

A leapfrog módszer

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2022. február 28.

Közönséges elsőrendű differenciálegyenletek rendszere:

$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_i)$$

Az $\mathbf{y} = (y_1, y_2 \dots)^T$ több változó vektora, pl fázistér: koordináták és sebességek, x változó skalár, pl az idő

Integrálás:

- kezeljük a problémát iteratívan
- írjuk át a dx differenciálokat véges Δx differenciákra
- a Δx lépéshosszt általában h -val jelöljük
- léptessük a változók értékét diszkrét lépésekben
- az összes változót egyszerre!

Az n -ik lépésben:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \cdot \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n)$$

$$x_{n+1} = x_n + h$$

A leapfrog¹ módszer

Másodrendű dinamikai egyenleteknél működik (molekuladinamikában hasonló az ún. Verlet módszer)

- a sebességeket és a koordinátákat külön-külön lépésben frissítjük
- másodrendű módszer, a hiba $O(h^4)$

$$\begin{aligned}a_n &= F(x_n)/m \\v_{n+1/2} &= v_{n-1/2} + \Delta t \cdot a_n \\x_{n+1} &= x_n + \Delta t \cdot v_{n+1/2}\end{aligned}$$

¹ bakugrás

A leapfrog¹ módszer

Másodrendű dinamikai egyenleteknél működik (molekuladinamikában hasonló az ún. Verlet módszer)

- a sebességeket és a koordinátákat külön-külön lépésben frissítjük
- másodrendű módszer, a hiba $O(h^4)$

$$\begin{aligned}a_n &= F(x_n)/m \\v_{n+1/2} &= v_{n-1/2} + \Delta t \cdot a_n \\x_{n+1} &= x_n + \Delta t \cdot v_{n+1/2}\end{aligned}$$

Ez még átírható így is:

$$\begin{aligned}a_n &= F(x_n)/m \\x_{n+1} &= x_n + v_n \cdot \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2 \\v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{2} (a_n + a_{n+1}) \cdot \Delta t\end{aligned}$$

A hiba lecsökkent, mégis ugyanannyi számolást kell csak végezni!

¹bakugrás

A leapfrog módszerről megmutatható, hogy:

- az időintegrálás szempontjából invertálható
- szimplektikus, vagyis az energiamegmaradást is teljesül (“symplectic integrator”).