k получены Форестом и Руттом с помощью аналитических преобразований. Таким образом, один шаг интегрирования h делится на несколько более малых интервалов с шагом $d_i h$, соответственно точность вычислений существенно повышается. Заметим, что данные коэффициенты удовлетворяют свойству

$$\sum_{k=1}^4 c_k = 1, \quad \sum_{k=1}^4 d_k = 1$$

На самом деле, можно вывести метод более высокого порядка, который нам требуется.

2.4. Построение симплектических интеграторов высоких порядков

Как мы указали, можно построить симплектический интегратор более высокого порядка, воспользовавшись методом Йошиды. Под словом "метод" мы понимаем не сам конкретный численный метод, а скорее методику построения интегратора произвольного порядка. Пусть $S(t)$ - это оператор вида

$$S(t) = \prod_{i=1}^k e^{C_i t A} e^{D_i t B} + o(t^{n+1}) = e^{t(A+B)} \quad (2.3)$$

где A и B будем считать операторами. Задача построения интегратора сводится к поиску набора констант C_i и D_i , таких, что разность экспоненциальной функции $e^{t(A+B)}$ и произведения экспоненциальных функций

$$\prod_{i=1}^k e^{C_i t A} e^{D_i t B} = e^{C_1 t A} e^{D_1 t B} e^{C_2 t A} e^{D_2 t B} \cdot \dots \cdot e^{C_k t A} e^{D_k t B}$$

имело порядок t^{n+1} для заданного положительного целого числа n , называемым *порядком метода*. Таким образом, выполнится равенство (2.3).

Заметим, что для $n = 1$ задача имеет очевидное решение:

$$S_1(t) = e^{tA} e^{tB} + o(t^2) \quad (2.4)$$

$$C_1 = D_1 = 1 \quad (2.5)$$

Нижний индекс у оператора $S(\tau)$ будет обозначать порядок n . Решим задачу при $n = 2$.

$$S_2(t) = e^{C_1 t A} e^{D_1 t B} e^{C_2 t A} e^{D_2 t B} + o(t^3)$$

Разложим левую и правую часть (2.3) по степеням t вплоть до t^3 :

$$\begin{aligned} 1 + t(A + B) + \frac{1}{2}t^2(A + B)^2 + \dots + o(t^3) = \\ 1 + t(C_1 + C_2)A + t(D_1 + D_2)B + \frac{1}{2}t^2((C_1 + C_2)A + (D_1 + D_2)B)^2 + o(t^3) \end{aligned}$$

Преобразуем

$$\begin{aligned} tA + tB + \frac{1}{2}t^2A^2 + t^2AB + \frac{1}{2}t^2B^2 = \\ (C_1 + C_2)tA + (D_1 + D_2)tB + \frac{1}{2}(C_1 + C_2)^2t^2A^2 + (C_1 + C_2)(D_1 + D_2)t^2AB + \frac{1}{2}(D_1 + D_2)^2t^2B^2 \end{aligned}$$

Приравняем коэффициенты при одинаковых степенях:

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = 1 \\ D_1 + D_2 = 1 \\ (C_1 + C_2)(D_1 + D_2) = 1 \end{cases}$$

Одно из решений, например: $C_1 = C_2 = 1/2$, $D_1 = 1$, $D_2 = 0$. Таким образом,

$$S_2(t) = e^{\frac{1}{2}tA} e^{tB} e^{\frac{1}{2}tA} + o(t^3) \quad (2.6)$$

На самом деле, интегратор $S_2(t)$ является симметричным. Доказательство данного факта приведено в статье [15], а также доказательство того, что симметричное выражение (2.6) может быть приведено при помощи формулы Бейкера — Кэмпбелла — Хаусдорфа к виду

$$S_2(t) = e^{t\alpha_1 + t^3\alpha_3 + t^5\alpha_5 + \dots}, \quad (2.7)$$

где $\alpha_1 = A + B$, $\alpha_3, \alpha_5, \dots$ - это различные коммутаторы операторов A и B , $\alpha_2 = \alpha_4 = \alpha_6 = \dots = 0$. Этим фактом можно воспользоваться для построения интеграторов порядка $n = 4, n = 6, n = 8$ и так далее. Так, если построить $S_4(t)$ следующим образом:

$$S_4(t) = S_2(x_1 t) \cdot S_2(x_0 t) \cdot S_2(x_1 t), \quad (2.8)$$

где x_1, x_0 - величины, которые необходимо определить, то построенный таким образом интегратор 4-го порядка будет удовлетворять выражению $e^{t(A+B)+O(t^5)}$. Задача нахождения констант упростилась. Умножим операторы:

$$S_4(t) = e^{x_1 t \alpha_1 + x_1^3 t^3 \alpha_3 + o(t^5)} \cdot e^{x_0 t \alpha_1 + x_0^3 t^3 \alpha_3 + o(t^5)} \cdot e^{x_1 t \alpha_1 + x_1^3 t^3 \alpha_3 + o(t^5)} = \\ e^{(x_0 + 2x_1)t \alpha_1 + (x_0^3 + 2x_1^3)t^3 \alpha_3 + o(t^5)}$$

Заметим, что данное выражение может быть приведено к виду $e^{t(A+B)+o(t^5)}$, если будут выполнены два условия:

$$x_0 + 2x_1 = 1, \quad x_0^3 + 2x_1^3 = 0$$

Решение:

$$x_0 \equiv -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}} \\ x_1 \equiv \frac{1}{2 - 2^{1/3}}$$

Найдем наборы констант C_1, \dots, C_k и D_1, \dots, D_k из x_0, x_1 :

$$S_4(t) = \prod_{i=1}^4 e^{C_i t A} e^{D_i t B} = S_2(x_1 t) \cdot S_2(x_0 t) \cdot S_2(x_1 t) = \\ e^{\frac{1}{2}x_1 t A} e^{x_1 t B} e^{\frac{1}{2}x_1 t A} e^{\frac{1}{2}x_0 t A} e^{x_0 t B} e^{\frac{1}{2}x_0 t A} e^{\frac{1}{2}x_1 t A} e^{x_1 t B} e^{\frac{1}{2}x_1 t A} = \\ e^{\frac{1}{2}x_1 t A} e^{x_1 t B} e^{\frac{1}{2}(x_1 + x_0)t A} e^{x_0 t B} e^{\frac{1}{2}(x_0 + x_1)t A} e^{x_1 t B} e^{\frac{1}{2}t A}$$

Отсюда

$$C_1 = C_4 = \frac{x_1}{2}, \quad C_2 = C_3 = \frac{x_0 + x_1}{2} \quad (2.9)$$

$$D_1 = D_3 = x_1, \quad D_2 = x_0, \quad D_4 = 0 \quad (2.10)$$

Рассмотрим интегратор 6-го порядка:

$$S_6(t) = S_4(y_1 t) \cdot S_4(y_0 t) \cdot S_4(y_1 t), \quad (2.11)$$

где

$$S_4(t) = e^{t\alpha_1 + t^5\tilde{\alpha}_5 + o(t^7)}$$

Раскроем выражение (2.11):

$$S_6(t) = e^{y_1 t\alpha_1 + y_1^5 t^5\tilde{\alpha}_5 + o(t^7)} \cdot e^{y_0 t\alpha_1 + y_0^5 t^5\tilde{\alpha}_5 + o(t^7)} \cdot e^{y_1 t\alpha_1 + y_1^5 t^5\tilde{\alpha}_5 + o(t^7)} = \\ e^{(y_0 + 2y_1)t\alpha_1 + (y_0^5 + 2y_1^5)t^5\tilde{\alpha}_5 + o(t^7)}$$

Данное выражение может быть приведено к виду $e^{t(A+B)+o(t^7)}$, если будут выполнены следующие условия:

$$y_0 + 2y_1 = 1, \quad y_0^5 + 2y_1^5 = 0$$

То есть при

$$y_0 = -\frac{2^{1/5}}{2 - 2^{1/5}}, \quad y_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/5}}$$

Правую часть выражения (2.11) можно раскрыть, используя интеграторы порядка ниже в (2.8), таким образом мы получим комбинацию

$$S_6(t) = S_4(y_1 t) \cdot S_4(y_0 t) \cdot S_4(y_1 t) = S_2(x_1 y_1 t) S(x_0 y_1 t) S_2(x_1 y_1 t) \cdot \\ S_2(x_1 y_0 t) S_2(x_0 y_0 t) S_2(x_1 y_0 t) \cdot S_2(x_1 y_1 t) S(x_0 y_1 t) S_2(x_1 y_1 t)$$

Найдем наборы констант $C_1, \dots, C_k, D_1, \dots, D_k$:

$$\begin{aligned}
S_6(\tau) &= \prod_{i=1}^{10} e^{C_i \tau A} e^{D_i \tau B} = \\
&e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} \cdot e^{\frac{1}{2}x_0 y_1 \tau A} e^{x_0 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_0 y_1 \tau A} \cdot e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} \cdot \\
&e^{\frac{1}{2}x_1 y_0 \tau A} e^{x_1 y_0 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_0 \tau A} \cdot e^{\frac{1}{2}x_0 y_0 \tau A} e^{x_0 y_0 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_0 y_0 \tau A} \cdot e^{\frac{1}{2}x_1 y_0 \tau A} e^{x_1 y_0 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_0 \tau A} \cdot \\
&e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} \cdot e^{\frac{1}{2}x_0 y_1 \tau A} e^{x_0 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_0 y_1 \tau A} \cdot e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} = \\
&e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} \cdot e^{(\frac{1}{2}x_1 y_1 + \frac{1}{2}x_0 y_1) \tau A} e^{x_0 y_1 \tau B} \cdot e^{(\frac{1}{2}x_0 y_1 + \frac{1}{2}x_1 y_1) \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} \cdot \\
&e^{(\frac{1}{2}x_1 y_1 + \frac{1}{2}x_1 y_0) \tau A} e^{x_1 y_0 \tau B} \cdot e^{(\frac{1}{2}x_1 y_0 + \frac{1}{2}x_0 y_0) \tau A} e^{x_0 y_0 \tau B} \cdot e^{(\frac{1}{2}x_0 y_0 + \frac{1}{2}x_1 y_0) \tau A} e^{x_1 y_0 \tau B} \cdot \\
&e^{(\frac{1}{2}x_1 y_0 + \frac{1}{2}x_1 y_1) \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} \cdot e^{(\frac{1}{2}x_1 y_1 + \frac{1}{2}x_0 y_1) \tau A} e^{x_0 y_1 \tau B} \cdot e^{(\frac{1}{2}x_0 y_1 + \frac{1}{2}x_1 y_1) \tau A} e^{x_1 y_1 \tau B} e^{\frac{1}{2}x_1 y_1 \tau A}
\end{aligned}$$

Имеем 19 слагаемых, с помощью которых определяются наборы коэффициентов. Коэффициенты приведены в таблице 2.1. Кроме того, вычислим каждый коэффициент и приведем его численное значение. Именно в таком виде данные коэффициенты будут задаваться в программе, что сэкономит вычисления. Задание коэффициентов в программе в аналитическом виде не рекомендуется, поскольку вызов функции возведения в степень на каждой итерации является дорогостоящим.

Таблица 2.1

Наборы коэффициентов для интегратора $n = 6$

Коэффициент	Значение	Численное значение
C_1	$\frac{1}{2}x_1 y_1$	0.7936124638611216
C_2	$\frac{1}{2}(x_1 y_1 + x_0 y_1)$	-0.20627658481643985
C_3	$\frac{1}{2}(x_0 y_1 + x_1 y_1)$	-0.20627658481643985
C_4	$\frac{1}{2}(x_1 y_1 + x_1 y_0)$	-0.11800886788129283
C_5	$\frac{1}{2}(x_1 y_0 + x_0 y_0)$	0.2369495736530507
C_6	$\frac{1}{2}(x_0 y_0 + x_1 y_0)$	0.2369495736530507
C_7	$\frac{1}{2}(x_1 y_0 + x_1 y_1)$	-0.11800886788129283
C_8	$\frac{1}{2}(x_1 y_1 + x_0 y_1)$	-0.20627658481643985
C_9	$\frac{1}{2}(x_0 y_1 + x_1 y_1)$	-0.20627658481643985
C_{10}	$\frac{1}{2}x_1 y_1$	0.7936124638611216
D_1	$x_1 y_1$	1.5872249277222432
D_2	$x_0 y_1$	-1.999778097355123
D_3	$x_1 y_1$	1.5872249277222432
D_4	$x_1 y_0$	-1.8232426634848289
D_5	$x_0 y_0$	2.2971418107909303
D_6	$x_1 y_0$	-1.8232426634848289
D_7	$x_1 y_1$	1.5872249277222432

D_8	x_0y_1	-1.999778097355123
D_9	x_1y_1	1.5872249277222432
D_{10}	0	0

2.5. Адаптация симплектических интеграторов для системы уравнений движения тела-точки

Рассмотрим симплектические интеграторы применительно к решению системы дифференциальных уравнений движения тела-точки. Разностная схема для вычисления (R_i, v_i, ω_i) по $(R_{i-1}, v_{i-1}, \omega_{i-1})$ будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \underline{R}_{i-1}^{(1)} &= \underline{R}_{i-1} + C_1 \underline{v}_{i-1} h \\
 \underline{v}_{i-1}^{(1)} &= \underline{v}_{i-1} - D_1 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AJ}{(R_{i-1}^{(1)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(1)} - B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{\omega}_{i-1}^{(1)} &= \underline{\omega}_{i-1} - D_1 \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AB}{(R_{i-1}^{(1)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(1)} + mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\
 \underline{R}_{i-1}^{(k-1)} &= \underline{R}_{i-1}^{(k-2)} + C_{k-1} \underline{v}_{i-1}^{(k-2)} h \\
 \underline{v}_{i-1}^{(k-1)} &= \underline{v}_{i-1}^{(k-2)} - D_{k-1} \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AJ}{(R_{i-1}^{(k-1)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(k-1)} - B^2 \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 \underline{\omega}_{i-1}^{(k-1)} &= \underline{\omega}_{i-1}^{(k-2)} - D_{k-1} \frac{1}{(mJ - B^2)} \left[\frac{AB}{(R_{i-1}^{(k-1)})^3} \underline{R}_{i-1}^{(k-1)} + mB \underline{\omega}_{i-1} \times \underline{v}_{i-1} \right] h \\
 &\left\{ \begin{aligned} \underline{R}_i &= \underline{R}_{i-1}^{(k)} = \underline{R}_{i-1}^{(k-1)} + c_k \underline{v}_{i-1}^{(k-1)} h \\ \underline{v}_i &= \underline{v}_{i-1}^{(k)} = \underline{v}_{i-1}^{(k-1)} \\ \underline{\omega}_i &= \underline{\omega}_{i-1}^{(k)} = \underline{\omega}_{i-1}^{(k-1)}, \end{aligned} \right. \tag{2.12}
 \end{aligned}$$

где k - количество шагов, на которое делится один общий шаг интегрирования h ($k = 4$ для интегратора 4-го порядка, $k = 10$ для шестого и $k =$ для восьмого), $C_1, \dots, C_k, D_1, \dots, D_k$ - наборы коэффициентов, которые мы вычислили при построении интеграторов.

В литературе полученные методы имеют свои названия:

- **Симплектический метод Эйлера** ($n = 1$) - это интегратор первого порядка с количеством промежуточных шагов $k = 1$ и коэффициентами $C_1 = D_1 = 1$. Также называется как полуявный метод Эйлера (Semi-implicit Euler method).
- **Метод Верле** ($n = 2$) - это хорошо известный интегратор второго порядка с количеством промежуточных шагов $k = 2$ и коэффициентами $C_1 = 0, C_2 = 1, D_1 = D_2 = 1/2$.
- **Симплектический интегратор 3-го порядка** ($n = 3$) - метод, построенный Рональдом Руттом в 1983 году. Количество промежуточных шагов $k = 3$, а одно из многочисленных решений для набора коэффициентов:

$$C_1 = 1, C_2 = -2/3, C_3 = 2/3, D_1 = -1/24, D_2 = 3/4, D_3 = 7/24$$

- **Симплектический интегратор 4-го порядка** ($n = 4$) - данный интегратор с количеством промежуточных шагов $k = 4$ опубликован Форестом и Руттом в 1990 году. Наборы коэффициентов имеют вид (2.9) и (2.10).

2.6. Выводы

Таким образом, для системы уравнений движения тела-точки в кулоновском поле были составлены различные разностные схемы интегрирования, в том числе рассмотрены симплектические интеграторы высокого порядка применительно к задаче.

В следующей главе будут рассмотрены результаты численного решения. Реализации алгоритмов рассмотренных численных методов на языке Java доступны по ссылке <https://github.com/axothy/Body-point-dynamics/tree/main/src/main/java/ru/axothy/mechanics/equationsolvers>.

ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Результаты численного решения дают вполне ожидаемый результат - траектория движения тела-точки представляет из себя винтовую линию.

3.1. Анимация движения тела-точки и интерфейс приложения

В приложении реализована возможность наблюдения за анимацией движения тела-точки. На рисунке ниже приведен пример пользовательского интерфейса.

