

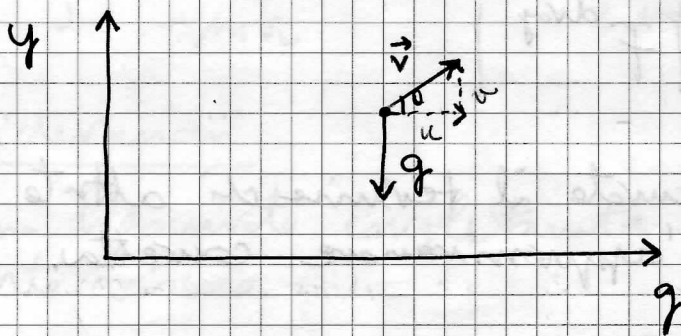
# Moto reale di un proiettile

Studio della traiettoria di una palla di cannone di lunghe dimensioni.

$$\text{diametro} = 10 \text{ cm}$$

$$v_0 = 700 \text{ m/s}$$

Approssimazione  $\emptyset$  trascuriamo la resistenza dell'aria



Scrivo l'eq. del moto nelle due dimensioni:

$$\begin{cases} \frac{d^2 y}{dt^2} = -g \\ \frac{d^2 x}{dt^2} = 0 \end{cases}$$

La riscrivo come due eq. differenziali del 1° ordine

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = -g \\ \frac{dx}{dt} = u \\ \frac{du}{dt} = 0 \end{cases}$$

Applicando il metodo di Eulero

$$\begin{cases} y_{j+1} = y_j + v_j h \\ v_{j+1} = v_j - g h \\ x_{j+1} = x_j + u_j h \\ u_{j+1} = u_j \end{cases}$$

## Approssimazione 1

introdurre l'effetto delle forze di attrito.

$$F_{\text{attr}} = -B_2 |\vec{v}|^2 = -B_2 (u^2 + v^2)$$

$$u = |\vec{v}| \cos \theta$$

$$v = |\vec{v}| \sin \theta$$

$$F_{\text{attr}}^x = -B_2 |\vec{v}|^2 \cos \theta = -B_2 |\vec{v}| u$$

$$F_{\text{attr}}^y = -B_2 |\vec{v}|^2 \sin \theta = -B_2 |\vec{v}| v$$

Aggiungo all'eq. le forze di attrito e uso il metodo di Eulero

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{j+1} = y_j + v_j h \\ w_{j+1} = w_j + u_j h \\ v_{j+1} = v_j - g h - \frac{B_2 |\vec{v}|}{m} v_j h \\ u_{j+1} = u_j - \frac{B_2 |\vec{v}|}{m} u_j h \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{con} \\ |\vec{v}| = \sqrt{v_j^2 + u_j^2} \end{array}$$

Nei calcoli usiamo  $\frac{B_2}{m} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ m}^{-1}$

## Approssimazione 2

Variatione della densità dell'aria con la quota

È possibile utilizzare due modelli:

[1] l'atmosfera è un gas ideale a temperatura costante

$$\rho = \rho_0 e^{-\frac{y}{y_0}}$$

$$y_0 = \frac{k_B T}{mg} \approx 1 \cdot 10^4 \text{ m}$$

$$\rho_0 \approx 1.2 \text{ g/l}$$

Ma questo modello dell'atmosfera come gas ideale non è realistico: sappiamo che la temperatura dell'aria può variare considerevolmente con la quota.

[2] Approssimazione adiabatica.

Si assume l'aria un ottimo conduttore di calore  
[Referenza E. Fermi, "Termodinamica"]

L'approssimazione funziona bene almeno per la troposfera (fino a 10 km)

$$\rho = \rho_0 \left(1 - \frac{\alpha y}{T_0}\right)^\alpha$$

$$\alpha \approx 6.5 \cdot 10^{-3} \frac{\text{K}}{\text{m}}$$

$$T_0 \approx 300 \text{ K}$$

temperatura al livello del mare

$$\alpha = 2.5$$

Nel nostro caso

$$F_{\text{attr}}^* = \frac{\rho}{\rho_0} F_{\text{attr}} (y=0)$$

Nell'eq. di Eulero

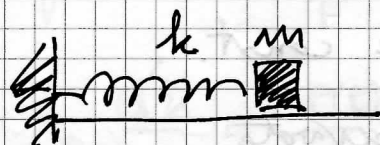
$$B_2 \rightarrow B_2 \cdot \frac{\rho}{\rho_0}$$

