

Численное моделирование упругого моментного взаимодействия тел-точек

Работу выполнил студент группы 5040103/20101 Кухарски Филипп

Научный руководитель Иванова Елена Александровна, профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н., доцент

Цель и задачи работы

Цель работы: исследование и моделирование упругого моментного взаимодействия тел-точек

Задачи работы:

- Вывести систему уравнений упругого моментного взаимодействия тел-точек
- Численно решить систему уравнений несколькими методами
- Сравнить между собой численные методы решения
- Проанализировать динамику системы диполей

Тело-точка

Описание положения:

$r(t)$ – радиус-вектор положения,

$v(t) = \dot{r}(t)$ – трансляционная скорость,

$P(t)$ – тензор поворота,

$\omega = -\frac{1}{2} \left(\dot{P}(t) P^T(t) \right)_x$ – угловая скорость,

$K = \frac{1}{2} m v \cdot v + \frac{1}{2} \omega \cdot J \cdot \omega$ – кинетическая энергия,

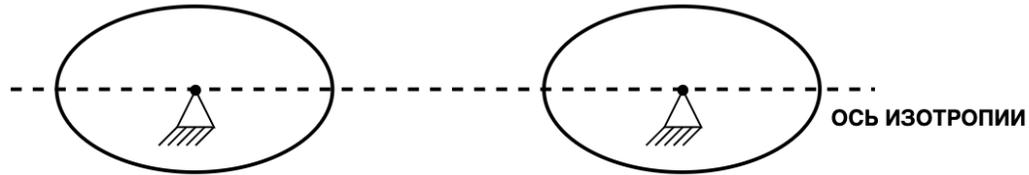
$K_1 = m v$ – количество движения,

$K_2 = J \cdot \omega$ – собственный кинетический момент,

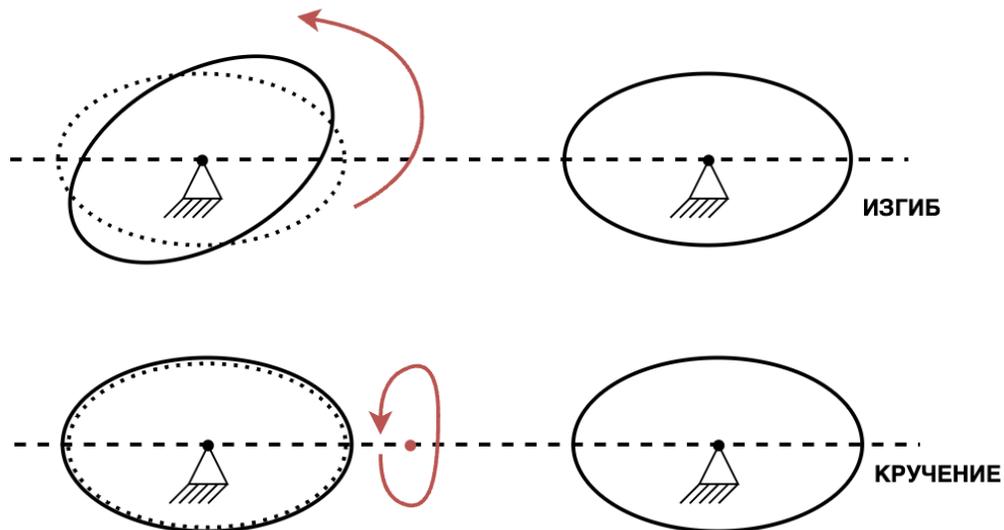
$K_2^Q = (r - r_Q) \times K_1 + K_2$ – собственный кинетический момент, рассчитанный относительно опорной точки Q.