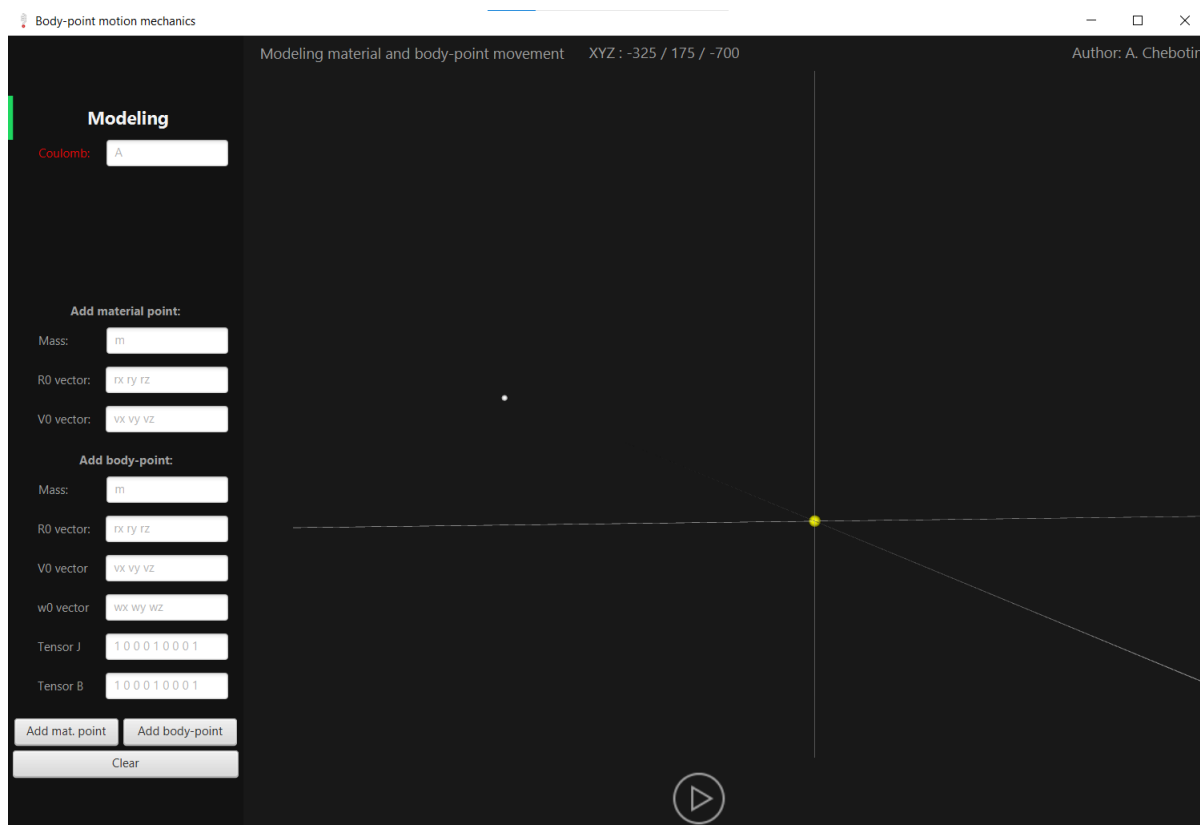


Рис.3.1. Интерфейс приложения для моделирования движения тела-точки

Интерфейс позволяет добавить на кулоновское поле тело-точку (а также материальную точку) в произвольном месте, задав массу, тензоры инерции и начальные условия. После этого можно выбрать схему интегрирования из пакета численных программ, встроенного в приложение, задать величину шага интегрирования h и количество шагов. На рисунке ниже приведен кадр из примера анимации. (Желтым выделен кулоновский центр, белым - тело-точка, все размеры объектов на экране фиктивные).

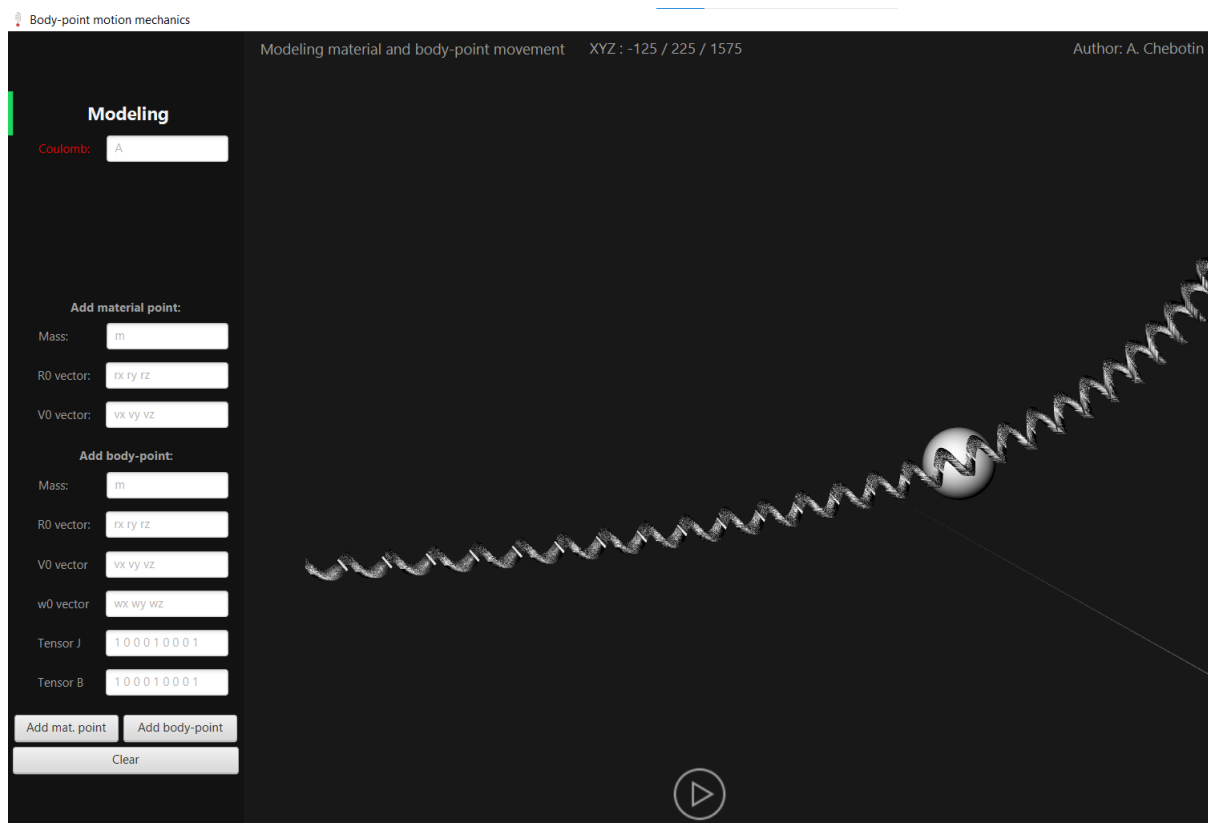


Рис.3.2. Кадр из анимации

Приложение допускает добавление произвольного количества тел-точек. Также в функционал входит возможность записи векторов решения и значений первых интегралов в файл.

3.2. Численные решения и энергия, полученные разными схемами

Рассмотрим более подробно графики радиус-вектора тела-точки. Зададимся следующими параметрами:

Таблица 3.1

Выбранные параметры для решения задачи

Параметр	Значение
A	-2
m	1
$\underline{\underline{J}}$	$\underline{\underline{E}}$
$\underline{\underline{B}}$	$0.7\underline{\underline{E}}$
$\underline{\underline{K}}_1(0)$	$5\underline{\underline{i}}$
$\underline{\underline{K}}_2(0)$	$-5\underline{\underline{k}} + 2\underline{\underline{i}}$
$\underline{\underline{R}}(0)$	$9\underline{\underline{j}} - 200\underline{\underline{i}}$
d	10

L	200
h	0.0001
n	500000

Траектория получилась следующей:

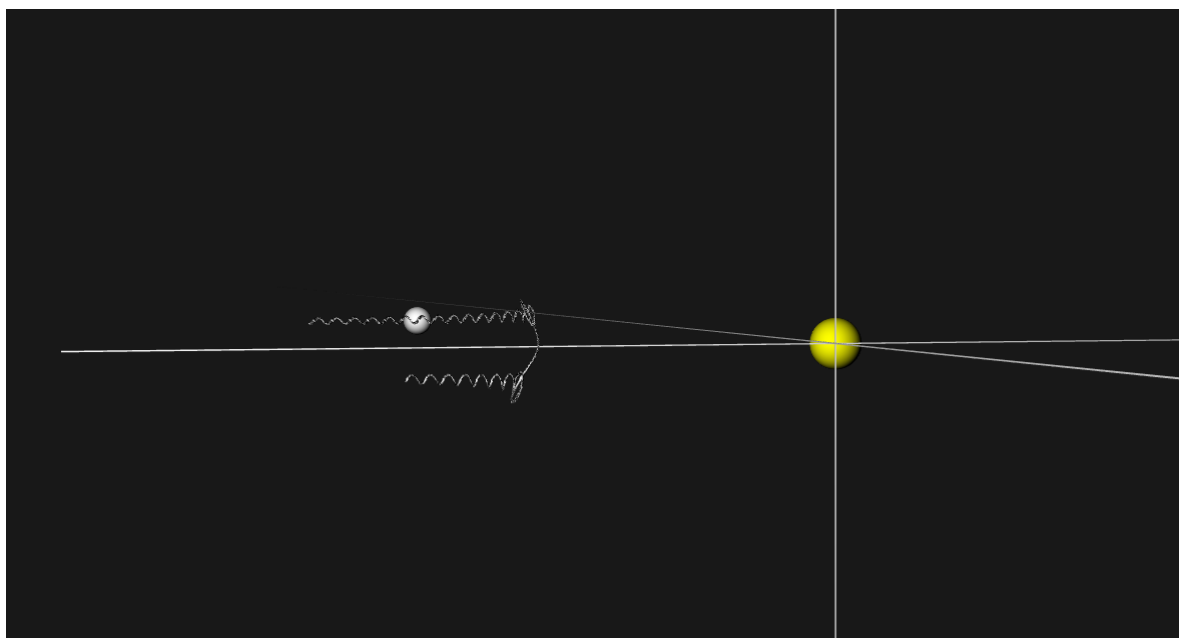


Рис.3.3. Кадр из анимации, $h = 0.0001$

Построим более подробный график в соответствии с различными схемами интегрирования:

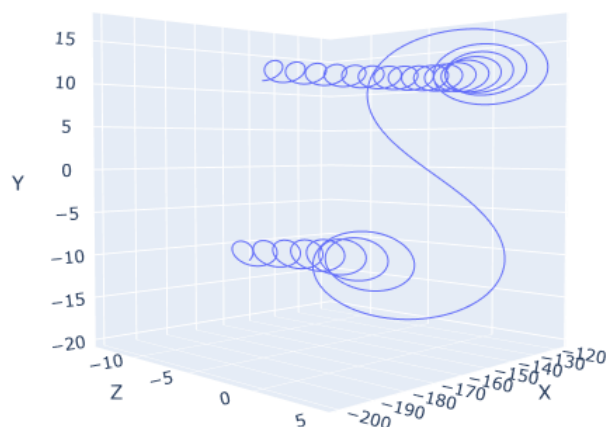


Рис.3.4. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, метод Рунге-Кутты 4-го порядка

А также построим график энергии системы:

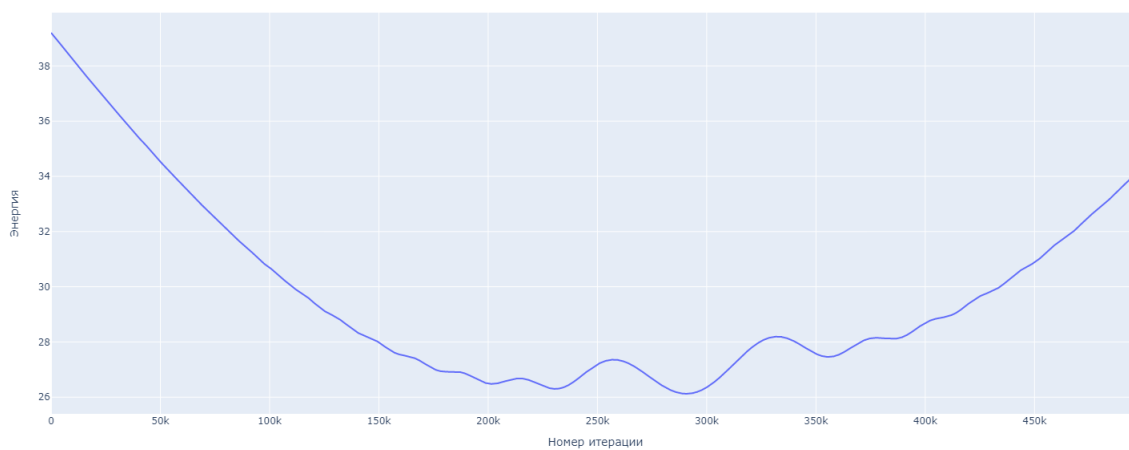


Рис.3.5. График энергии системы, $h = 0.0001$, метод Рунге-Кутты 4-го порядка

Теперь приведем аналогичные графики для остальных методов.

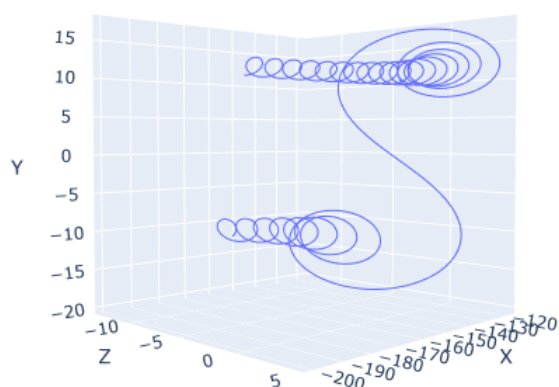


Рис.3.6. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, метод Адамса-Башфорта 4-го порядка

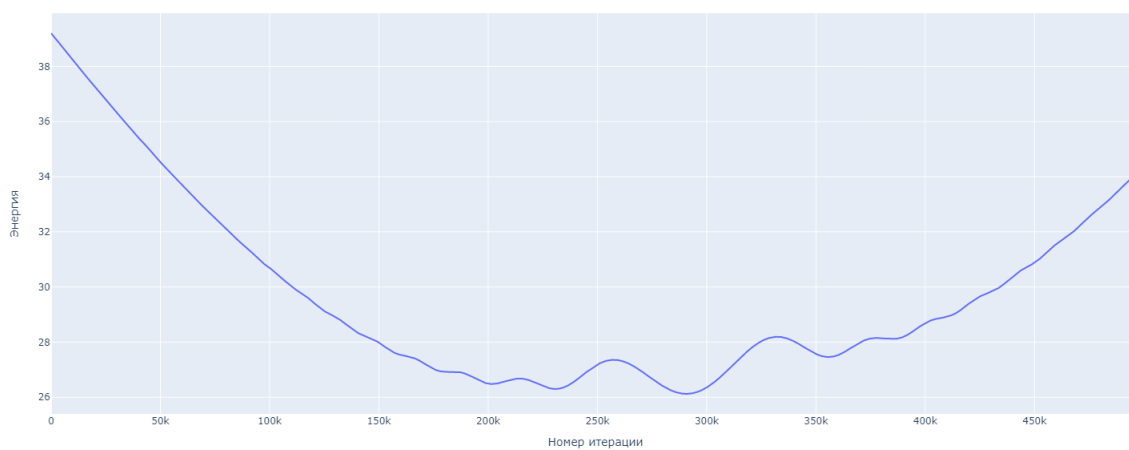


Рис.3.7. График энергии системы, $h = 0.0001$, метод Адамса-Башфорта 4-го порядка

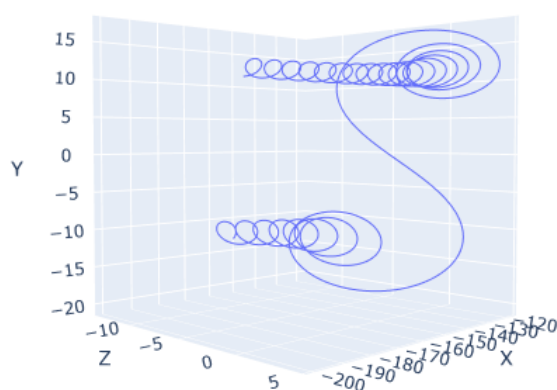


Рис.3.8. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод Эйлера 1-го порядка

