Fizyka *in silico*

Robert Szczelina

Dzień Wydziału 2023

15 marca 2023

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Jeżeli poruszamy się ze stałą prędkością $v = v_0$, to jaka jest zależność drogi s od czasu t?

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Jeżeli poruszamy się ze stałą prędkością $v = v_0$, to jaka jest zależność drogi s od czasu t?

Oczywiście $s(t) = s_0 + v_0 \cdot t$, gdzie s_0 to początkowe położenie.

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Jeżeli poruszamy się ze stałą prędkością $v = v_0$, to jaka jest zależność drogi s od czasu t?

Oczywiście $s(t) = s_0 + v_0 \cdot t$, gdzie s_0 to początkowe położenie.

A jeżeli poruszamy się ze stałym przyspieszeniem $a = a_0$ i początkową prędkością $v_0 = 0$?

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Jeżeli poruszamy się ze stałą prędkością $v = v_0$, to jaka jest zależność drogi s od czasu t?

Oczywiście $s(t) = s_0 + v_0 \cdot t$, gdzie s_0 to początkowe położenie.

A jeżeli poruszamy się ze stałym przyspieszeniem $a = a_0$ i początkową prędkością $v_0 = 0$?

$s(t) = s_0 + \frac{a_0 \cdot t^2}{2}$.
(dodatkowo, nietrudno zgadnąć, że $v(t) = a_0 \cdot t$, tzn. przyśpieszenie jest „prędkością” zmiany prędkości)

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Jeżeli poruszamy się ze stałą prędkością $v = v_0$, to jaka jest zależność drogi s od czasu t?

Oczywiście $s(t) = s_0 + v_0 \cdot t$, gdzie s_0 to początkowe położenie.

A jeżeli poruszamy się ze stałym przyspieszeniem $a = a_0$ i początkową prędkością $v_0 = 0$?

$s(t) = s_0 + \frac{a_0 \cdot t^2}{2}$.
(dodatkowo, nietrudno zgadnąć, że $v(t) = a_0 \cdot t$, tzn. przyśpieszenie jest „prędkością” zmiany prędkości)

`program_01.py` - narysowanie $v(t)$, $s(t)$.

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Jeżeli poruszamy się ze stałą prędkością $v = v_0$, to jaka jest zależność drogi s od czasu t?

Oczywiście $s(t) = s_0 + v_0 \cdot t$, gdzie s_0 to początkowe położenie.

A jeżeli poruszamy się ze stałym przyspieszeniem $a = a_0$ i początkową prędkością $v_0 = 0$?

$s(t) = s_0 + \frac{a_0 \cdot t^2}{2}$.
(dodatkowo, nietrudno zgadnąć, że $v(t) = a_0 \cdot t$, tzn. przyśpieszenie jest „prędkością” zmiany prędkości)

Ale dlaczego tak jest?

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

„prędkość to pochodna drogi po czasie”

„przyspieszenie to druga pochodna drogi po czasie”

(albo „przyspieszenie to pochodna prędkości po czasie”)

Jeśli pamiętają Państwo pochodne, to łatwo sprawdzić, że jeśli $s(t) = v_0 \cdot t$, to $s'(t) = v_0 = v(t)$.

Podobnie, jeśli $s(t) = s_0 + \frac{a_0 \cdot t^2}{2}$, to $s'(t) = 2 \cdot \frac{a_0 \cdot t}{2} = a_0 \cdot t = v(t)$, i $s''(t) = v'(t) = a_0 = a(t)$.

Czyli wszystko się zgadza

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Co jesli jednak przyśpieszenie zmienia się w czasie?

np. $a(t) = sin(t)$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

Całka nieoznaczona

Operacją odwrotną do różniczkowania (obliczania pochodnej) jest całka nieoznaczona. Tzn. dla funkcji $f(t)$ przez $\int f(t)dt$ oznaczamy każdą funkcję $F(t)$ taką, że $F'(t) = f(t)$. F nazywamy funkcją pierwotną do f.

Warto zauważyć, że jeżeli F jest pierwotną f, to $F(t) + C$, C - dowolna stała, też jest pierwotną f.