Постановка задачи

Отсчетная конфигурация ($M = 0$):



Возникновение возвращающего момента:



- 1) Взаимодействие только по вращательным степеням свободы
- 2) Закрепление исключительно для простоты моделирования
- 3) Рассмотрение трансверсально изотропного потенциала взаимодействия

Взаимодействие в системе двух тел-точек

Баланс количества движения:

$$\dot{K}_1(A) = F_1 + F_1^e, \quad \dot{K}_1(B) = F_2 + F_2^e$$

Баланс кинетического момента:

$$\dot{K}_2(A) = L_1 + L_1^e, \quad \dot{K}_2(B) = L_2 + L_2^e$$

Баланс энергии:

$$[K(A) + K(B) + U] \cdot = F_1^e \cdot v_1 + L_1^e \cdot \omega_1 + F_2^e \cdot v_2 + L_2^e \cdot \omega_2$$

Из баланса энергии с учетом баланса количества движения и кинетического момента следует:

$$\dot{U} = -F_1 \cdot v_1 - L_1 \cdot \omega_1 - F_2 \cdot v_2 - L_2 \cdot \omega_2$$

Это уравнение используется для дальнейшего вывода определяющих уравнений.

Взаимодействие в системе двух тел-точек

Введем обозначения:

$$r = r_2 - r_1$$

$$F = F_1 = -F_2$$

$$M = L_1 - \frac{1}{2}r \times F_1 = -L_2 - \frac{1}{2}r \times F_2$$

Баланс энергии в приведенной форме:

$$\dot{U} = F \cdot \left[\dot{r} - \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2) \times r \right] + M \cdot (\omega_2 - \omega_1)$$

Чисто моментное взаимодействие

Баланс энергии: $\dot{U} = M \cdot (\omega_2 - \omega_1) \Rightarrow \dot{U} = M^* \cdot \dot{\Phi}$, где:

$M^* = M \cdot P_1 \cdot Z^{-1}(\Phi) \equiv M \cdot P_2 \cdot Z^{-T}(\Phi)$, а Φ определяется из уравнения $\dot{\Phi} = Z(\Phi) \cdot \tilde{\omega}$

Здесь $Z(\Phi)$ – тензор Жилина, определяемый формулой:

$$Z(\Phi) = E - \frac{1}{2}R + \frac{1 - g(\Phi)}{\Phi^2}R^2, \quad R = \Phi \times E, \quad g(\Phi) = \frac{\Phi \sin \Phi}{2(1 - \cos \Phi)},$$

а $\tilde{\omega}$ - относительная угловая скорость, соответствующая тензору относительного поворота $\tilde{P} = P_2 \cdot P_1^T$

Трансверсально изотропный потенциал взаимодействия:

$U = U(\Phi^2, k \cdot \Phi)$, где k – направление изотропии.

Соотношение Коши-Грина для M^* :

$$M^* = 2 \frac{\partial U(\Phi^2, k \cdot \Phi)}{\partial \Phi^2} \Phi + \frac{\partial U(\Phi^2, k \cdot \Phi)}{\partial k \cdot \Phi} k$$

Система уравнений взаимодействия

$$\begin{cases} J\dot{\omega} = -M \\ \dot{\Phi} = Z(\Phi) \cdot \omega \end{cases}, \text{ где}$$

$$M = \left[2 \frac{\partial U(\Phi^2, k \cdot \Phi)}{\partial \Phi^2} + \frac{\partial U(\Phi^2, k \cdot \Phi)}{\partial k \cdot \Phi} \frac{2(1 - \cos \Phi) - \Phi \sin \Phi}{2\Phi^2(1 - \cos \Phi)} (k \cdot \Phi) \right] \Phi +$$

$$+ \frac{\partial U(\Phi^2, k \cdot \Phi)}{\partial k \cdot \Phi} \left[\frac{\Phi \sin \Phi}{2(1 - \cos \Phi)} k + \frac{1}{2} \Phi \times k \right]$$

$$Z(\Phi) = E - \frac{1}{2}R + \frac{1 - g(\Phi)}{\Phi^2}R^2, \quad R = \Phi \times E, \quad g(\Phi) = \frac{\Phi \sin \Phi}{2(1 - \cos \Phi)}$$

$$U = \Phi^2 + (k \cdot \Phi)^2$$

Методы численного решения

- метод Рунге-Кутты 4 порядка
- метод Leapfrog (3 адаптированные схемы)