LE 22

(1 ora, giovedì 6 ottobre 2011)

## Studio di moti oscillatori

Es. oscillatore armonico in 1-dim



forza di richiamo elastica  $F = -kx$

eq. del moto

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = \frac{F}{m} = -\frac{k}{m} u$$

pariame, m  
semplificata

$$k = m = 2$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + u = 0$$

Soluzione analitica.

Cerchiamo soluzioni del tipo

$$u = e^{\alpha t}$$

$$\dot{u} = \alpha e^{\alpha t}$$

$$\ddot{u} = -\alpha^2 e^{\alpha t}$$

$$-\alpha^2 e^{\alpha t} + e^{\alpha t} = 0$$

$$e^{\alpha t} (1 - \alpha^2) = 0$$

$$\alpha = \pm 1$$

soluzione generale

$$u(t) = A_1 e^{t} + A_2 e^{-t}$$

Impongo le condizioni iniziali:

$$u(t=0) = 1$$

$$1 = A_1 + A_2$$

$$\dot{u}(t=0) = 0$$

$$A_1 - A_2 = 0$$

$$\hookrightarrow A_1 = A_2$$

$$A_1 = A_2 = \frac{1}{2}$$

soluzione

$$u(t) = \frac{e^{t} + e^{-t}}{2} = \cos(t)$$

$$\dot{u}(t) = -\sin(t)$$

Calcoliamo l'energia totale del sistema

$$E(t) = \frac{1}{2} k u^2 + \frac{1}{2} m v^2 = w^2(t) + v^2(t)$$

$$E(t) = \cos^2 t + \sin^2 t = 1 = \text{const.}$$

L'energia è una quantità conservata.

Il moto rappresenta oscillazioni con periodo  $T = 2\pi$

Risolviamo il problema con il metodo di Eulero che abbiamo introdotto la lezione precedente

eq. di partenza  $\frac{d^2 u}{dt^2} + u = 0$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = -u \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} u_{j+1} = u_j + h v_j \\ v_{j+1} = v_j - h u_j \end{array} \right.$$

Calcoliamo l'energia

$$\begin{aligned} E_{j+1} &= f(u_{j+1}, v_{j+1}) = u_{j+1}^2 + v_{j+1}^2 \\ &= (u_j + h v_j)^2 + (v_j - h u_j)^2 \\ &= u_j^2 + h^2 v_j^2 + 2 h u_j v_j + v_j^2 + h^2 u_j^2 - 2 h u_j v_j \\ &= u_j^2 (1+h^2) + v_j^2 (1+h^2) = (u_j^2 + v_j^2) (1+h^2) \end{aligned}$$

$$E_{j+1} = E_j (1+h^2)$$

L'energia del sistema aumenta di un termine  $1+h^2$ .

la soluzione non è stabile!

Un'alternativa è usare il Metodo di Euler-Cramer.

Riprendiamo eq. del moto (1-dim, caso generale)

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = \frac{F(t)}{m} \Rightarrow \begin{cases} \frac{dv}{dt} = v \\ \frac{du}{dt} = \frac{F(t)}{m} \end{cases}$$

metodo di Euler

$$\begin{cases} v_{j+1} = v_j + \frac{F}{m} h \\ u_{j+1} = u_j + v_j h \end{cases}$$

con Euler-Cramer:

- 1) calcolare esplicitamente delle velocità
- 2) calcolare nuova coordinata usando le velocità a  $t+$

$$\begin{array}{l} \text{Euler} \\ \text{Cramer} \end{array} \begin{cases} v_{j+1} = v_j + \frac{F}{m} h \\ u_{j+1} = u_j + \boxed{v_{j+1}} h \end{cases}$$