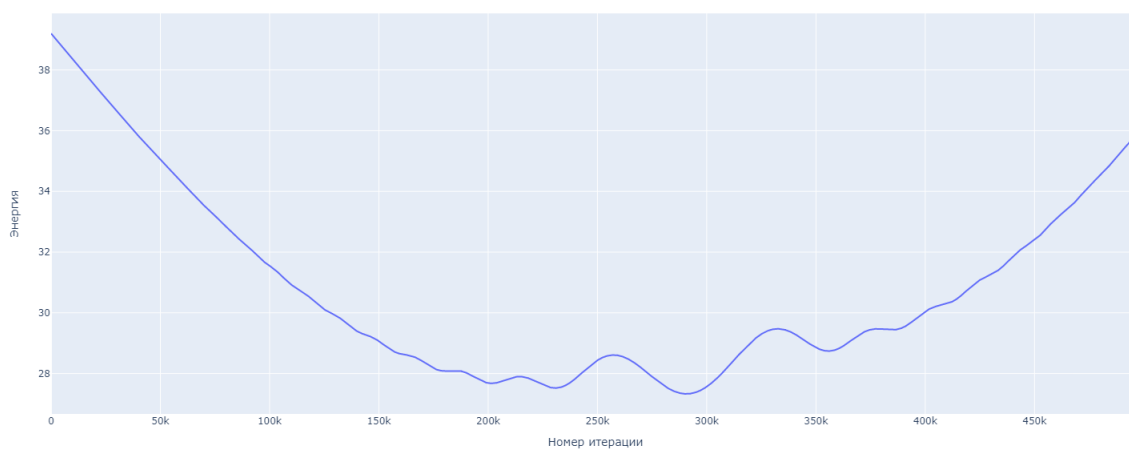


Рис.3.9. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод Эйлера 1-го порядка

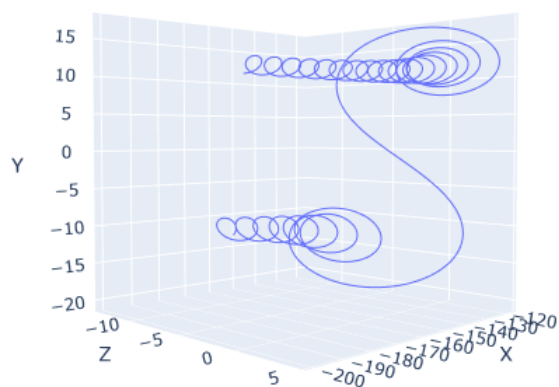


Рис.3.10. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, метод Верле 2-го порядка

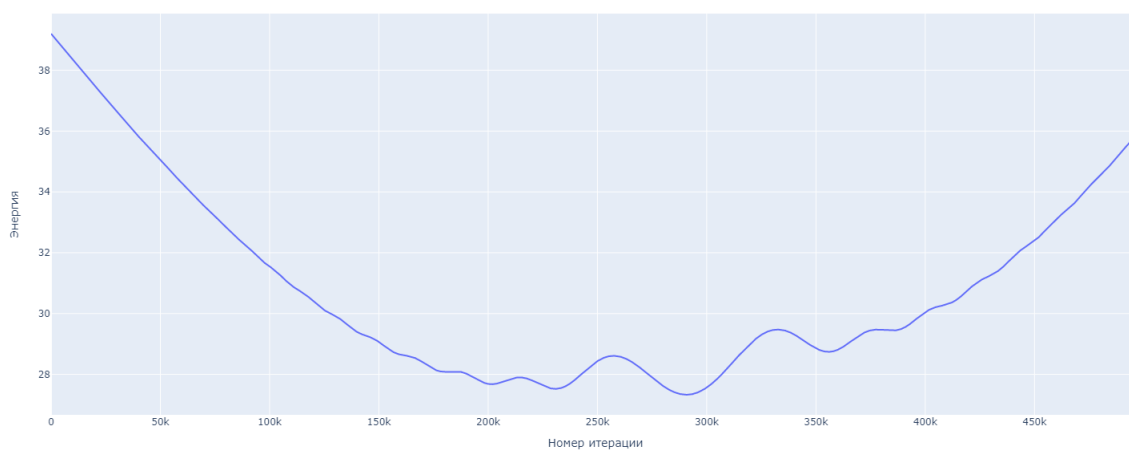


Рис.3.11. График энергии системы, $h = 0.0001$, метод Верле 2-го порядка

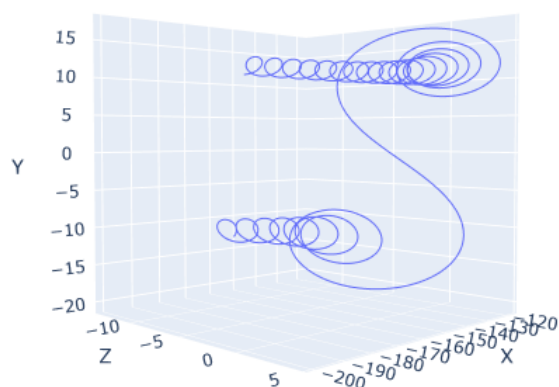


Рис.3.12. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод 3-го порядка

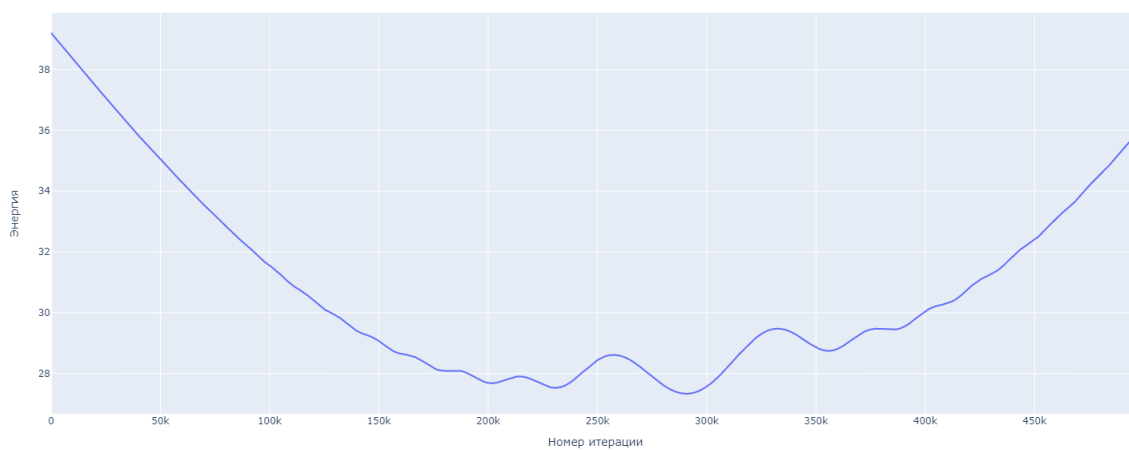


Рис.3.13. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод 3-го порядка

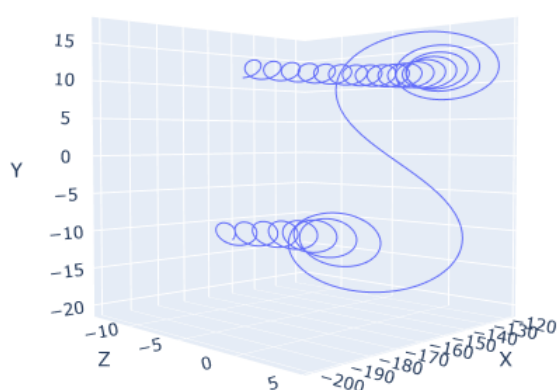


Рис.3.14. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод 4-го порядка

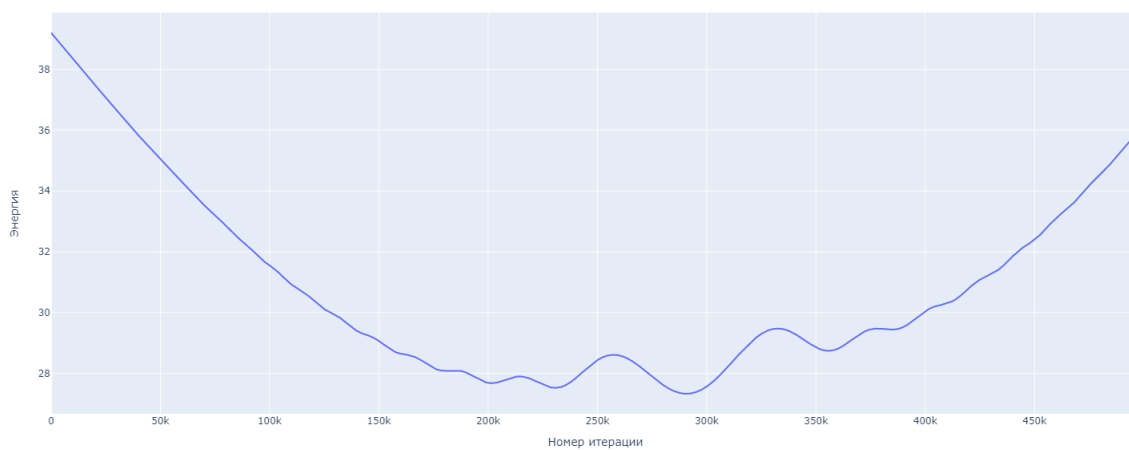


Рис.3.15. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод 4-го порядка

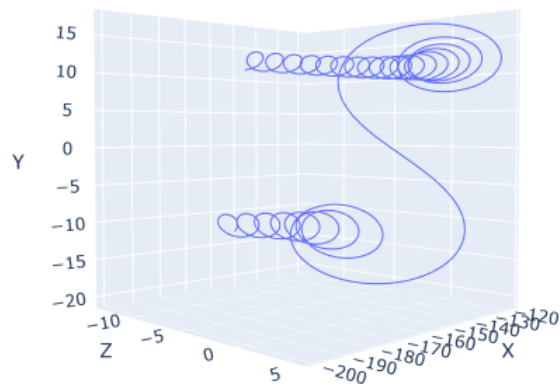


Рис.3.16. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод 6-го порядка

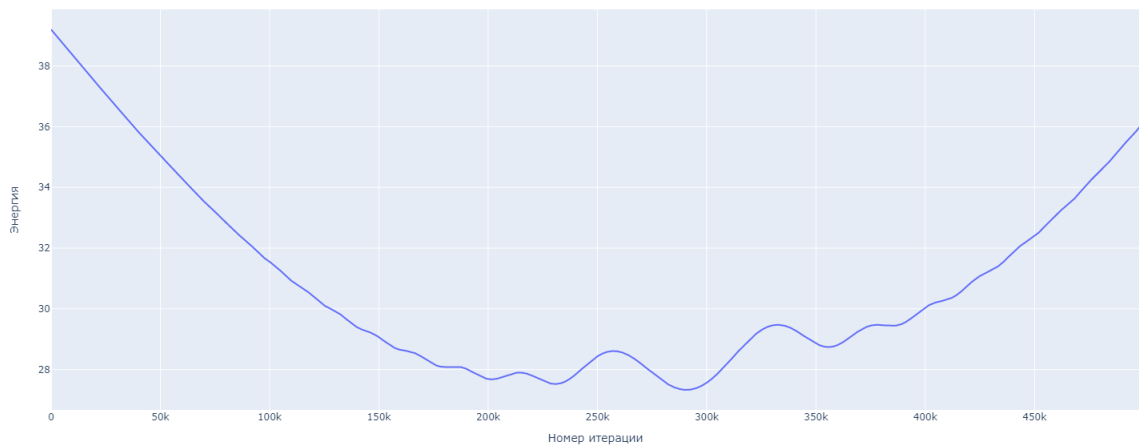


Рис.3.17. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод 6-го порядка

Теперь увеличим прицельное расстояние d до 50. Посмотрим на результат.

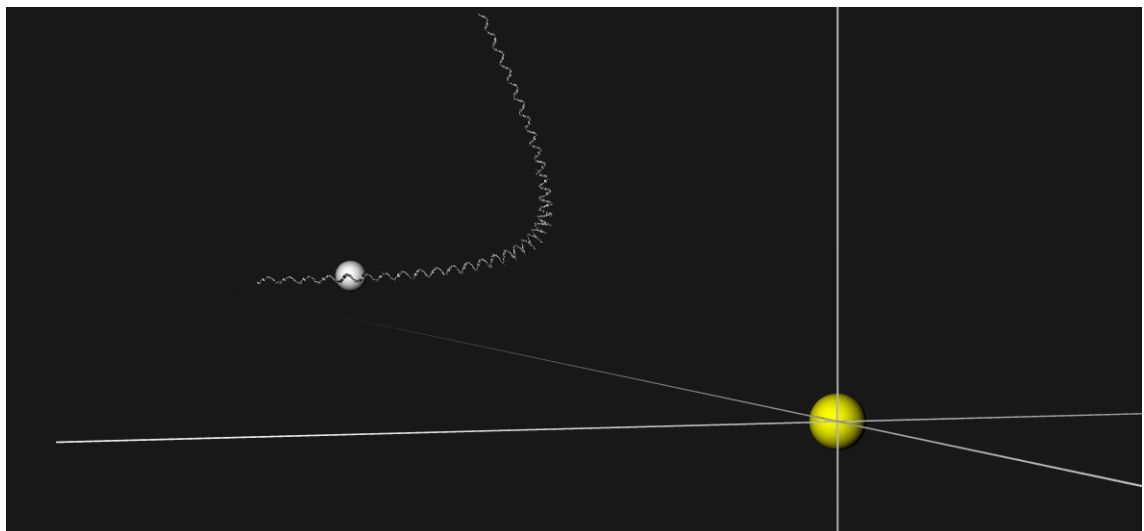


Рис.3.18. Кадр из анимации, $h = 0.0001$, $d = 50$

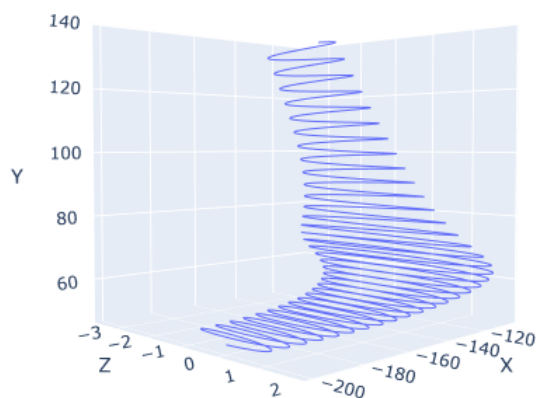


Рис.3.19. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, метод Рунге-Кутты 4-го порядка

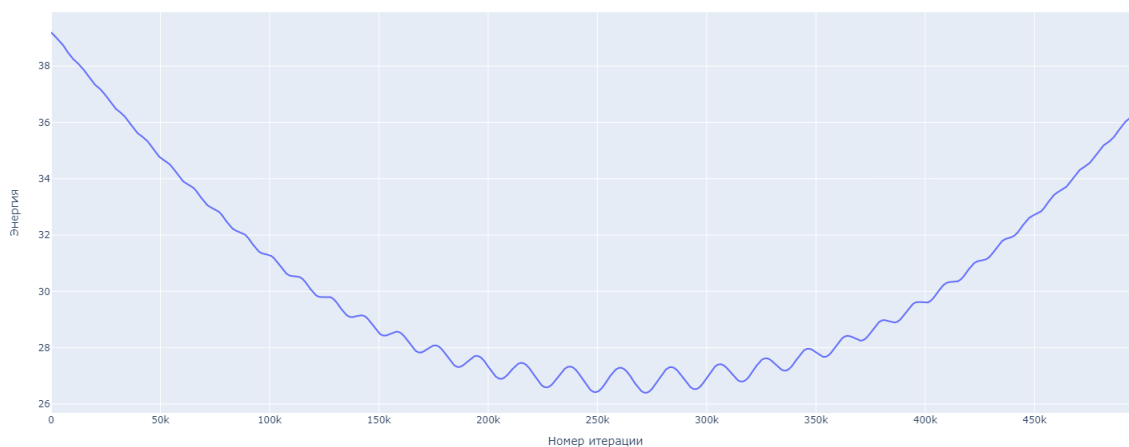


Рис.3.20. График энергии системы, $h = 0.0001$, метод Рунге-Кутты 4-го порядка

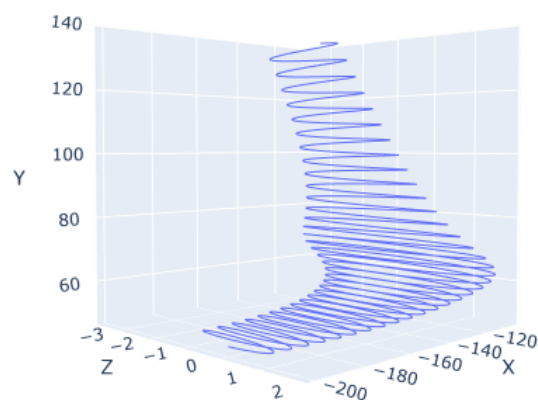


Рис.3.21. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, метод Адамса-Башфорта 4-го порядка