Метод Рунге-Кутты 4 порядка

$$\omega_{n+1}^1 = \frac{\Delta t}{J} M(\Phi_n)$$

$$\Phi_{n+1}^1 = \Delta t Z(\Phi_n) \cdot \omega_n$$

$$\omega_{n+1}^2 = \frac{\Delta t}{J} M\left(\Phi_n + \frac{\Phi_{n+1}^1}{2}\right)$$

$$\Phi_{n+1}^2 = \Delta t Z\left(\Phi_n + \frac{\Phi_{n+1}^1}{2}\right) \cdot \left(\omega_n + \frac{\omega_{n+1}^1}{2}\right)$$

$$\omega_{n+1}^3 = \frac{\Delta t}{J} M\left(\Phi_n + \frac{\Phi_{n+1}^2}{2}\right)$$

$$\Phi_{n+1}^3 = \Delta t Z\left(\Phi_n + \frac{\Phi_{n+1}^2}{2}\right) \cdot \left(\omega_n + \frac{\omega_{n+1}^2}{2}\right)$$

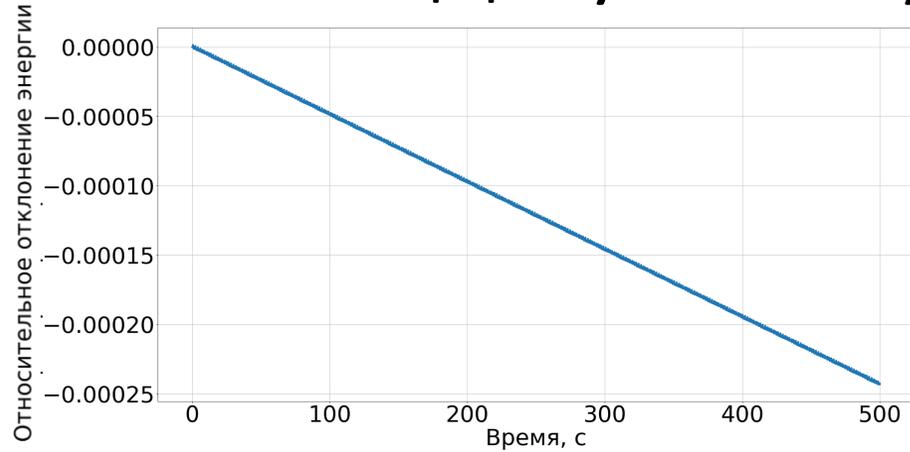
$$\omega_{n+1}^4 = \frac{\Delta t}{J} M(\Phi_n + \Phi_{n+1}^3)$$

$$\Phi_{n+1}^4 = \Delta t Z(\Phi_n + \Phi_{n+1}^3) \cdot (\omega_n + \omega_{n+1}^3)$$

$$\omega_{n+1} = \omega_n + \frac{1}{6} (\omega_{n+1}^1 + 2\omega_{n+1}^2 + 2\omega_{n+1}^3 + \omega_{n+1}^4)$$