Nel caso dell'oscillatore armonico 1-dim  $\left( \frac{d^2 u}{dt^2} = -u \right)$

abbiamo

$$\begin{cases} v_{j+1} = v_j - h u_j \\ u_{j+1} = u_j + h v_{j+1} = u_j + h(v_j - h u_j) = u_j(1-h^2) \end{cases}$$

Verifichiamo la conservazione dell'energia

$$\begin{aligned} E_{j+1} &= u_{j+1}^2 + v_{j+1}^2 \\ &= [u_j(1-h^2) + h v_j]^2 + [v_j - h u_j]^2 \\ &= u_j^2 (1+h)^2 (1-h)^2 + h^2 v_j^2 + 2h(1-h^2) u_j v_j + \\ &\quad + h^2 u_j^2 + v_j^2 - 2h u_j v_j \end{aligned}$$

$$= x_j^2 \left\{ h^2 + (1-h^2)^2 \right\} + v_j^2 \left\{ h^2 + 1 \right\} + 2h x_j v_j \left\{ \cancel{1-h^2} - \cancel{1} \right\}$$

$$= x_j^2 \left\{ h^2 + 1 + h^4 - 2h^2 \right\} + v_j^2 (1+h^2) - 2h^3 x_j v_j$$

$$= x_j^2 (h^4 - h^2 + 1) + v_j^2 (1+h^2) - 2h^3 x_j v_j$$

⋮

in qualche modo  
~~vanno~~ i vari termini  
 si compensano ed il  
 metodo è stabile.

In generale, i metodi numerici per risolvere le equazioni del moto rientrano in due categorie:

I) OPEN or PREDICTOR methods:

prevedono  $w_{j+1}$  esclusivamente in funzione  
 di grandezze già conosciute o calcolate  
 in step precedenti

II) CLOSED or PREDICTOR/CORRECTOR methods:

doppio: prevedono un valore  $w'_{j+1}$  con  
 una formula di predizione e successivamente  
 usano una funzione  $f(w'_{j+1})$  per correggere  
 il valore  $w'_{j+1}$  ed ottenere  $w_{j+1}$

La procedura predittiva/correttiva può essere iterata fino a quando la correzione diventa piccola a piacere.

## Verifichiamo ora altri metodi

### Metodo di Verlet

Utilizza lo sviluppo in serie di Taylor ad ordini sup

Espandiamo le coordinate attorno a  $t$

$$(a) \quad u(t+h) = u(t) + v(t)h + \frac{F}{m} \frac{h^2}{2!} + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3 u}{dt^3} + O(h^4)$$

Similmente calcoliamo uno sviluppo all'indietro

$$(b) \quad u(t-h) = u(t) - v(t)h + \frac{F}{m} \frac{h^2}{2!} - \frac{h^3}{3!} \frac{d^3 u}{dt^3} + O(h^4)$$

Sommando le due espansioni:

$$u(t+h) + u(t-h) = 2u(t) + \frac{F}{m} h^2 + O(h^4)$$

che può essere riscritta come

$$u(t+h) = 2u(t) - u(t-h) + \frac{F}{m} h^2$$

Il metodo di Verlet è:

- veloce, richiede poca memoria
- non calcola direttamente le velocità e non le usa per calcolare la nuova posizione
- per quanto riguarda la conservazione di energia mostra piccoli drift su tempi lunghi



sottraendo le eq. (1a) e (1b) di pagina precedente

$$x(t+h) - x(t-h) = 2hv(t) + O(h^3)$$

$$v(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h} + O(h^2)$$

La velocità è accurata soltanto all'ordine  $h^2$

Per essere importante calcolare l'energia cinetica del sistema, per sempre in calcoli di dinamica molecolare.

Esistono parecchi algoritmi equivalenti allo schema di Verlet.