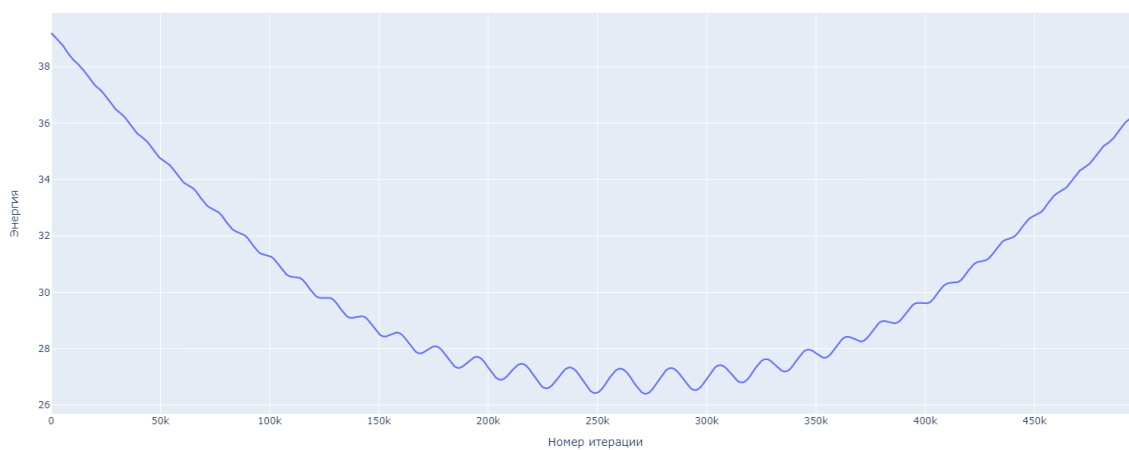


Рис.3.22. График энергии системы, $h = 0.0001$, метод Адамса-Башфорта 4-го порядка

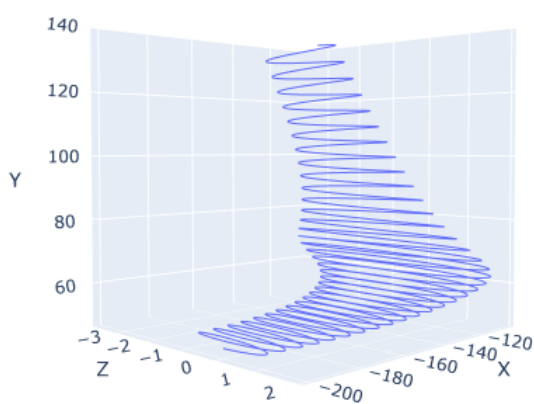


Рис.3.23. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод Эйлера 1-го порядка

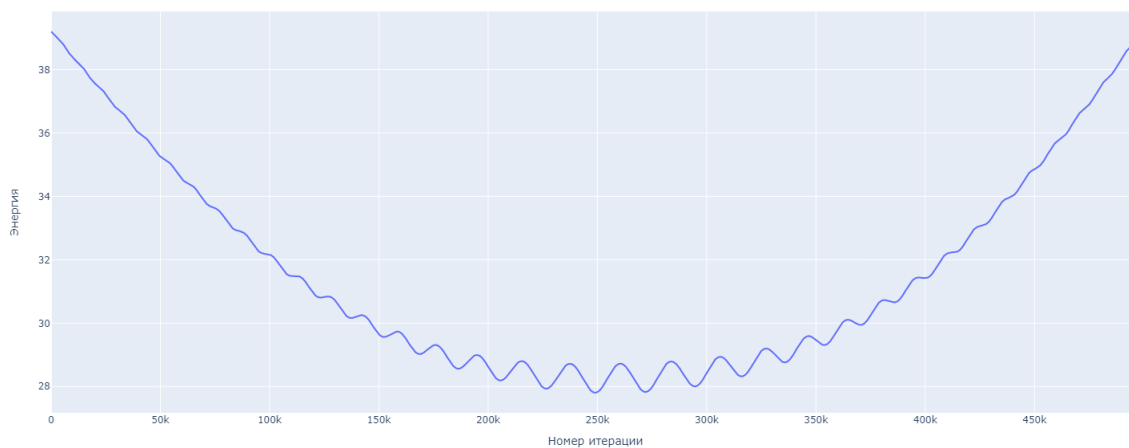


Рис.3.24. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод Эйлера 1-го порядка

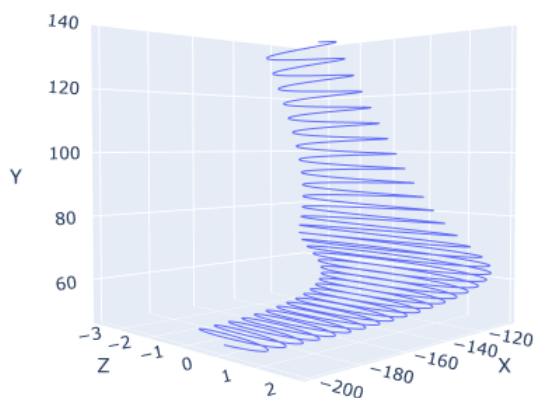


Рис.3.25. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, метод Верле 2-го порядка

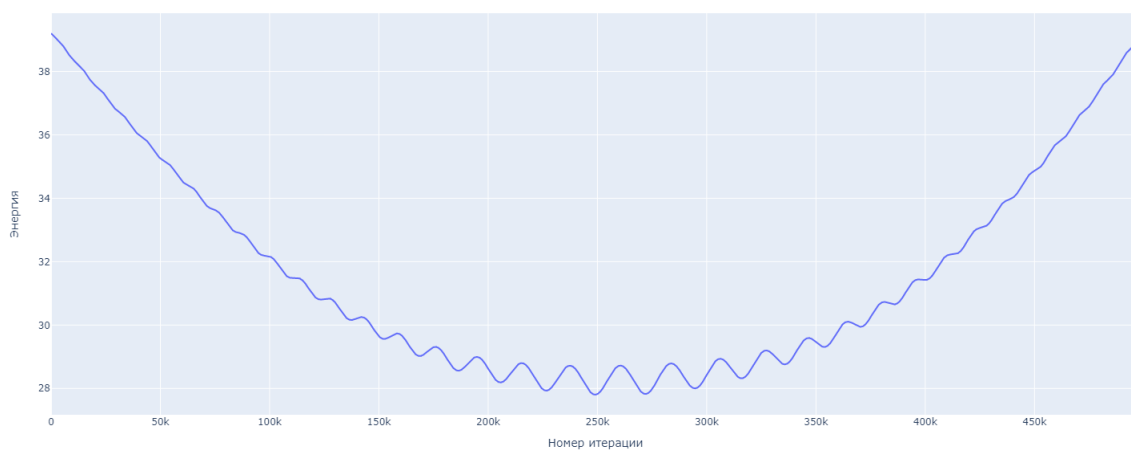


Рис.3.26. График энергии системы, $h = 0.0001$, метод Верле 2-го порядка

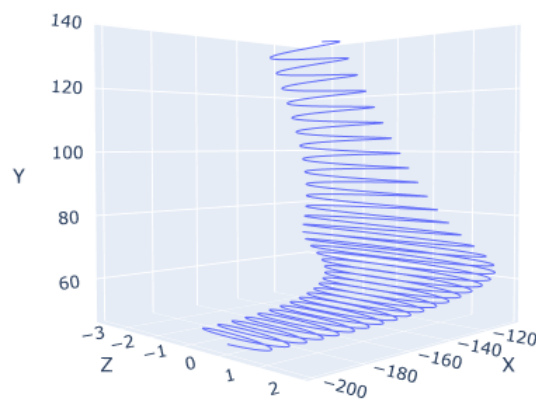


Рис.3.27. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод 3-го порядка

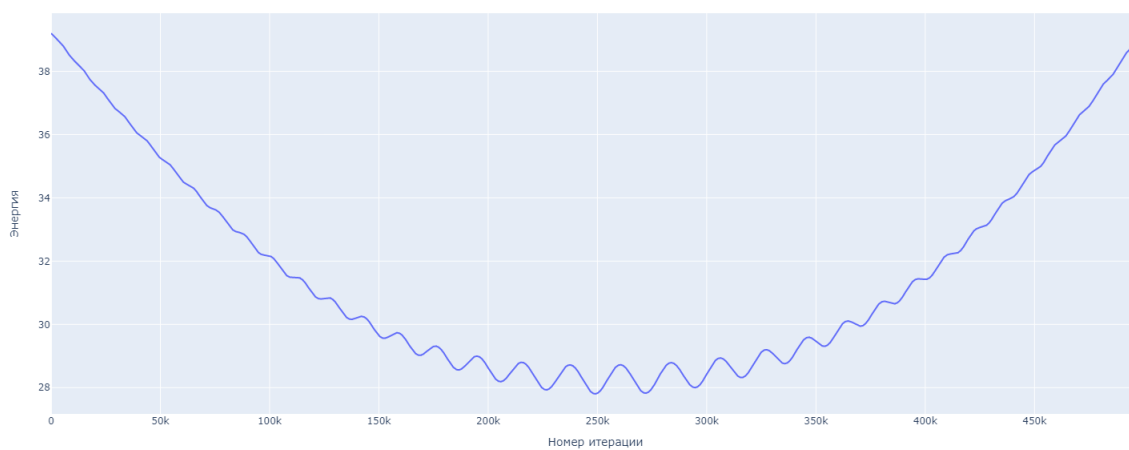


Рис.3.28. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод 3-го порядка

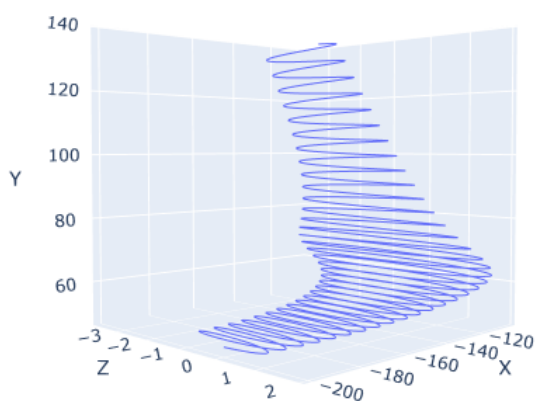


Рис.3.29. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод 4-го порядка

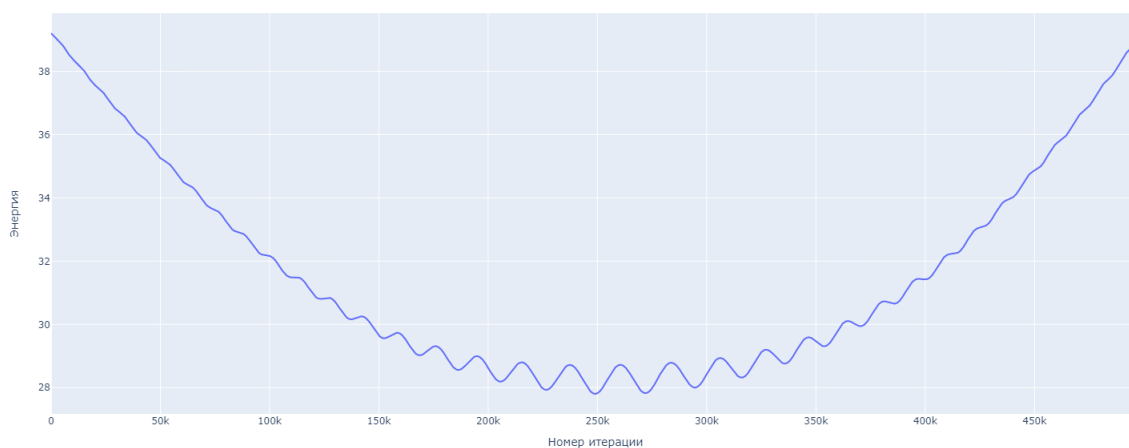


Рис.3.30. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод 4-го порядка

В приложении 1 приведены траектории тел-точек при различных параметрах. Перейдем к подробному исследованию численных методов.

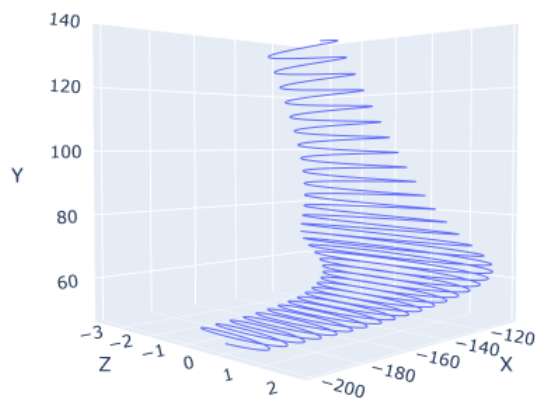


Рис.3.31. Радиус-вектор тела-точки, $h = 0.0001$, симплектический метод 6-го порядка

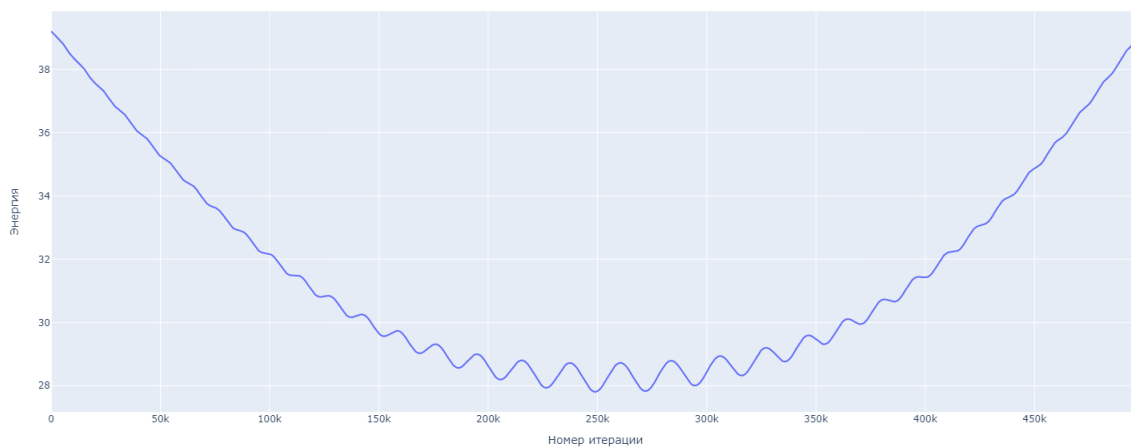


Рис.3.32. График энергии системы, $h = 0.0001$, симплектический метод 6-го порядка

ГЛАВА 4. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из приведенных графиков решений мы можем сделать вывод, что требуется количественное сравнение методов. Проведем для этого ряд исследований:

- График максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении шага интегрирования;
- График максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении прицельного расстояния d ;
- График максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении расстояния L ;
- График времени выполнения метода от шага интегрирования для всех методов.

А также дополнительно исследуем сохраняемость первого интеграла K_2^2 , построив таким образом

- График максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении шага интегрирования;
- График максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении параметра K_x в начальном условии для собственного кинетического момента $\underline{K}_2(0)$.

Наша задача - определить, какие методы работают лучше при тех или иных условиях.

4.1. Зависимость относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении прицельного расстояния d

Рассмотрим, как хорошо сохраняется энергия в зависимости от прицельного расстояния $d > 0$. Чем меньше прицельное расстояние, тем ближе тело-точка будет находиться к кулоновскому центру по оси Oy . При этом расстояние L меняться не будет. Полная энергия системы:

$$E = \frac{1}{2} m \underline{v} \cdot \underline{v} + \frac{B}{2} \underline{v} \cdot \underline{\omega} + \frac{1}{2} \underline{J} \underline{\omega} \cdot \underline{\omega} - \frac{A}{R} \quad (4.1)$$

На каждом шаге будем сохранять значение энергии. Затем будем вычислять максимальное относительное отклонение энергии от первоначального значения:

$$\max \left(\frac{|E_i - E_0|}{E_0} \right)$$

На графике (4.1) приведено сравнение для семи методов. Параметры для задачи взяты из табл. 3.1, прицельное расстояние в данном случае будет меняться от 5 до 200, шаг интегрирования $h = 0.0001$, $n = 250000$.

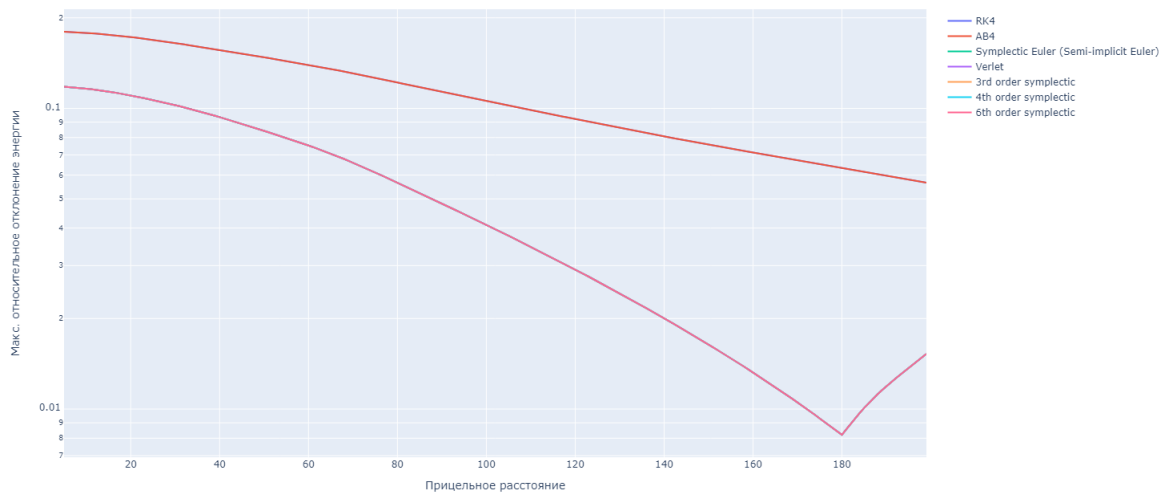


Рис.4.1. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения в зависимости от изменения прицельного расстояния d

Видно, что симплектические интеграторы имеют меньшее отклонение энергии от первоначального значения - кривые для метода Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта визуально совпали и расположены выше, кривые для симплектических методов тоже практически совпадают. Для наглядности, построим разности кривых для того, чтобы увидеть расхождение. Рассмотрим только симплектические интеграторы.