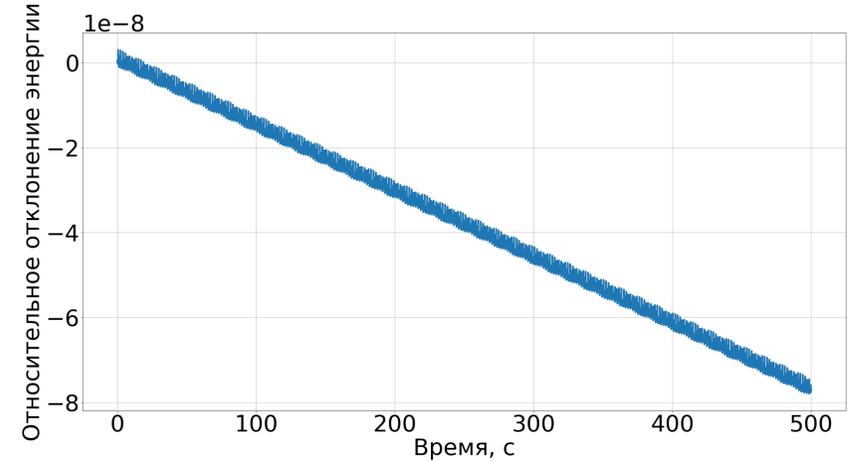
$$\Phi_{n+1} = \Phi_n + \frac{1}{6} (\Phi_{n+1}^1 + 2\Phi_{n+1}^2 + 2\Phi_{n+1}^3 + \Phi_{n+1}^4)$$

Метод Рунге-Кутты. Результаты



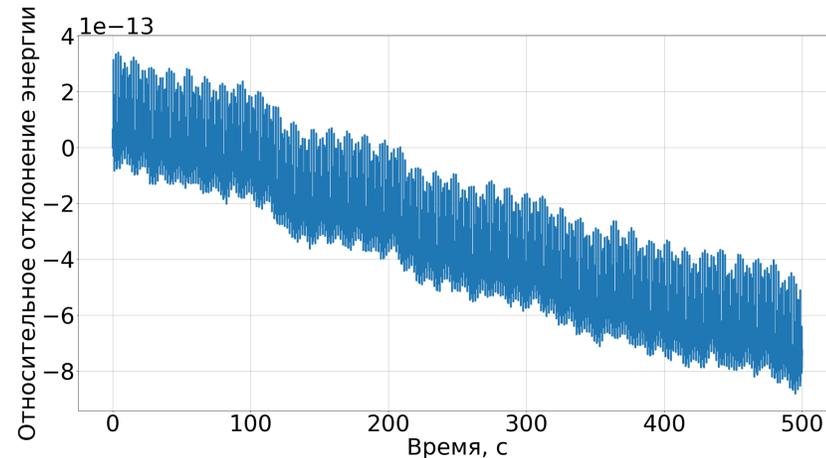
$$\Delta t = 0.005 \text{ с}$$

$$MSE = 2.572\text{E-}05 \text{ H}^2\text{M}^2$$



$$\Delta t = 0.001 \text{ с}$$

$$MSE = 2.591\text{E-}12 \text{ H}^2\text{M}^2$$



$$\Delta t = 0.0001 \text{ с}$$

$$MSE = 2.611\text{E-}21 \text{ H}^2\text{M}^2$$

Метод Leapfrog

Изначально метод был придуман для решения уравнений вида:

$$\ddot{x} = A(x)$$

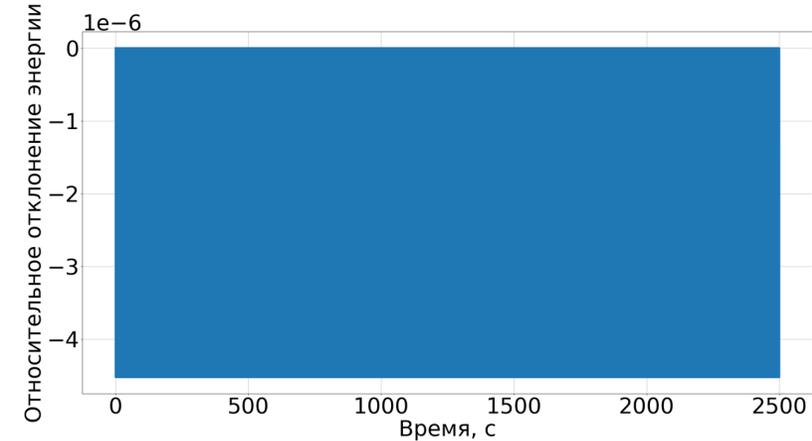
Или в эквивалентной форме:

$$\dot{v} = A(x), \quad \dot{x} = v$$

Исходная система уравнений может быть приведена к похожей форме:

$$\dot{\omega} = -\frac{1}{J}M(\Phi), \quad \dot{\Phi} = \mathbf{Z}(\Phi) \cdot \omega$$

$$Z(\Phi) = E - \frac{1}{2}R + \frac{1 - g(\Phi)}{\Phi^2}R^2, \quad R = \Phi \times E, \quad g(\Phi) = \frac{\Phi \sin \Phi}{2(1 - \cos \Phi)}$$

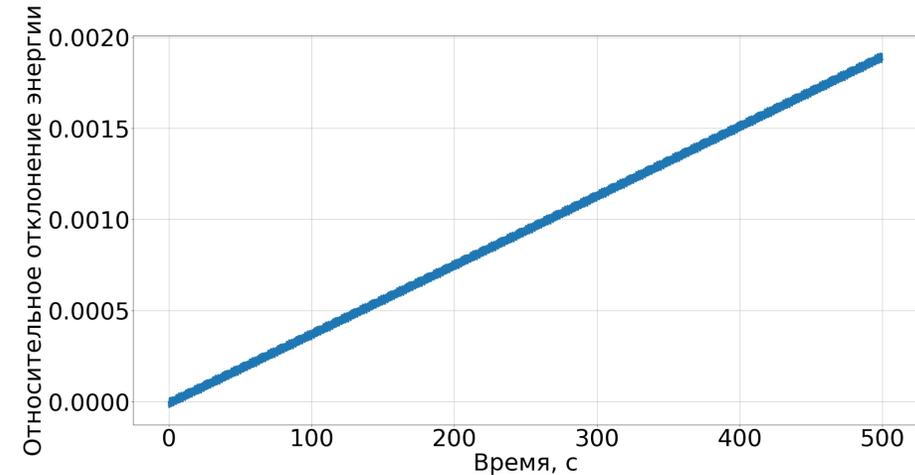


Сохранение энергии в методе Leapfrog

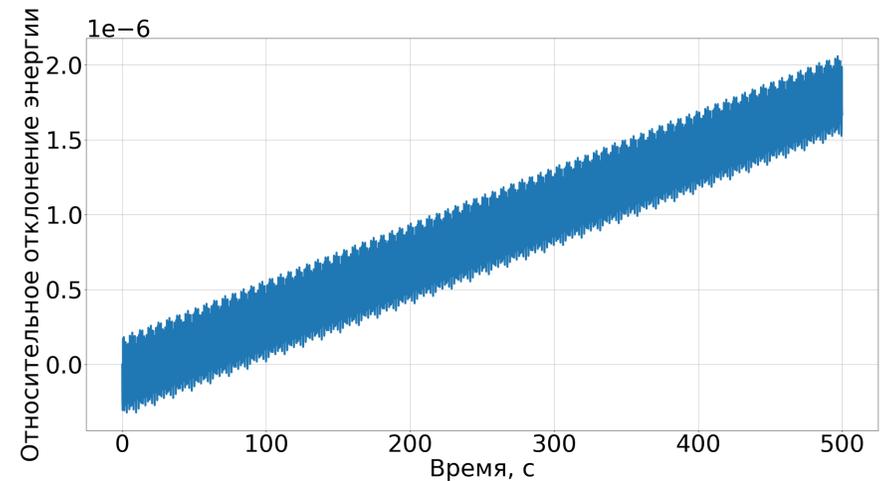
Метод Leapfrog. Первая схема

$$\begin{cases} \omega_{n+1/2} = \omega_n - \frac{\Delta t}{2J} M(\Phi_n) \\ \Phi_{n+1/2} = \Phi_n + \frac{\Delta t}{2} Z(\Phi_n) \cdot \omega_n \end{cases}$$

$$\begin{cases} \omega_{n+1} = \omega_{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2J} M(\Phi_n) \\ \Phi_{n+1} = \Phi_n + \Delta t Z(\Phi_{n+1/2}) \cdot \omega_{n+1/2} \end{cases}$$