Przykład: $f(t) = t^n$ to $f'(t) = n \cdot t^{n-1}$, ale
$\int f(t)dt = \frac{1}{n+1} \cdot t^{n+1} + C$.

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Ćwiczenie na rozgrzewkę:

Niech $a(t) = a_0$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Ćwiczenie na rozgrzewkę:

Niech $a(t) = a_0$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

$v'(t) = a(t)$, czyli $v(t) = \int a(t)dt$!

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Ćwiczenie na rozgrzewkę:

Niech $a(t) = a_0$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

$v'(t) = a(t)$, czyli $v(t) = \int a(t)dt$!

jeśli wiemy, że $a(t) = a_0 = a_0 \cdot t^0$, czyli
$v(t) = \int a(t)dt = a_0 \cdot t + C$.

Jak ustalić C?

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Ćwiczenie na rozgrzewkę:

Niech $a(t) = a_0$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

$v'(t) = a(t)$, czyli $v(t) = \int a(t)dt$!

jeśli wiemy, że $a(t) = a_0 = a_0 \cdot t^0$, czyli
$v(t) = \int a(t)dt = a_0 \cdot t + C$.

Jak ustalić C? Wiemy, że $v(0) = 0$, więc $a_0 \cdot 0 + C = 0$, czyli
$C = 0$.

Całka oznaczona

Przez $\int_a^b f(t)dt$ oznacza się zwyczajowo pole pod wykresem funkcji (o ile $f(t) \geq 0$). Jeśli $f(t)$ przyjmuje dowolne wartości, to całka oznaczona liczy pole „ze znakiem" = „pole f nad wykresem" - „pole f pod wykresem".

Całka oznaczona

Przez $\int_a^b f(t)dt$ oznacza się zwyczajowo pole pod wykresem funkcji (o ile $f(t) \geq 0$). Jeśli $f(t)$ przyjmuje dowolne wartości, to całka oznaczona liczy pole „ze znakiem" = „pole f nad wykresem" - „pole f pod wykresem".

Okazuje się, że jeśli $F(t) = \int f(t)dt$, to $F(b) - F(a) = \int_a^b f(t)dt$, lub, inaczej zapisując:

$$F(b) = F(a) + \int_a^b f(t)dt$$

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Co jeśli jednak przyśpieszenie zmienia się w czasie?

np. $a(t) = \sin(t)$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

Ruch jednostajny i jednostajnie przyśpieszony

Co jeśli jednak przyśpieszenie zmienia się w czasie?

np. $a(t) = \sin(t)$. Ile wtedy wynosi $v(t)$ i $s(t)$?

Podstawiając $b = t$, $a = 0$ w

$$F(b) = F(a) + \int_a^b f(t)dt$$

możemy napisać:
Np. dla naszej prędkości: $v'(t) = a(t)$, czyli

$v(t) = v(0) + \int_0^t a(s)ds = 0 + \int_0^t sin(s)ds.$

Całka oznaczona - przybliżenie

Jak policzyć $\int_a^b sin(t)dt$ (lub dla innego dowolnego $a(t)$)?

Całka oznaczona - przybliżenie

Jak policzyć $\int_a^b sin(t)dt$ (lub dla innego dowolnego $a(t)$)?

Jakiej figury pole umiemy liczyć?

Całka oznaczona - przybliżenie

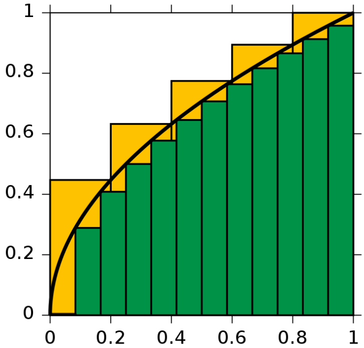
Jak policzyć $\int_a^b sin(t)dt$ (lub dla innego dowolnego $a(t)$)?

Jakiej figury pole umiemy liczyć?

Odpowiedź: prostokąt.