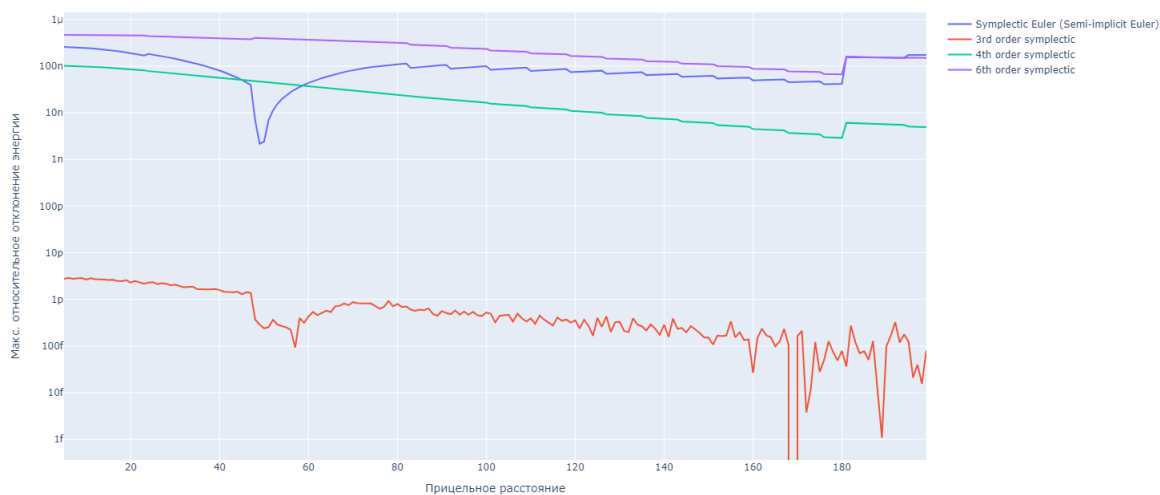


Рис.4.2. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения в зависимости от изменения прицельного расстояния d

Получаем, что симплектический интегратор 6-го порядка работает точнее в том смысле, что отклонение энергии минимальное для всех значений прицельного расстояния.

4.2. Зависимость относительного отклонения энергии от первоначального значения от расстояния L

Теперь рассмотрим зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении расстояния $L > 0$. Зададим фиксированное прицельное расстояние $d = 50$, шаг интегрирования $h = 0.0001$, $n = 250000$. Будем менять L от 5 до 1000 с шагом 5. Сравним методы.

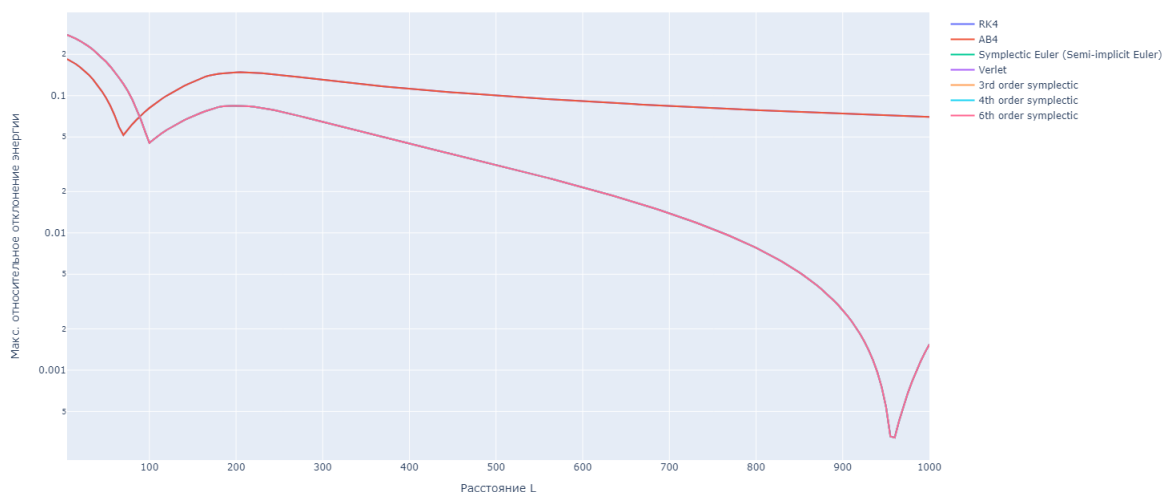


Рис.4.3. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении расстояния L

Из графика (4.3) можно заметить следующее: при близком прохождении тела-точки от кулоновского центра симплектические методы работают хуже, теряя свое преимущество перед стандартными схемами интегрирования - отклонение энергии больше, чем у метода Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта. Но при отдалении (увеличении расстояния L) симплектические методы работают лучше. Рассмотрим более подробно расхождения кривых для симплектических методов.

Из рисунка (4.4) видно, что интегратор 6-го порядка работает точнее. Также можно заметить, что симплектический метод Эйлера (полуявный метод Эйлера) обеспечивает хорошую точность, имея при этом первый порядок.

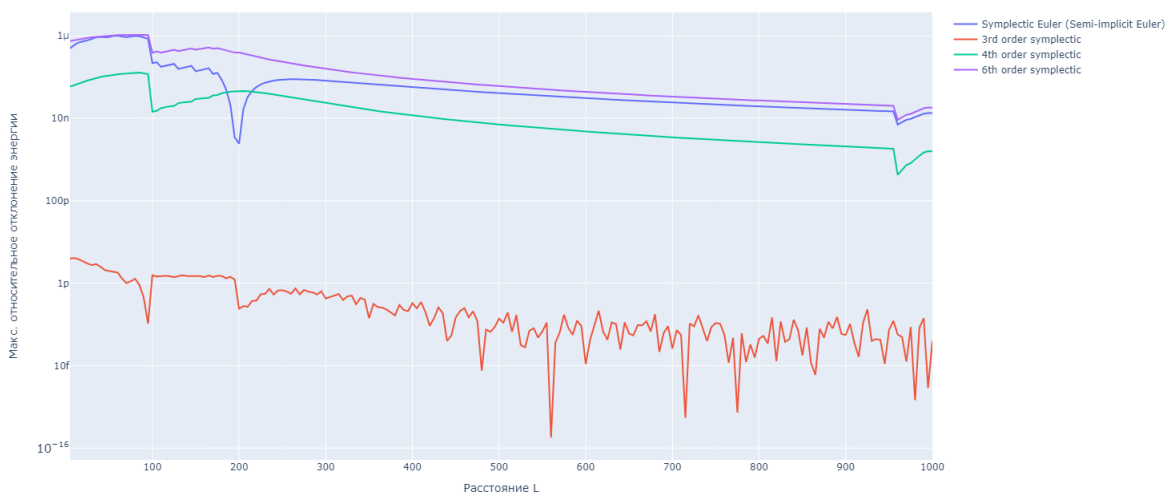


Рис.4.4. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении расстояния L

В целом, можно предложить следующую рекомендацию: при близком прохождении тела-точки возле кулоновского центра использовать переменный шаг интегрирования h . Автоматическое уменьшение шага интегрирования делает численную схему уникальной и устойчивой.

4.3. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении шага интегрирования h

Исследуем задачу при разных шагах интегрирования. Понятно, что чем "грубее" шаг, тем большее отклонение мы будем получать. Зададимся параметрами из табл. 3.1, прицельное расстояние $d = 50$, $L = 200$. Время моделирования $T = hn = 25$. Построим графики.

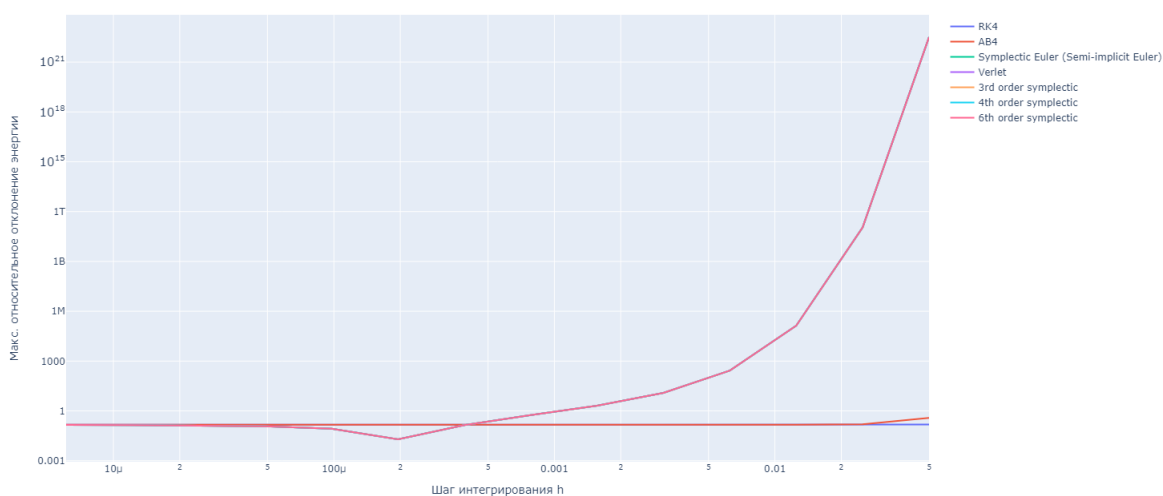


Рис.4.5. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении шага интегрирования h

Из рисунка (4.5) видим, что при грубых шагах интегрирования, отклонения энергии, которые дают симплектические методы, очень большие. Но при уменьшении шага интегрирования кривые симплектических методов начинают сливаться с кривыми методов Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта. Рассмотрим малые шаги интегрирования и построим соответствующий график.

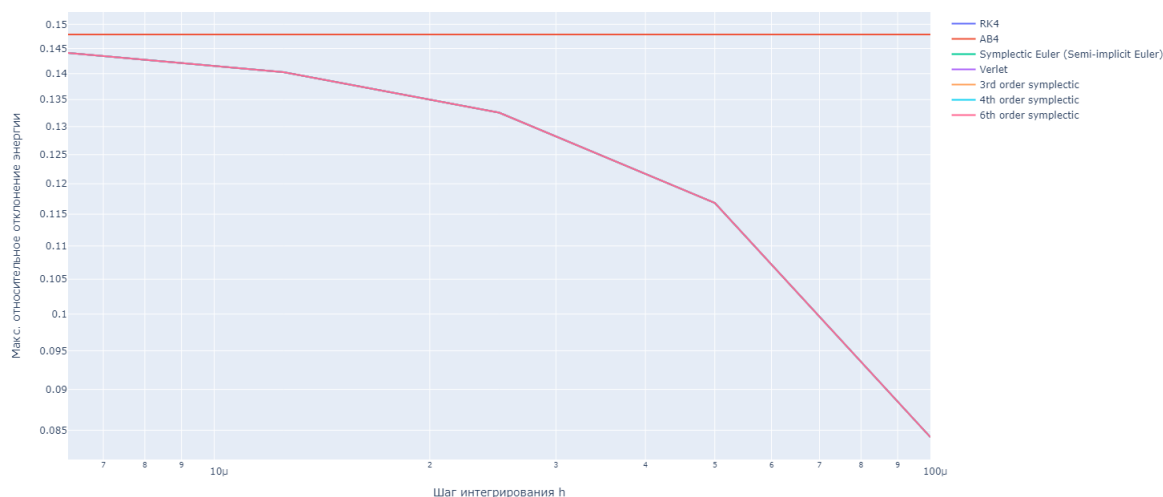


Рис.4.6. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при малых шагах интегрирования h

Из рисунка (4.7) видно, что при малых шагах интегрирования симплектические методы дают меньшее отклонение энергии - их кривые расположены ниже кривых метода Рунге-Кутты и метода Адамса-Башфорта. Рассмотрим также расхождения кривых симплектических методов.

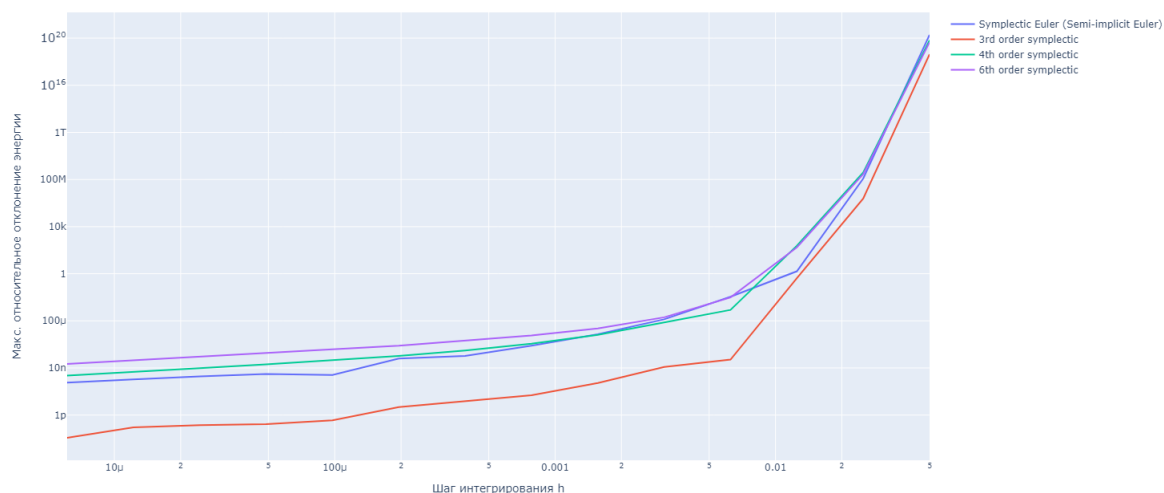


Рис.4.7. Зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении шага интегрирования h для симплектических методов

Видим, что симплектический интегратор 6-го порядка даёт наилучший результат.

4.4. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения в зависимости от шага интегрирования h

В работе [12] показано, что одним из первых интегралов системы (1.7) является также:

$$K_2^2 = const \quad (4.2)$$

Исследуем, насколько хорошо сохраняют численные схемы данный параметр. Зададимся теми же самыми параметрами, что и в предыдущем параграфе. Будем варьировать шаг интегрирования h .

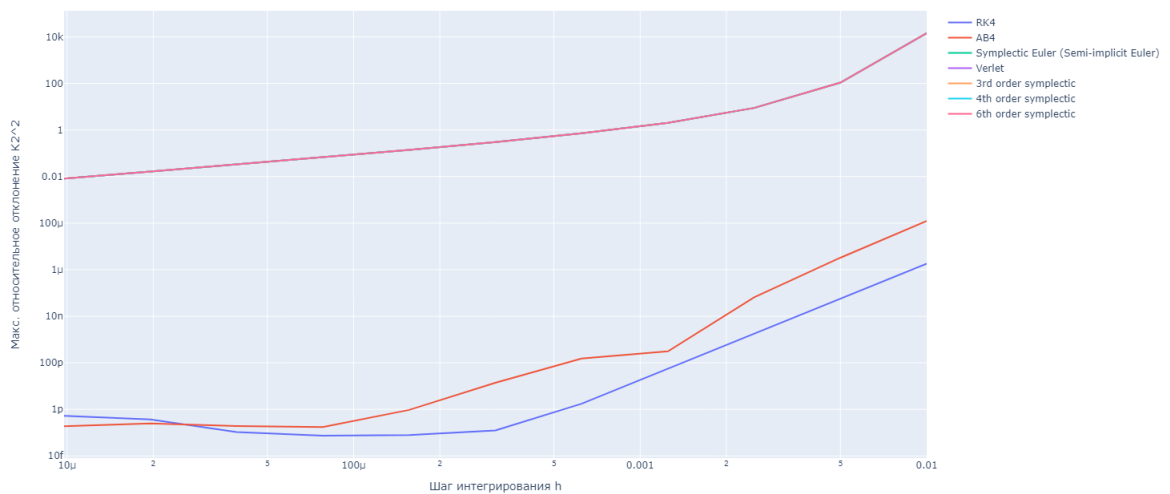


Рис.4.8. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении шага интегрирования h

Видим, что метод Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта лучше сохраняют параметр K_2^2 системы. Это связано с тем, что симплектические интеграторы прежде всего лучше сохраняют именно энергию системы и для этого разрабатывались.

Рассмотрим рисунок (4.9) - расхождение кривых. Видно, что симплектический интегратор 3-го порядка даёт наибольшее отклонение K_2^2 , в принципе как и в предыдущих исследованиях на отклонение энергии.