$\Delta t = 0.001$ с $MSE = 1.517E-03$ H^2M^2

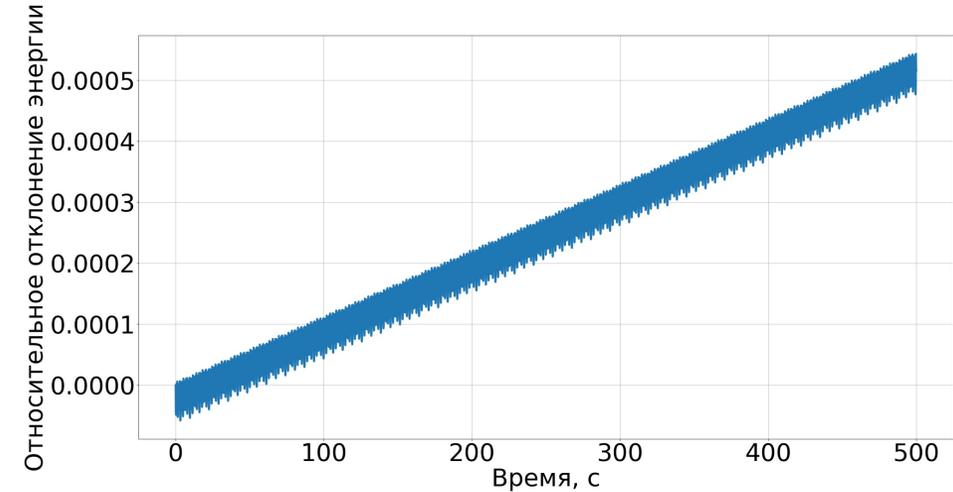


$\Delta t = 0.0001$ с $MSE = 1.134E-09$ H^2M^2

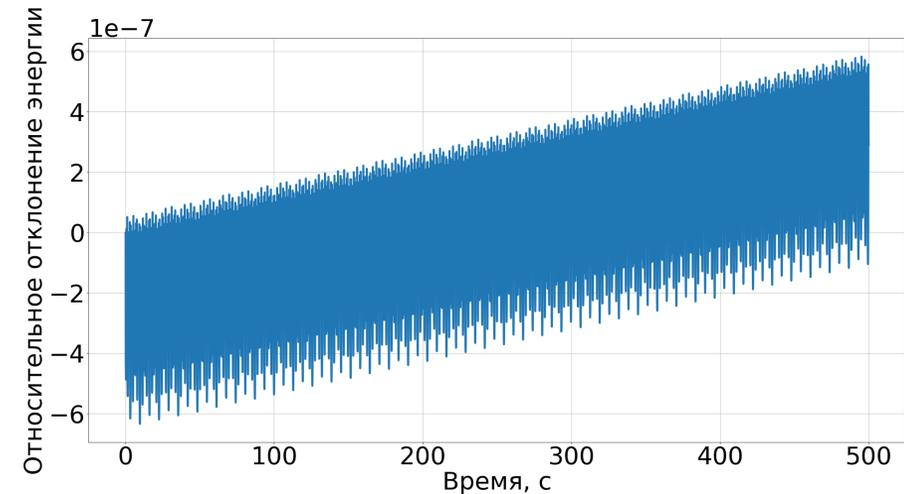
Метод Leapfrog. Вторая схема

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_{n+1/2} = \omega_n - \frac{\Delta t}{2J} M(\Phi_n) \\ \Phi_{n+1/2} = \Phi_n + \frac{\Delta t}{2} Z(\Phi_n) \cdot \omega_{n+1/2} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_{n+1} = \omega_{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2J} M(\Phi_{n+1}) \\ \Phi_{n+1} = \Phi_n + \Delta t Z(\Phi_{n+1/2}) \cdot \omega_{n+1/2} \end{array} \right.$$



