

Algoritmus pre riešenie pohybových rovníc by mal spĺňať nasledujúce body:

1. Mal by byť rýchly.
2. Mal by umožniť použiť dlhý časový krok  $\delta t$ .
3. Mal by čo najlepšie reprodukovat' skutočnú dráhu.
4. Mal by zabezpečiť zákon zachovania energie a hybnosti a byť časovo reverzibilný.
5. Mal by byť jednoduchý a mal by sa dať ľahko naprogramovať.

Jedným z vhodných algoritmov je Verletov algoritmus a jeho modifikácie „leap frog” a „velocity Verlet”. V prípade originálneho Verletovho algoritmu vypočítame nové pozície častíc nasledovne

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \delta t) + \delta t^2 \mathbf{a}(t) \quad (4-18)$$

Pre výpočet trajektórií jednotlivých častíc nie je nutné počítať aj ich rýchlosti. V prípade, že potrebujeme určiť aj kinetickú energiu, rýchlosti vieme dopočítať pomocou vzťahu

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{r}(t + \delta t) - \mathbf{r}(t - \delta t)}{2\delta t} \quad (4-19)$$

Tento algoritmus je časovo-reverzibilný a veľmi dobre zachováva hybnosť a energiu aj pri dlhých časových krokoch. Problémom je pripočítavanie malej hodnoty člena s  $\delta t^2$  k rozdielu veľkých hodnôt, čo vedie k numerickej nepresnosti.

Jednou z modifikácií je schéma „leap frog“, ktorá má obmedziť práve spomenutý nedostatok originálneho Verletovho algoritmu. Vyzerá nasledovne

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{1}{2}\delta t\right) = \mathbf{v}\left(t - \frac{1}{2}\delta t\right) + \delta t \mathbf{a}(t) \quad (4-20)$$

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \delta t \mathbf{v}\left(t + \frac{1}{2}\delta t\right) \quad (4-21)$$

aktuálnu rýchlosť vypočítame ako

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{v}\left(t + \frac{1}{2}\delta t\right) + \mathbf{v}\left(t - \frac{1}{2}\delta t\right) \right\} \quad (4-22)$$

V tomto prípade už nenadobúdame malú hodnotu ako rozdiel dvoch veľkých, čím zmenšíme numerickú chybu. Problémom je, že musíme ukladať polohu, zrýchlenie a rýchlosť v rôznych časových okamihoch.

Algoritmus, ktorý uchováva pozíciu, rýchlosť aj zrýchlenie v rovnakom čase  $t$  a ktorý minimalizuje chybu pri zaokrúhľovaní sa nazýva „velocity Verlet”. Má tvar

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \delta t \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \mathbf{a}(t) \quad (4-23)$$

$$\mathbf{v}(t + \delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \delta t [\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \delta t)] \quad (4-24)$$

Jednoduchosť, pohodlnosť a numerická stabilita zaraďujú tento algoritmus medzi jeden z najpoužívanejších.