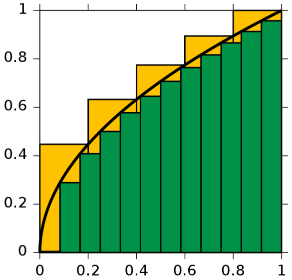
Podzielmy przedział $[a, b]$ na $n + 1$ małych przedzialików $[t_i, t_{i+1}]$, $t_0 = a$, $t_n = b$, $t_i = a + \frac{b-a}{n}$ i zsumujmy pola prostokątów o wysokości $f(t_i)$ i długości podstawy $h = \frac{b-a}{n}$

Całka oznaczona - przybliżenie



źródło: wikipedia

Całka oznaczona - przybliżenie



Otrzymamy:

$$\int_a^b f(t)dt \approx \sum_{i=0}^{n} h \cdot f(t_i)$$

Przypomnienie: $h = \frac{b-a}{n}$, $t_i = a + h \cdot i$.

Metoda Eulera

Teraz już możemy zaproponować metodę wyliczania $v(t_j)$ dla każdego $j \geq 0$ przy założeniu, że $a(t)$ jest zadane wzorem:

$$v(t_j) = v_0 + \int_0^{t_j} a(s)ds \approx v_0 + \sum_{i=0}^{j} h \cdot f(t_i)$$

Metoda Eulera

Teraz już możemy zaproponować metodę wyliczania $v(t_j)$ dla każdego $j \geq 0$ przy założeniu, że $a(t)$ jest zadane wzorem:

$$v(t_j) = v_0 + \int_0^{t_j} a(s)ds \approx v_0 + \sum_{i=0}^{j} h \cdot f(t_i)$$

Zauważając, że sumy pomiędzy krokami różnią się tylko o $h \cdot a(t_i)$, otrzymamy (rekurencyjny / iteracyjny wzór):

$$\begin{aligned} v(t_0) &:= v_0 \\ v(t_{i+1}) &:= v(t_i) + h \cdot a(t_i) \end{aligned}$$

Jest to tak zwana metoda Eulera.

Metoda Eulera

Metoda Eulera:

$$\begin{aligned} v(t_0) &:= v_0 \\ v(t_{i+1}) &:= v(t_i) + h \cdot f(t_i) \end{aligned}$$

`program_02.py` - metoda Eulera zastosowana do układu $v'(t) = a(t)$, $s'(t) = v(t)$, dla $a(t) = a_0$ - stałe przyśpieszenie.

`program_03.py` - to samo, tylko dla dowolnego przyśpieszenia!

Równania różniczkowe

Najbardziej znane równanie różniczkowe w fizyce?

$$F = m \cdot a$$

W „naszym" języku:

$$s''(t) = \frac{F}{m}$$

Pytanie od czego zależy siła F? Np jeśli F to siła grawitacji?

$$F_{Mm} = G \cdot \frac{M \cdot m}{r^2},$$

gdzie r - odległość między ciałami: $r(t) = |s_M(t) - s_m(t)|$.

Równania różniczkowe

Siła ciążenia jest siłą przyciągającą, więc siła działająca na ciało m przez M działa w kierunku i zwrocie zdefiniowanym przez połączenie położeń wektorem. Dla uproszczenia załóżmy, że jesteśmy już na linii łączącej, więc wybieramy tylko zwrot.

$$F_{Mm} = G \cdot \frac{M \cdot m}{r^2} \cdot \frac{(s_M(t) - s_m(t))}{r},$$

Równania różniczkowe

Siła ciążenia jest siłą przyciągającą, więc siła działająca na ciało m przez M działa w kierunku i zwrocie zdefiniowanym przez połączenie położeń wektorem. Dla uproszczenia załóżmy, że jesteśmy już na linii łączącej, więc wybieramy tylko zwrot.

$$F_{Mm} = G \cdot \frac{M \cdot m}{r^2} \cdot \frac{(s_M(t) - s_m(t))}{r},$$

Widać, że siła zależy od wzajemnych położeń ciał!