$\Delta t = 0.001$ с $MSE = 1.056E-04$ $H^2 M^2$

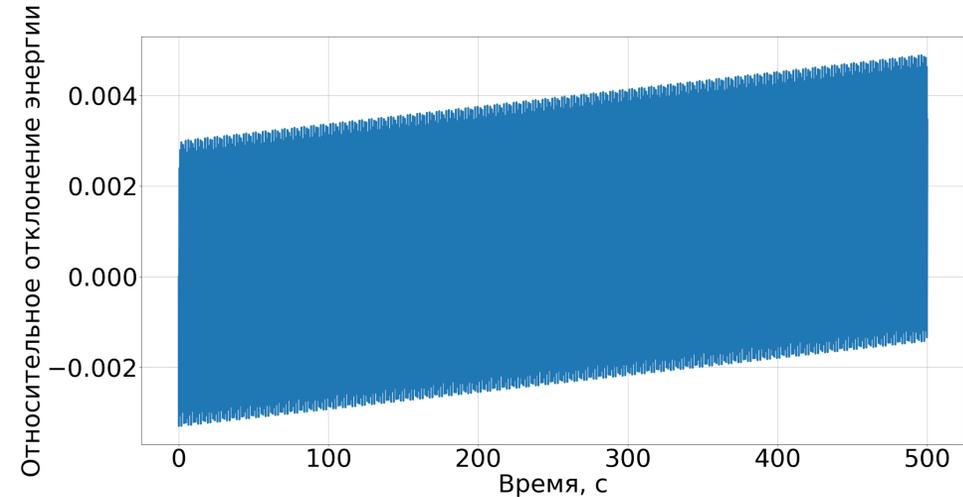


$\Delta t = 0.0001$ с $MSE = 7.406E-11$ $H^2 M^2$

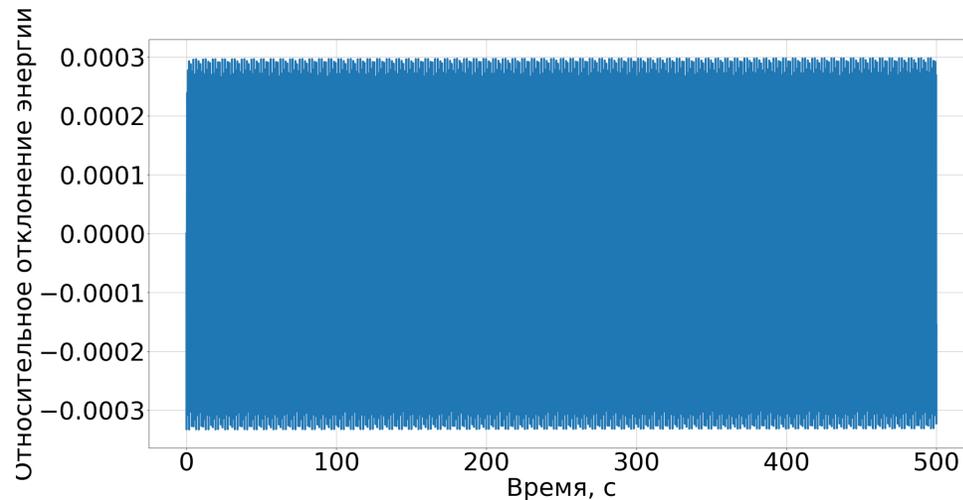
Метод Leapfrog. Третья схема

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_{n+1/2} = \omega_n - \frac{\Delta t}{2J} M(\Phi_n) \\ \Phi_{n+1/2} = \Phi_n + \frac{\Delta t}{2} Z(\Phi_n) \cdot \omega_{n+1/2} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_{n+1} = \omega_n - \frac{\Delta t}{J} M(\Phi_n) \\ \Phi_{n+1} = \Phi_n + \Delta t Z(\Phi_{n+1/2}) \cdot \omega_{n+1} \end{array} \right.$$