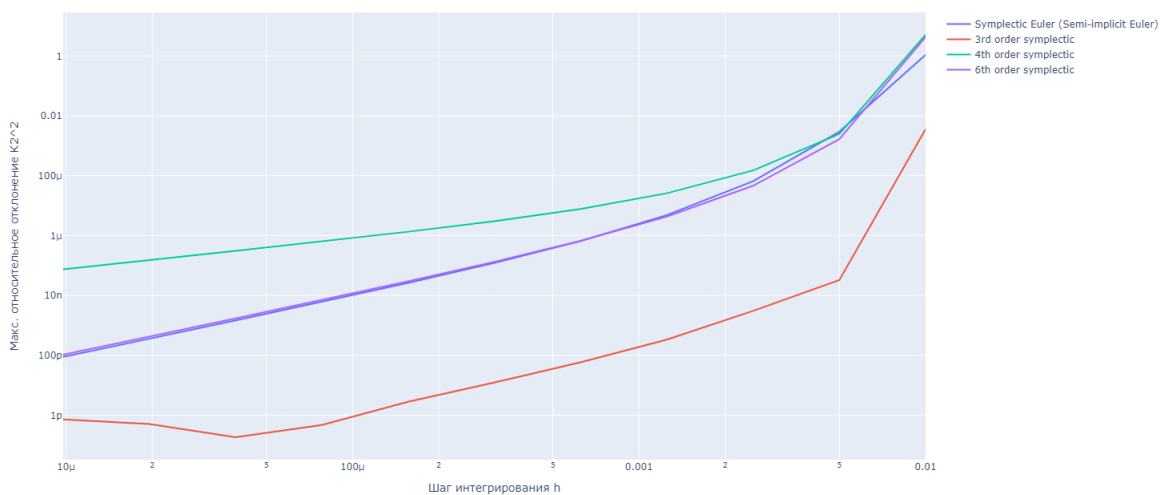


Рис.4.9. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении шага интегрирования h для симплектических методов

4.5. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении K_x

Напомним, что начальное условие для собственного кинетического момента \underline{K}_2 мы выбрали следующим:

$$\underline{K}_2(0) = -K_z \underline{k} + K_x \underline{i}, \quad K_z > 0$$

Теперь будем варьировать параметр $K_x \underline{i}$ и вычислять максимальное относительное отклонение K_2^2 от первоначального значения для всех методов.

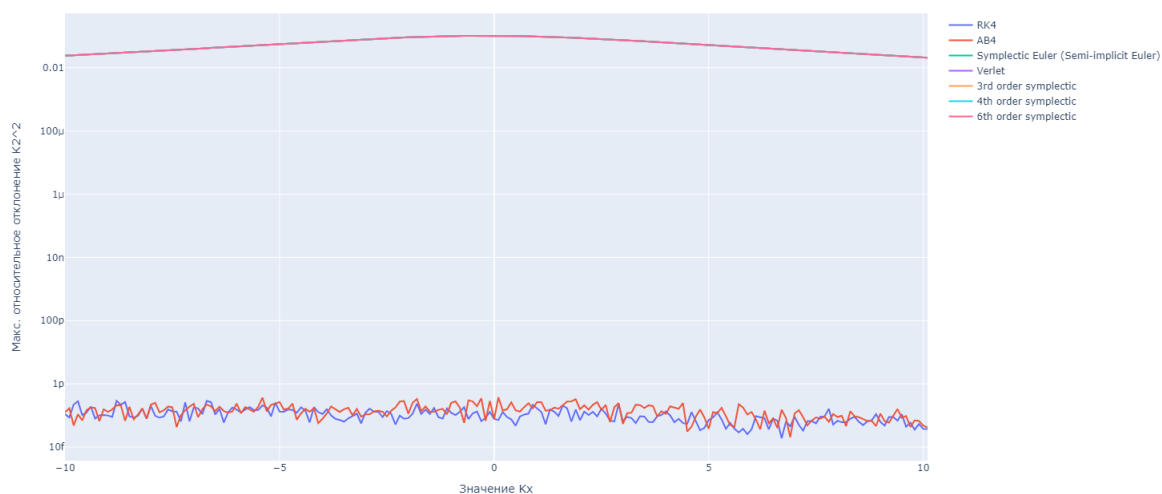


Рис.4.10. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении параметра K_x

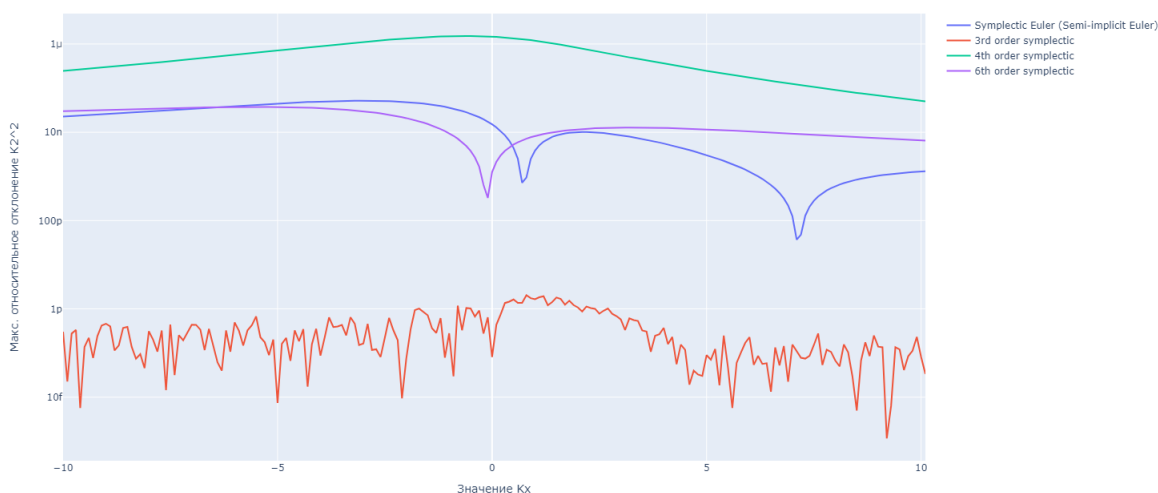


Рис.4.11. Зависимость максимального относительного отклонения K_2^2 от первоначального значения при изменении параметра K_x для симплектических методов

В этом случае методы Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта снова дают меньшее относительное отклонение.

4.6. Зависимость времени численного решения задачи о движении тела-точки в кулоновском поле от количества шагов n

Понятно, что разные численные методы имеют свою производительность. В основном скорость алгоритма зависит от количества вызовов целевой функции, которая может быть "дорогой". Ниже на таблице приведено количество вызовов правой части дифференциального уравнения за одну итерацию в соответствии с алгоритмами методов:

Таблица 4.1

Количество вызовов правой части уравнения за одну итерацию

Метод	Количество вызовов
Рунге-Кутты 4-го пор.	4
Адамса-Башфорта 4-го пор.	4
Симплектический Эйлер	1
Верле	2
Симплектический 3-го пор.	3
Симплектический 4-го пор.	3
Симплектический 6-го пор.	9

Исследуем численные методы на время решения системы уравнений тела-точки. Параметры для задачи всё те же самые - взяты из табл. 3.1. Шаг интегрирования $h = 0.0001$. Будем менять количество точек n от 500 до 250000 с шагом 500 и засекаем время решения. Ясно, что время решения зависит также от других факторов - языка программирования, библиотек, компьютера и так далее.

Проанализировав рисунки (4.12) и (4.13), можно сделать вывод, что самый трудозатратный метод - симплектический 6-го порядка. Тем не менее, симплектический метод 4-го порядка работает быстрее метода Рунге-Кутты 4-го порядка и Адамса-Башфорта 4-го порядка, при этом по проведенным тестам является более точным. Медленнее всего растет время выполнения симплектического метода Эйлера. Имея всего первый порядок точности, он даёт хорошую точность.

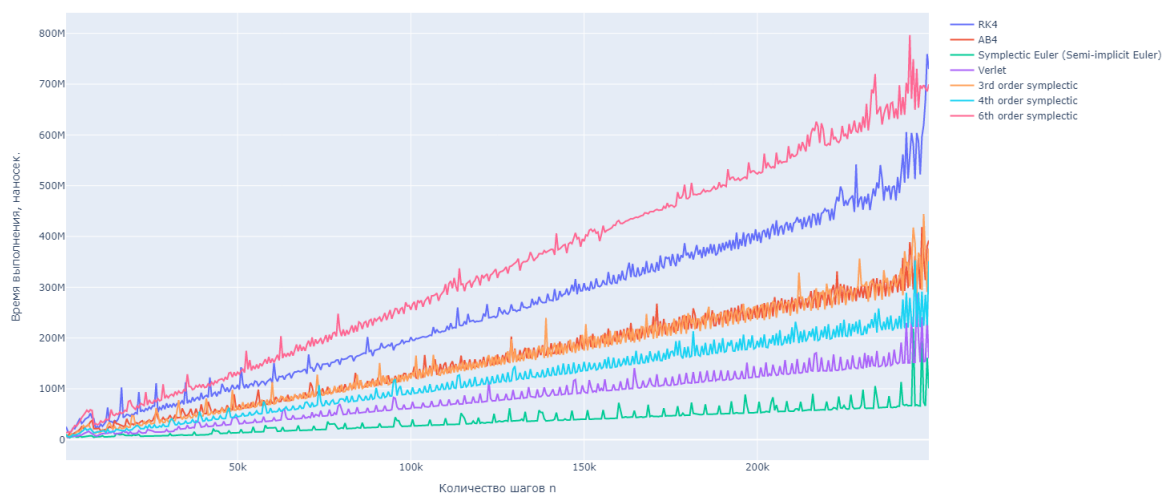


Рис.4.12. Зависимость времени решения системы уравнений движения тела-точки от количества шагов n .



Рис.4.13. Зависимость времени решения системы уравнений движения тела-точки от количества шагов n , логарифмический масштаб по оси Oy .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения выпускной квалификационной работы было разработано приложение с графическим интерфейсом для математического моделирования движения тела-точки в кулоновском поле на языке программирования Java. Реализован пакет программ для численного решения системы дифференциальных уравнений движения тела-точки, включающий следующие методы: метод Рунге-Кутты 4-го порядка, метод Адамса-Башфорта 4-го порядка, симплектический или полунявный метод Эйлера, симплектический метод Верле, симплектический метод 3-го порядка, 4-го порядка и 6-го порядка. При помощи метода Йошиды выведены коэффициенты и построена разностная схема симплектического интегратора 6-го порядка. В соответствии с каждым методом составлена и запрограммирована разностная схема интегрирования системы уравнений. Реализована анимация движения тела-точки в кулоновском поле.

Все методы сравнивались на относительное отклонение энергии от первоначального значения. Таким образом стало понятно, какие методы хорошо сохраняют энергию, а какие нет. Проведены подробные исследования работы численных методов, а именно - зависимость максимального относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении прицельного расстояния d , при изменении начального расстояния L между телом-точкой и кулоновским центром, а также при изменении шага интегрирования h . Помимо того, было исследовано относительное отклонение параметра K_2^2 в зависимости от шага интегрирования и параметра K_x в выражении начального условия для кинетического момента \underline{K}_2 . Дополнительно был проведен тест на производительность, где при помощи метода определения времени операций засекалось время решения задачи в зависимости от количества шагов n для каждой численной схемы.

Исходя из зависимости относительного отклонения энергии от первоначального значения при изменении шага интегрирования можно сделать вывод, что при "грубых" шагах отклонения энергии, которые дают симплектические схемы, очень большие по сравнению с методами Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта. Но далее, при уменьшении шага, симплектические методы дают лучшие результаты. При таких условиях преимущество симплектических методов подтверждается — они лучше сохраняют энергию. При рассмотрении зависимости максимального отклонения

энергии в зависимости от прицельного расстояния d и расстояния L между начальным положением тела-точки и кулоновским центром, можно заметить, что вблизи кулоновского центра наблюдаются большие отклонения энергии при решении любым численным методом. При увеличении данных параметров мы видим, что симплектические методы дают меньшие отклонения, нежели методы Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта. Аналогичный результат получили авторы статьи [16] при моделировании движения астероида материальной точкой в поле притяжения центрального тела при помощи симплектических методов. При прохождении астероида в непосредственной близости от большой планеты наблюдались большие погрешности, методы давали неправильные и некачественные результаты. Теоретически это обусловлено тем, что симплектические интеграторы были получены при условии малости возмущающих сил по сравнению с действием сил центрального тела. Таким образом, хорошей рекомендацией является следующее решение — разработка и использование метода с переменным шагом интегрирования. Так, универсальный метод будет автоматически уменьшать шаг интегрирования при сближении тела-точки с силовым центром. Также можно заметить, что при таких условиях симплектические методы по сравнению с методами Рунге-Кутты и Адамса-Башфорта теряют свои преимущества. В таких случаях предлагается исключить симплектические интеграторы при близких прохождениях и воспользоваться стандартными схемами.

Также было исследовано отклонение еще одного первого интеграла системы — параметра K_2^2 . Данный параметр хорошо сохраняется в процессе движения при интегрировании любым методом, но отклонения K_2^2 от первоначального значения, которые дают симплектические методы, больше, чем при интегрировании методом Рунге-Кутты или Адамса-Башфорта. Это объясняется тем, что симплектические методы лучше сохраняют именно полную энергию системы.

В заключение была рассмотрена еще одна важная зависимость – зависимость времени решения системы уравнений движения тела-точки от количества шагов. Чем выше порядок метода – тем дольше решается задача, в основном всё сводится к количеству вызовов правой части дифференциального уравнения. Так, самый простейший симплектический метод Эйлера работает гораздо быстрее метода Рунге-Кутты или Адамса-Башфорта, при этом лучше сохраняя энергию системы. Симплектический интегратор 6-го порядка, выведенный в данной работе, является

самым трудоёмким, но среди всех симплектических методов он давал наименьшие отклонения энергии.

Имея при себе приложение с пакетом численных методов, разработанное в рамках данной работы, позволит получить и исследовать различные траектории движения тел-точек в кулоновском поле отталкивания. Приложение может быть с различными модификациями дополнено, например, для рассмотрения произвольного количества силовых центров.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Аксенов А.П. Математика. Обыкновенные дифференциальные уравнения: Учеб, пособие. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2004. 584 с.
2. Вержбицкий В.М. Численные методы: математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения: учебное пособие для вузов / В.М.Вержбицкий. — Изд. 4-е. — Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2021. — 401 с.
3. Вильчевская Е. Н. Тензорная алгебра и тензорный анализ: учеб. пособие / Е.Н. Вильчевская. — СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013 г. 43 с.
4. Жилин П.А. Теоретическая механика: учеб. пособие. / П. А. Жилин. —СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. —147 с.
5. Кнут, Дональд Эрвин. Искусство программирования, том 1. Основные алгоритмы, 3-е изд.: Пер. с англ. — М.: ООО "И.Д. Вильямс 2018. — 720 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. пособие. –В 10-ти т. Т. I. Механика. –4-е изд., испр. –М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. –216 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика/ Т. II. Теория поля. —М.: Наука, 1988. —512 с.
8. Эккель Б. Философия Java. 4-е полное изд. — СПб.: Питер, 2015. — 1168 с.
9. Goetz, Brian. Java Concurrency in Practice / Brian Goetz, with Tim Peierls. . . [et al.] p. cm.
10. Hall, Brian. Lie Groups, Lie Algebras, and Representations. An Elementary Introduction. 2nd ed. New York: Springer, 2015.
11. Zhilin, P.A. Rigid Body Dynamics. Polytechnic University Publishing House, St. Petersburg (2015).
12. Тур В.Д. Движение тела-точки в центральном потенциальном поле: выпускная квалификационная работа бакалавра, 2020.
13. Чегодаева Е.А. Метод параллельного симплектического интегрирования уравнений движения малых тел Солнечной системы. Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. 2005.
14. Suzuki, Masuo. “General theory of higher-order decomposition of exponential operators and symplectic integrators”. In: Physics Letters A 165.5-6 (1992), pp. 387–395.
15. Yoshida, Haruo. “Construction of higher order symplectic integrators”. In: Physics letters A 150.5-7 (1990), pp. 262–268.

16. Особенности орбитального движения астероидов, http://vadimchazov.narod.ru/text_pdf/reasint.pdf

Приложение 1

Некоторые примеры траектории тела-точки

В данном приложении приведены некоторые траектории тела-точки в кулоновском поле отталкивания при различных параметрах. Для решения был выбран быстрый симплектический метод Эйлера с шагом интегрирования $h = 0.0001$ и количеством шагов $n = 250000$.

Варьировались следующие параметры: масса тела-точки m , тензор инерции \underline{J} , прицельное расстояние d , расстояние L от начального положения тела-точки до кулоновского центра по оси Ox , константа кулоновского взаимодействия A , начальные условия для количества движения $\underline{K}_1(0)$ и собственного кинетического момента $\underline{K}_2(0)$.