Równania różniczkowe

Siła ciążenia jest siłą przyciągającą, więc siła działająca na ciało m przez M działa w kierunku i zwrocie zdefiniowanym przez połączenie położeń wektorem. Dla uproszczenia załóżmy, że jesteśmy już na linii łączącej, więc wybieramy tylko zwrot.

$$F_{Mm} = G \cdot \frac{M \cdot m}{r^2} \cdot \frac{(s_M(t) - s_m(t))}{r},$$

Widać, że siła zależy od wzajemnych położeń ciał!

Stąd, stosując równanie różniczkowe:

$$\begin{aligned} s_m''(t) &= \frac{F_M m(s_M(t), s_m(t))}{m} = G \cdot \frac{M}{r^3} \cdot (s_M(t) - s_m(t)) \\ s_M''(t) &= \frac{F_M m(s_M(t), s_m(t))}{m} = G \cdot \frac{m}{r^3} \cdot (s_m(t) - s_M(t)) \end{aligned}$$

Równania różniczkowe

Stąd równania fizyki, to równania różniczkowe, gdzie pochodna funkcji $x'(t)$ zależy w jakiś sposób od wartości funkcji $x(t)$, np.

$x'(t) = x(t)$

Czy zna ktoś rozwiązanie?

Równania różniczkowe

Stąd równania fizyki, to równania różniczkowe, gdzie pochodna funkcji $x'(t)$ zależy w jakiś sposób od wartości funkcji $x(t)$, np.

$$x'(t) = x(t)$$

Czy zna ktoś rozwiązanie?

$$x(t) = x_0 \cdot e^t.$$

Równania różniczkowe

Stąd równania fizyki, to równania różniczkowe, gdzie pochodna funkcji $x'(t)$ zależy w jakiś sposób od wartości funkcji $x(t)$, np.

$x'(t) = x(t)$

Czy zna ktoś rozwiązanie?

$x(t) = x_0 \cdot e^t$.

Dla $x'(t) = L \cdot x(t)$, L - stała?

Równania różniczkowe

Stąd równania fizyki, to równania różniczkowe, gdzie pochodna funkcji $x'(t)$ zależy w jakiś sposób od wartości funkcji $x(t)$, np.

$x'(t) = x(t)$

Czy zna ktoś rozwiązanie?

$x(t) = x_0 \cdot e^t$.

Dla $x'(t) = L \cdot x(t)$, L - stała? Odp: $x(t) = x_0 \cdot e^{L \cdot t}$.

Równania różniczkowe

Stąd równania fizyki, to równania różniczkowe, gdzie pochodna funkcji $x'(t)$ zależy w jakiś sposób od wartości funkcji $x(t)$, np.

$x'(t) = x(t)$

Czy zna ktoś rozwiązanie?

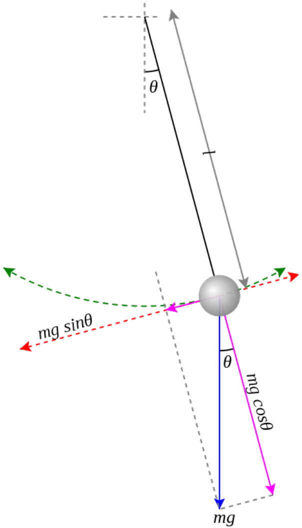
$x(t) = x_0 \cdot e^t$.

Dla $x'(t) = L \cdot x(t)$, L - stała? Odp: $x(t) = x_0 \cdot e^{L \cdot t}$.

`program_04.py` pokazuje rozwiązanie dla $x'(t) = L \cdot x(t)$ dokładne i przybliżone metodą Eulera.

`program_05.py` pokazuje, że metodą Eulera możemy rozwiązywać równania dowolnej postaci $x'(t) = F(t, x(t))$.