Una classe di algoritmi semplici è chiamata

leap-Frog: [dal dizionario: leap frog: giocare alla cordina]

→ calcolano le velocità ad intervalli temporali semi-integer ed usano le velocità per calcolare la nuova posizione.

$$v\left(t - \frac{h}{2}\right) = \frac{x(t) - x(t-h)}{h}$$

$$v\left(t + \frac{h}{2}\right) = \frac{x(t+h) - x(t)}{h}$$

$$x(t+h) = x(t) + hv\left(t + \frac{h}{2}\right)$$

$$e \quad v\left(t + \frac{h}{2}\right) = v\left(t - \frac{h}{2}\right) + h \frac{F}{m}$$

Altro schema equivalente a quello di Verlet  
 È simile all'espansione di Taylor per le coordinate

$$n(t+h) = n(t) + v(t)h + \frac{F}{m} \frac{h^2}{2} + O(h^3)$$

poi calcolate le nuove forze  $F(t+h)$   
 calcolate le velocità come

$$v(t+h) = v(t) + \frac{F(t+h) + F(t)}{2m} \cdot h$$

Questo schema è equivalente all'algoritmo originale di Verlet.

Vediamo infine uno schema di Euler modificato  
 chiamato di Euler - Richardson.

eq. di partenza  $\frac{d^2 u}{dt^2} = \frac{F(t)}{m} = a(t)$

$$a_j = \frac{F(n_j, v_j, t_j)}{m}$$

$$a^* \equiv a_{j+\frac{1}{2}}$$

iterabili  
 calcolate  
 in  
 $t + \frac{h}{2}$ 

$$\left. \begin{aligned} v^* &= v_j + \frac{a_j}{2} h \\ n^* &= n_j + \frac{v_j}{2} h \\ a^* &= \frac{F(n^*, v^*, t + \frac{h}{2})}{m} \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} v^* &\equiv v_{j+\frac{1}{2}} \\ n^* &= n_{j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \right\}$$

quindi:

$$v_{j+1} = v_j + a^* h = v_j + a_{j+\frac{1}{2}} h$$

$$n_{j+1} = n_j + v^* h = n_j + v_{j+\frac{1}{2}} h$$

Evolviamo  $v_j$  di uno step temporale  $t+h$

$$v_1 \equiv v_{j+h} = v_j + v_j h + \frac{F}{m} \frac{h^2}{2} + O(h^3)$$

Evolviamo ora le coordinate in due step temporali  $t+\frac{h}{2}$

~~$$x_{j+\frac{1}{2}} = x_j + \frac{1}{2} v_j h + \frac{1}{2} \frac{F}{m} \frac{h^2}{2}$$~~

$$(1) x_{j+\frac{1}{2}} = x_j + v_j \left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2} \frac{F_j}{m} \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

secondo step

$$x_2 \equiv x_{j+1} = x_{j+\frac{1}{2}} + v_{j+\frac{1}{2}} \left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2} \frac{F_{j+\frac{1}{2}}}{m} \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

sostituendo (1) ottengo

$$x_2 \equiv x_{j+1} = x_j + v_j \left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2} a_j \left(\frac{h}{2}\right)^2 + v_{j+\frac{1}{2}} \left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2} a_{j+\frac{1}{2}} \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

$$= x_j + \frac{1}{2} (v_j + v_{j+\frac{1}{2}}) h + \frac{1}{2} (a_j + a_{j+\frac{1}{2}}) \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

$$a_{j+\frac{1}{2}} = a_j + \frac{da_j}{dt} \frac{h}{2}$$

ma perché abbiamo trascurato termini  $O(h^3)$

possiamo scrivere

$$a_{j+\frac{1}{2}} \approx a_j$$

quindi:

$$x_2 \equiv x_{j+1} = x_j + \frac{1}{2} (v_j + v_{j+\frac{1}{2}}) h + a_j \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

Il termine  $2x_2 - x_1$  è accurato a  $h^3$

$$\begin{aligned} 2x_2 - x_1 &= 2x_j + (v_j + v_{j+\frac{1}{2}}) h + 2a_j \left(\frac{h}{2}\right)^2 + 2O(h^3) \\ &\quad - x_j - v_j h - a_j \frac{h^2}{2} = O(h^3) \\ &= x_j + v_{j+\frac{1}{2}} h + O(h^3) \end{aligned}$$

È possibile dimostrare che una simile precisione si ottiene anche per  $v_{j+1}$

Il metodo di Euler-Richardson è equivalente ad un algoritmo di Runge-Kutta del II ordine.