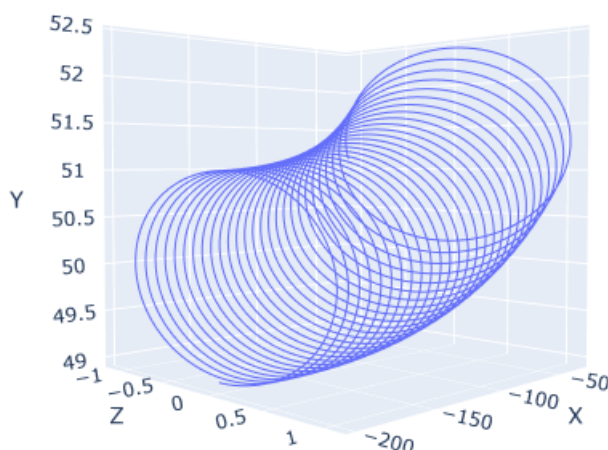


Рис.П1.1. Радиус-вектор тела-точки,

$$A = -0.1, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$$

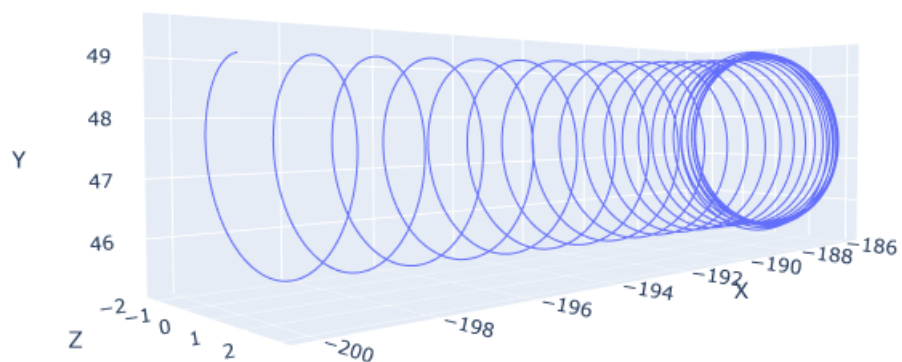


Рис.П1.2. Радиус-вектор тела-точки,

$$A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 0.2, L = 200, d = 50, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$$

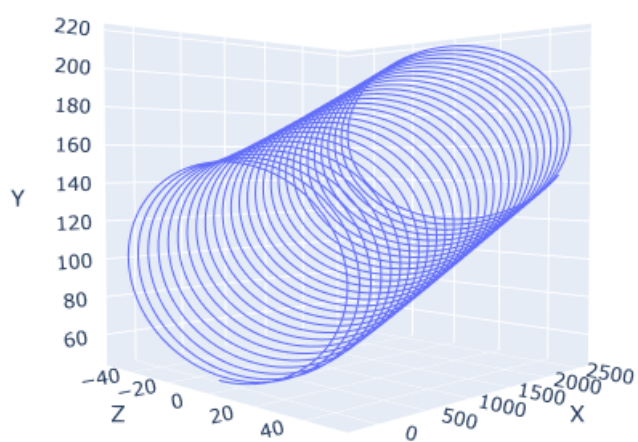


Рис.П1.3. Радиус-вектор тела-точки,

$$A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 0.5, L = 200, d = 50, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$$

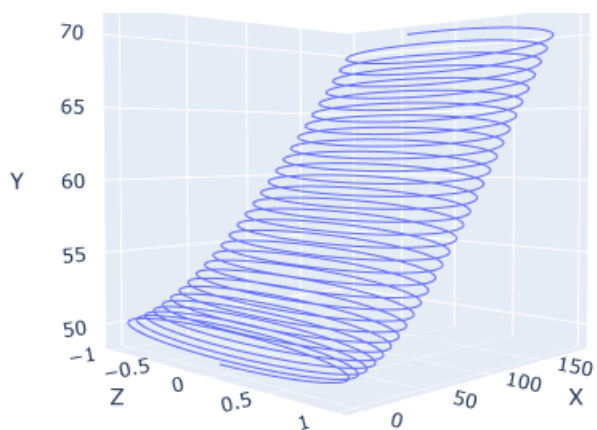


Рис.П1.4. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 50, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

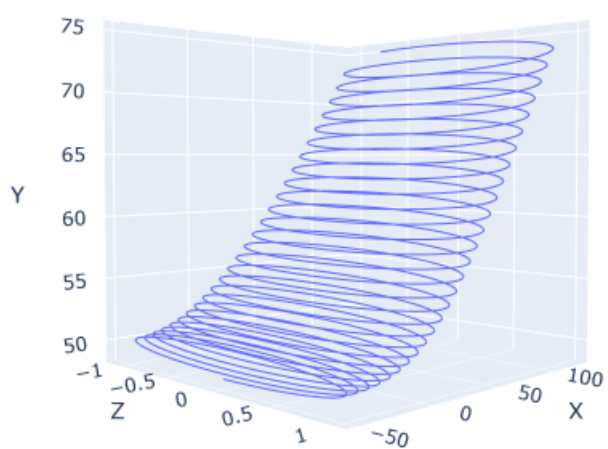


Рис.П1.5. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 50, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

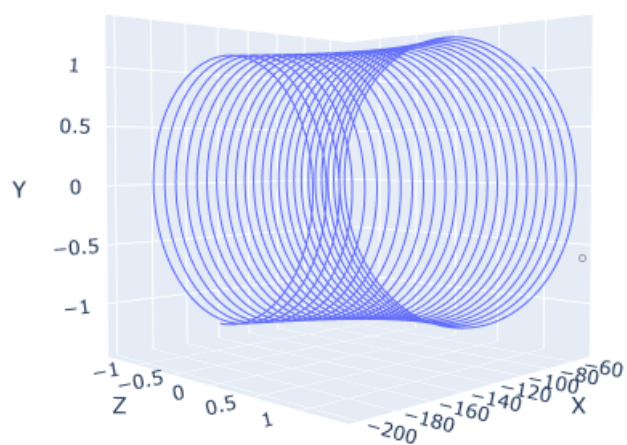


Рис.П1.6. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 0, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

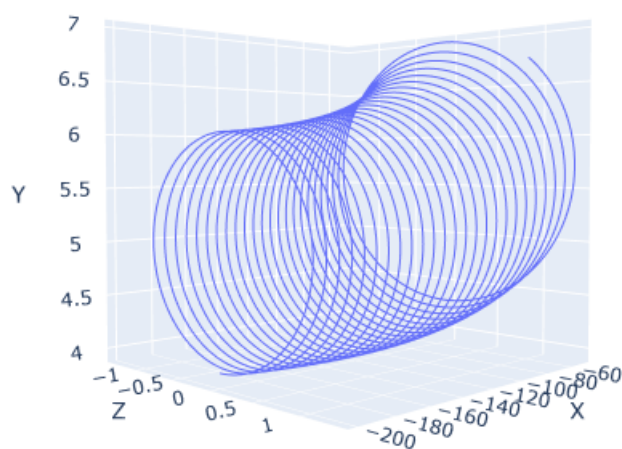


Рис.П1.7. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 5, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

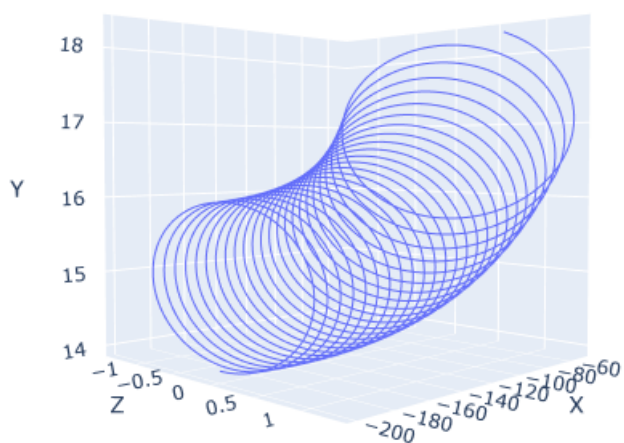


Рис.П1.8. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 15, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$

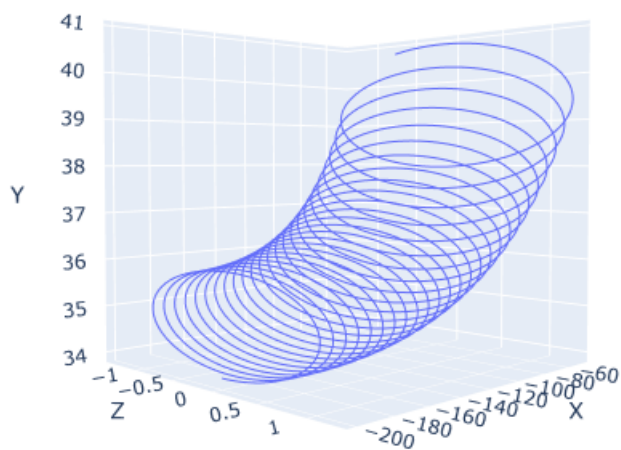


Рис.П1.9. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 35, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$

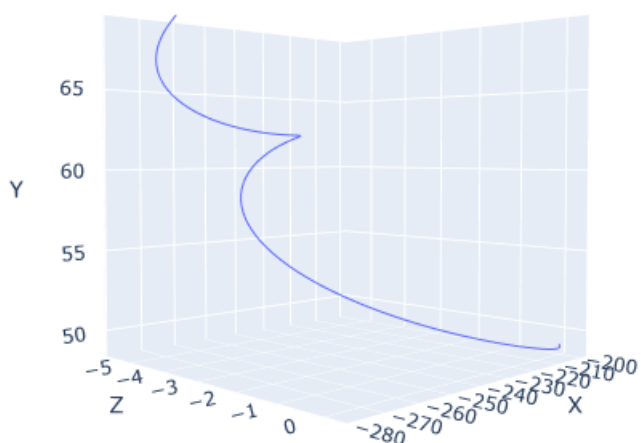


Рис.П1.10. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 0.1, Kz = 0.1, Kx = 2$

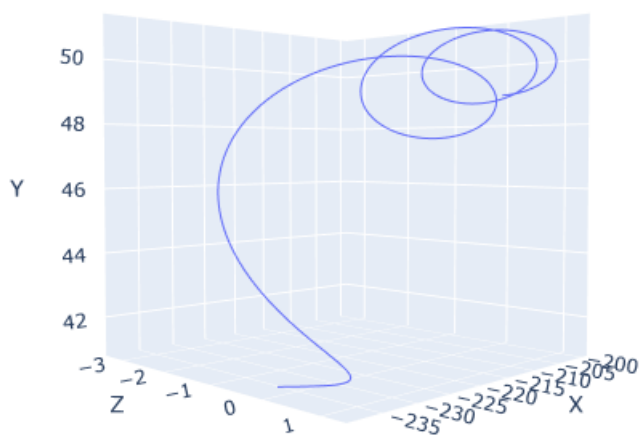


Рис.П1.11. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 1, Kz = 1, Kx = 2$

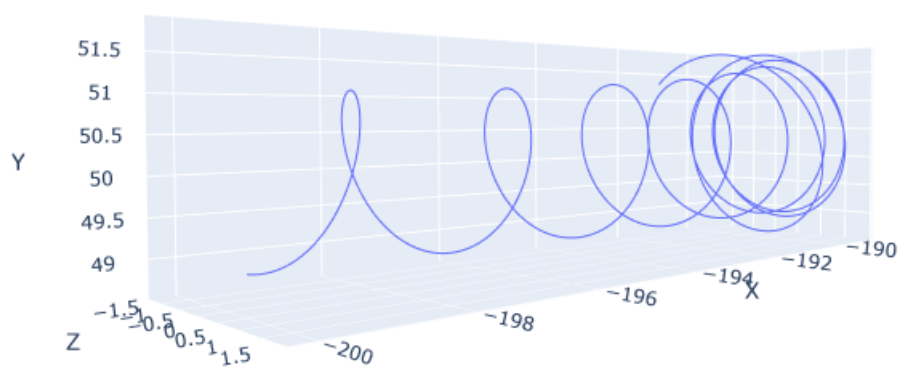


Рис.П1.12. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K_1 = 2, K_z = 2, K_x = 2$

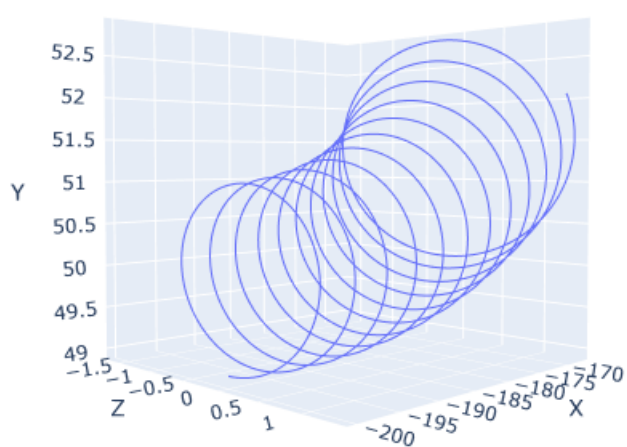


Рис.П1.13. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K_1 = 2.5, K_z = 2.51, K_x = 2$

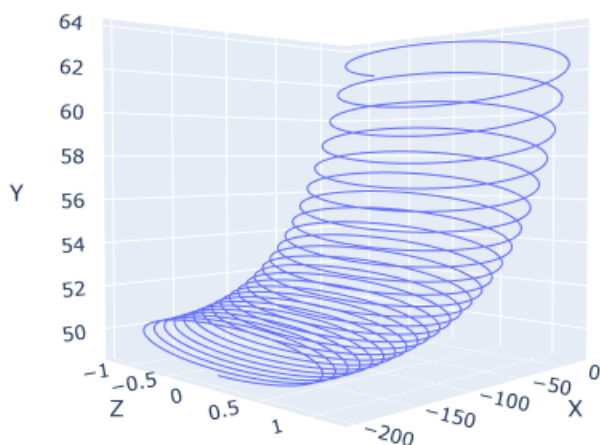


Рис.П1.14. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 0$

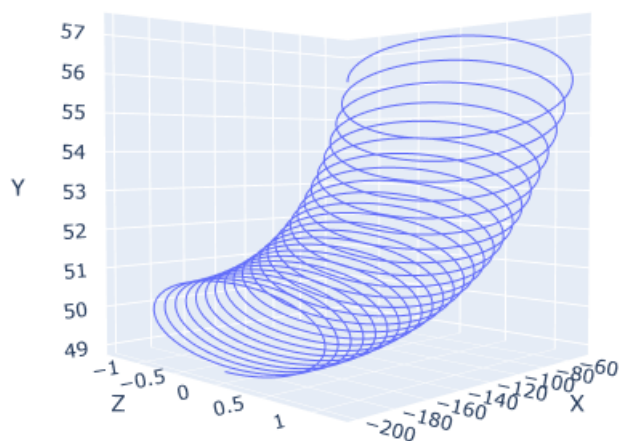


Рис.П1.15. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

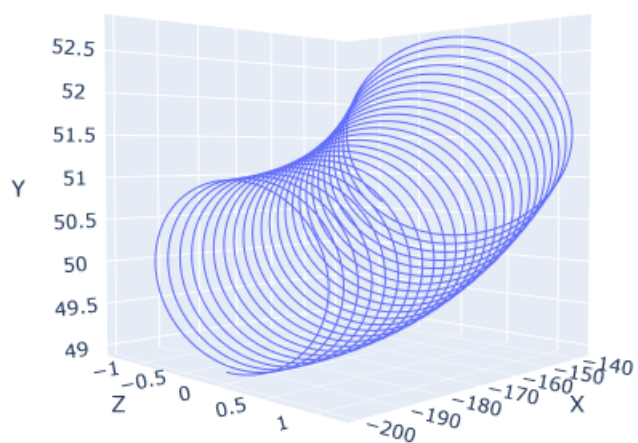


Рис.П1.16. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = -4.7$

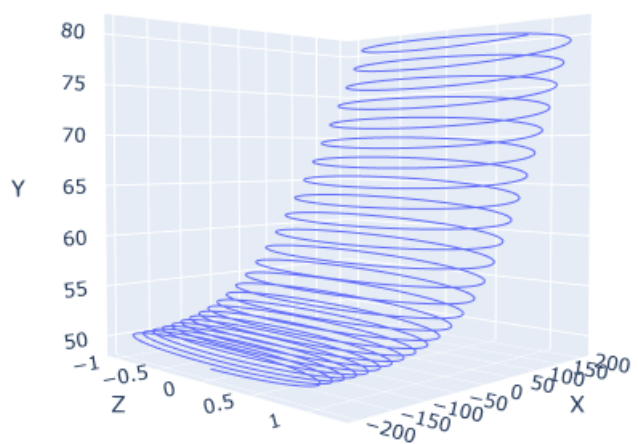


Рис.П1.17. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = -5$

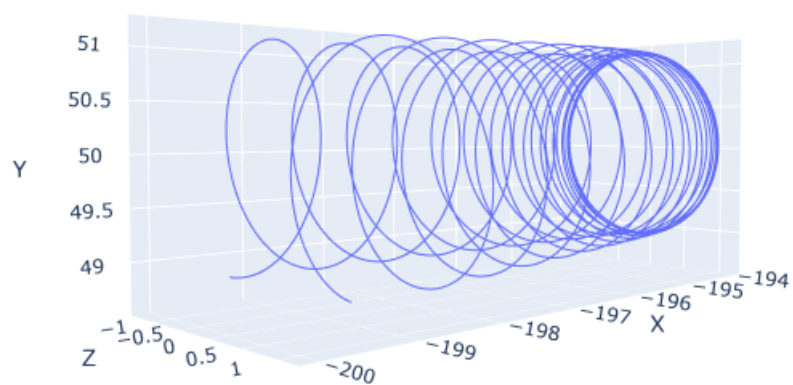


Рис.П1.18. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 6.5$

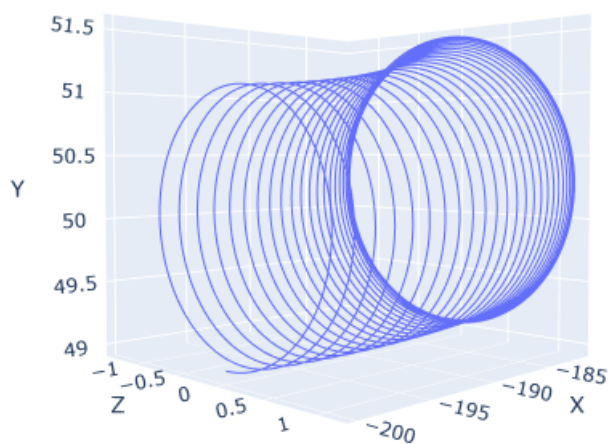


Рис.П1.19. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 6$

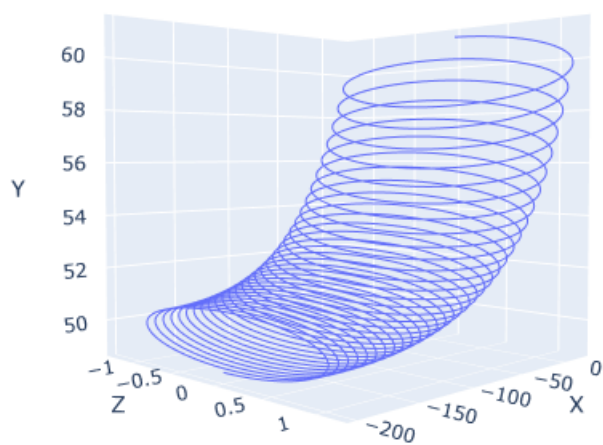


Рис.П1.20. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 6.4, Kz = 6.4, Kx = 2$