Równanie wahadła



źródło: wikipedia

g - przyśpieszenie ziemskie. Wtedy.

$$F = ma = mg - mg\cos(\theta)$$
$$F = -m\sin(\theta) = m \cdot a$$

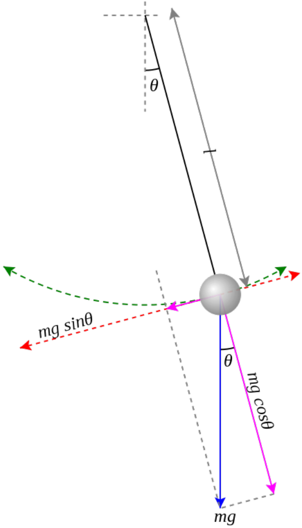
dalej, pozycja na łuku oznaczona $s(t) = l \cdot \theta(t)$. I dalej

$$s''(t) = l \cdot \theta''(t)$$

i podstawiając do RR:

$$\theta''(t) = -\frac{g}{l}\sin(\theta(t))$$

Równanie wahadła



źródło: wikipedia

Oznaczając $v(t) = (\theta(t), \theta'(t)) = (v_0(t), v_1(t))$ (wektor) dostaniemy:

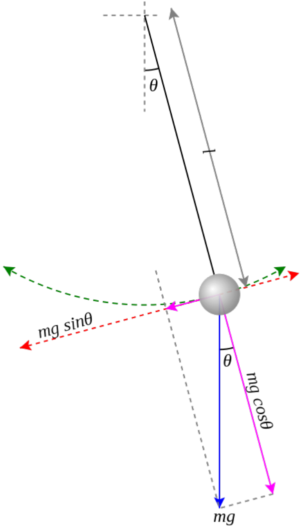
$$v'(t) = F(t, v(t)),$$

gdzie

$$\begin{aligned} F(t, v(t)) &= \left(\theta'(t), -\frac{g}{l}\sin(\theta(t))\right. \\ &= \left(v_1(t), -\frac{g}{l}\sin(v_0(t)\right) \end{aligned}$$

(też wektor)

Równanie wahadła



źródło: wikipedia

Oznaczając $v(t) = (\theta(t), \theta'(t)) = (v_0(t), v_1(t))$ (wektor) dostaniemy:

$$F(t, v(t)) = \left(v_1(t), -\frac{g}{l}\sin(v_0(t))\right)$$

`program_06.py` pokazuje, jak rozwiązać i narysować ruch wahadła, używając metody Eulera.

Równania różniczkowe

Dla dwóch ciał:

$$
\begin{aligned}
s''_m(t) &= \frac{F_M m(s_M(t), s_m(t))}{m} = G \cdot \frac{M}{r^3} \cdot (s_M(t) - s_m(t)) \\
s''_M(t) &= \frac{F_M m(s_M(t), s_m(t))}{m} = G \cdot \frac{m}{r^3} \cdot (s_m(t) - s_M(t))
\end{aligned}
$$

Dla dowonej liczby n ciał ($r_{ij}(t) = \|s_i(t) - s_j(t)\|$):

$$
s''_i(t) = \frac{F_i(s_1(t), \ldots, s_n(t))}{m} = \sum_{j \neq i} G \cdot \frac{m_j}{(r_{ij}(t))^3} \cdot (s_j(t) - s_i(t))
$$

`program_07.py` pokazuje zastosowanie do problemu n-ciał (przykłady dla $n = 2$).

Równania różniczkowe

Problemy fizyki:

- równania dynamiki molekularnej
- równania cząstkowe
- równania z opóźnieniem

Problemy matematyki:

- jak zachowuje się dynamika procesu, gdy $t \to \infty$?
- znajdowanie okreslonych rodzajów rozwiązań, np. orbity łączące.

Problemy numeryki:

- stabilnośc algorytmów
- wielkośc błędów
- ścisłe oszacowania na błąd metody - czy da się wnioskować coś z symulacji numerycznych?

Równania różniczkowe

`program_08.py` problemy z metodą Eulera

`program_09.py` lepsze metody numeryczne

Przykład misja NASA - LUCY: źródło:
https://svs.gsfc.nasa.gov/4719

Przykład tworzenia się dimeru cholesterolu - praca własna.

Tańczące planety - dr. Tomasz Kapela

Twierdzenie Poincarégo o poracaniu - Jacek Kubica