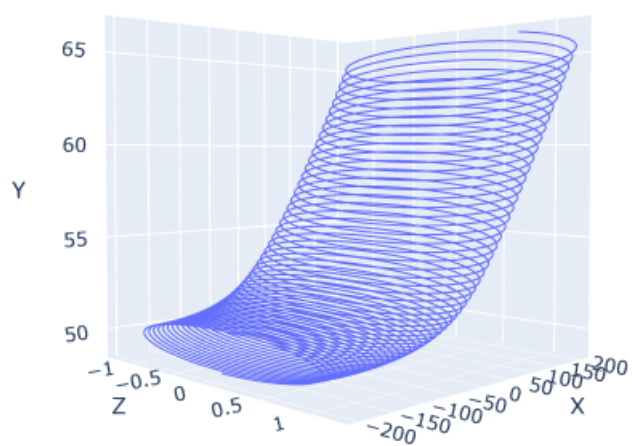


Рис.П1.21. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 10, Kz = 10, Kx = 2$

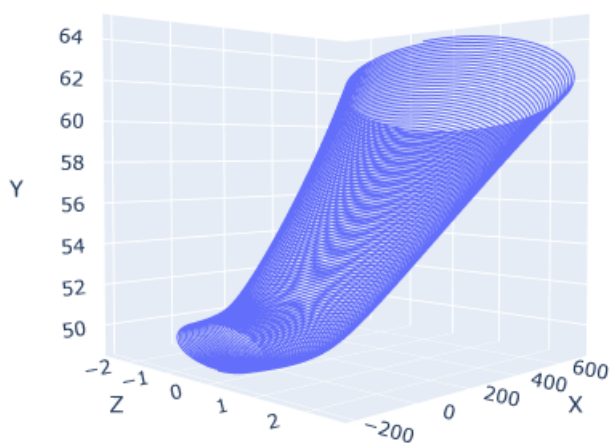


Рис.П1.22. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 20, Kz = 20, Kx = 2$

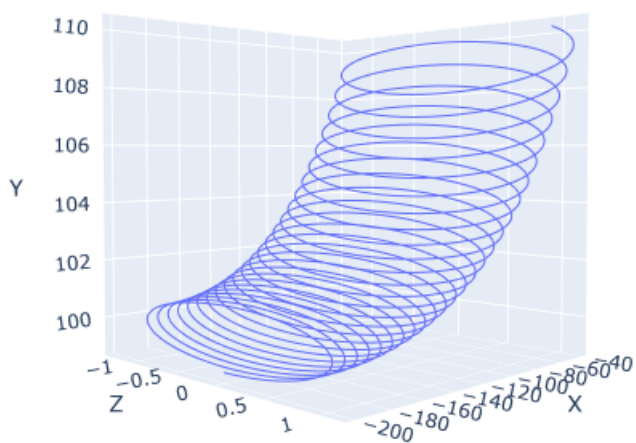


Рис.П1.23. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 100, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

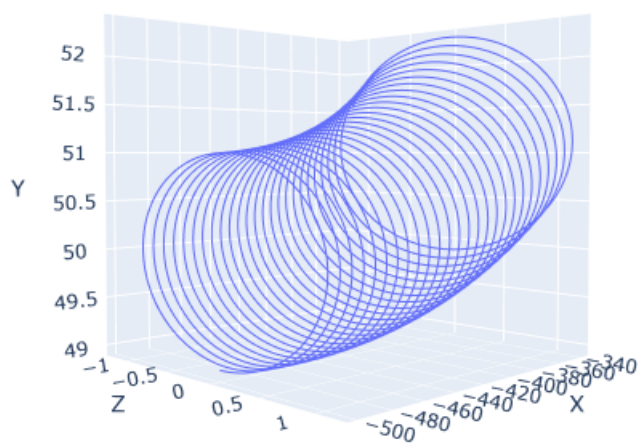


Рис.П1.24. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 500, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

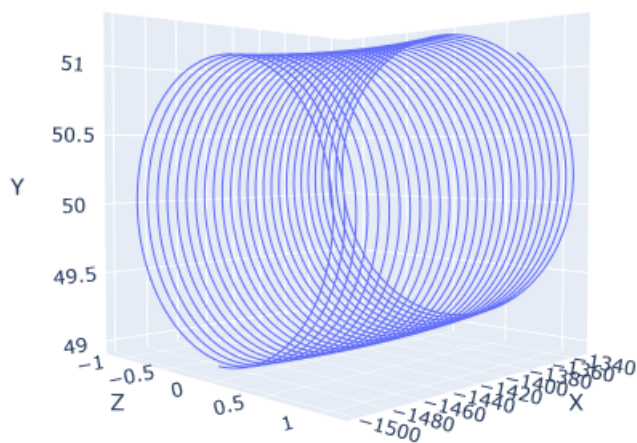


Рис.П1.25. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 1500, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

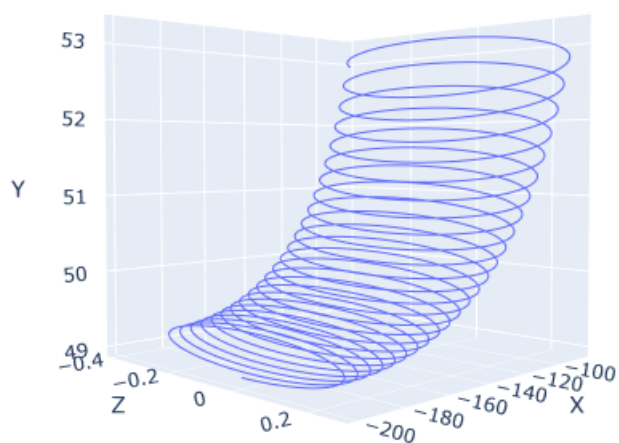


Рис.П1.26. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 2.5, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

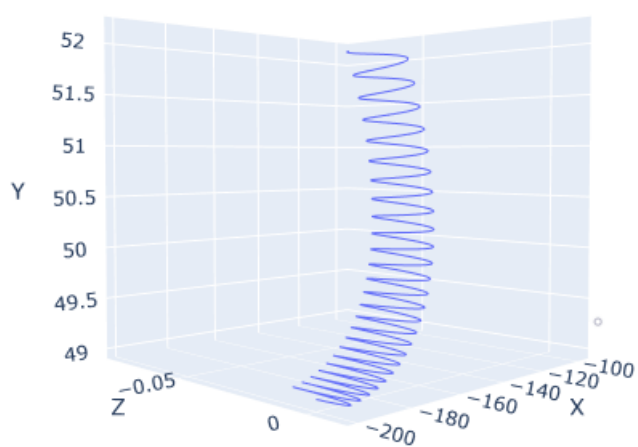


Рис.П1.27. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -0.5, m = 1, b = 0.7, j = 50, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

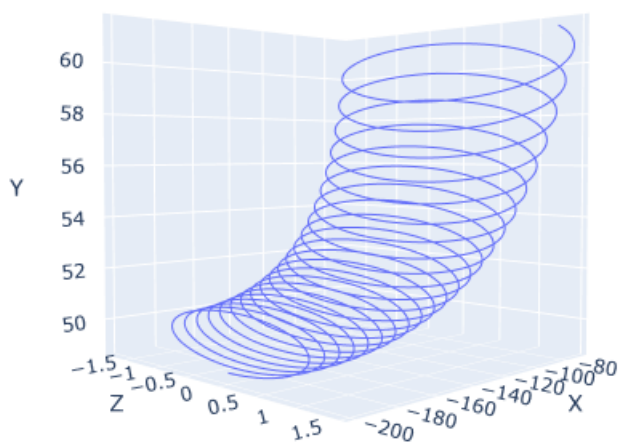


Рис.П1.28. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -1, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$

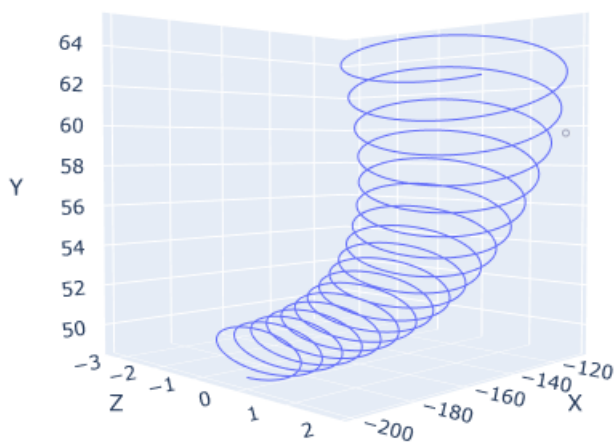


Рис.П1.29. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -2, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K_1 = 5, K_z = 5, K_x = 2$

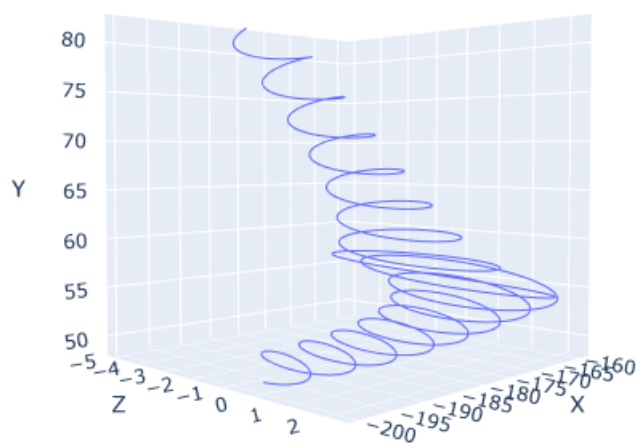


Рис.П1.30. Радиус-вектор тела-точки,
 $A = -5, m = 1, b = 0.7, j = 1, L = 200, d = 50, K1 = 5, Kz = 5, Kx = 2$

Приложение 2

О количестве промежуточных шагов в схеме симплектического интегратора порядка $2n$

Симметричность симплектического интегратора порядка $n = 2$ позволяет рекурсивно вывести интегратор любого четного порядка $2n + 2$. Пусть дан симплектический интегратор $S_2(t)$:

$$S_2(t) = e^{\frac{t}{2}A} e^{tB} e^{\frac{t}{2}A}$$

Тогда симплектический интегратор порядка $2n + 2$ может быть рекурсивно получен следующим образом:

$$S_{2n+2}(t) = S_{2n}(x_1^{(n)}t) S_{2n}(x_0^{(n)}t) S_{2n}(x_1^{(n)}t), \quad (\text{П2.1})$$

$$x_0^{(n)} = \frac{-2^{\frac{1}{2n+1}}}{2 - 2^{\frac{1}{2n+1}}} \quad (\text{П2.2})$$

$$x_1^{(n)} = \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{2n+1}}} \quad (\text{П2.3})$$

Доказательство данного факта приведено в статье [15]. Следует иметь в виду, что количество промежуточных шагов k , на которое делится один шаг величиной h , равно

$$k = 3^{n-1} + 1$$

Соответственно, с ростом порядка интегратора, растёт трудоемкость алгоритма.

О гамильтонианах

Вся суть симплектических интеграторов состоит в том, что они применяются к гамильтоновым системам. Рассмотрим, например, гамильтониан для системы уравнений движения материальной точки в кулоновском поле:

$$H(r, v) = T(v) + \Pi(R) = \frac{mv^2}{2} - \frac{A}{R}, \quad R \in \mathbb{R}^2, \quad v \in \mathbb{R}^2 \quad (\text{ПЗ.1})$$

Гамильтониан также называется полной энергией системы. Видим, что наш гамильтониан не зависит явно от времени и соответственно является первым интегралом системы. Также отметим, что он является сепарабельным, а поле скоростей системы выглядит следующим образом:

$$v_H = v_T + v_\Pi$$

$$v_T = \begin{pmatrix} -\frac{\partial T}{\partial R} \\ \frac{\partial T}{\partial v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ mv \end{pmatrix}$$

$$v_\Pi = \begin{pmatrix} -\frac{\partial \Pi}{\partial R} \\ \frac{\partial \Pi}{\partial v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{A}{R^2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Составим уравнения Гамильтона. Рассмотрим поле v_T :

$$\dot{\underline{v}} = \frac{\partial T}{\partial R} = 0, \quad \underline{v} = \text{Const} = \underline{v}_0$$

$$\dot{\underline{R}} = \frac{\partial T}{\partial v}, \quad \underline{R} = \underline{R}_0 + t \frac{\partial T}{\partial v}(\underline{v}_0) = \underline{R}_0 + tm\underline{v}_0$$

Рассмотрим теперь для поля v_Π :

$$\dot{\underline{v}} = -\frac{\partial \Pi}{\partial R}, \quad \underline{v} = \underline{v}_0 - t \frac{\partial \Pi}{\partial R}(\underline{R}_0) = \underline{v}_0 - t \frac{A}{R_0}$$

$$\dot{\underline{R}} = -\frac{\partial \Pi}{\partial v} = 0, \quad \underline{R} = \text{Const} = \underline{R}_0$$

Формальное решение уравнений, записанных в форме Гамильтона:

$$e^{tv_T} = \begin{pmatrix} \underline{v}_0 \\ \underline{R}_0 + tm\underline{v}_0 \end{pmatrix}$$

$$e^{tv_{\Pi}} = \begin{pmatrix} \underline{v}_0 - t \frac{A}{R_0} \\ \underline{R}_0 \end{pmatrix},$$

Видим, что при построении интеграторов Йошида мы пользовались именно свойством сепарабельности гамильтониана, где в качестве векторных полей A и B в выражении интегратора можно рассмотреть векторные поля скоростей v_T и v_{Π} гамильтоновой системы:

$$S(t) = e^{tv_H} = e^{t(v_T+v_{\Pi})} = \prod_{i=1}^k e^{C_i t v_T} e^{D_i t v_{\Pi}} + O(t^{n+1}),$$

где $i = 1, \dots, k$ - промежуточные шаги. Аппроксимируя таким образом e^{tv_H} , мы можем найти численное решение. Пусть дан интегратор порядка n с количеством промежуточных шагов $j = 1, \dots, k$, такой, что:

$$S_n : (R_{i-1}, v_{i-1}) \rightarrow (R_i, v_i) = \prod_{j=1}^k e^{C_j h v_T} e^{D_j h v_{\Pi}} (R_{i-1}, v_{i-1})$$

Заменяя t на малый шаг по времени h , разностная схема для уравнения движения материальной точки будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} \underline{R}_i^{(k)} &= \underline{R}_i^{(k-1)} + C_k h m \underline{v}_i^{(k-1)} \\ \underline{v}_i^{(k)} &= \underline{v}_i^{(k-1)} - D_k h \frac{A}{r_i^{(k)}}, \end{aligned}$$

где i - номер итерации, k - количество промежуточных шагов, на которое делится один шаг величиной h .