$\Delta t = 0.001$ с $MSE = 5.478E-03$ H^2M^2

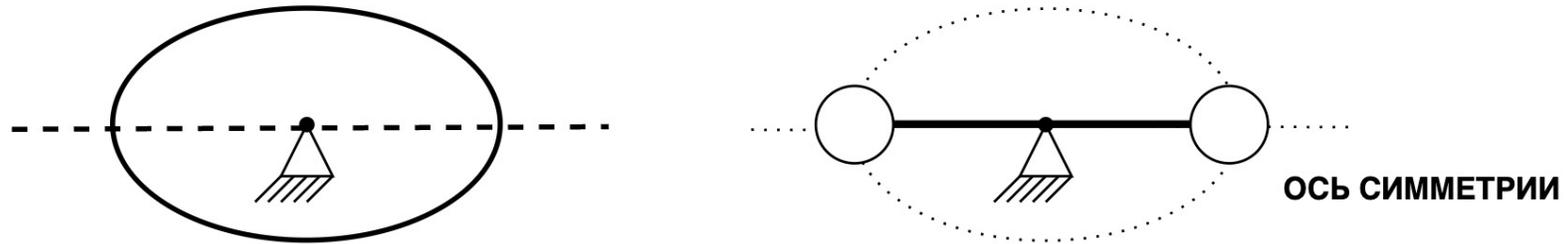


$\Delta t = 0.0001$ с $MSE = 4.337E-05$ H^2M^2

Результаты

Схема	$\Delta t, c$	MSE, $H^2 \cdot m^2$	Относительное отклонение энергии
Рунге-Кутты	0.005	2.572 E-05	2.433 E-04
Рунге-Кутты	0.001	2.591 E-12	7.795 E-08
Рунге-Кутты	0.0001	2.611 E-21	8.813 E-13
Leapfrog I	0.001	1.517 E-03	1.911 E-03
Leapfrog I	0.0001	1.134 E-09	2.058 E-06
Leapfrog II	0.001	1.056 E-04	5.433 E-04
Leapfrog II	0.0001	7.406 E-11	6.336 E-07
Leapfrog III	0.001	5.478 E-03	4.887 E-03
Leapfrog III	0.0001	4.337 E-05	3.328 E-04

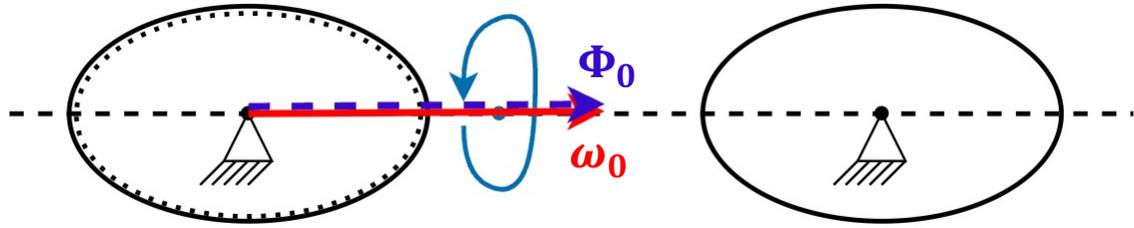
Диполь. Потенциал взаимодействия диполей



$$U(r, \Phi) = -D \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] + \frac{3Dl^2}{r^2} \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] - \frac{3Dl^2}{2r^2} \left[7 \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 4 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \left(4 \frac{\Phi_z^2}{\Phi^2} \left[1 + \left(1 - \frac{\Phi_z^2}{\Phi^2} \right) \cos \Phi \right] + \left(1 - \frac{\Phi_z^2}{\Phi^2} \right)^2 [3 + \cos 2\Phi] \right), \text{ где}$$

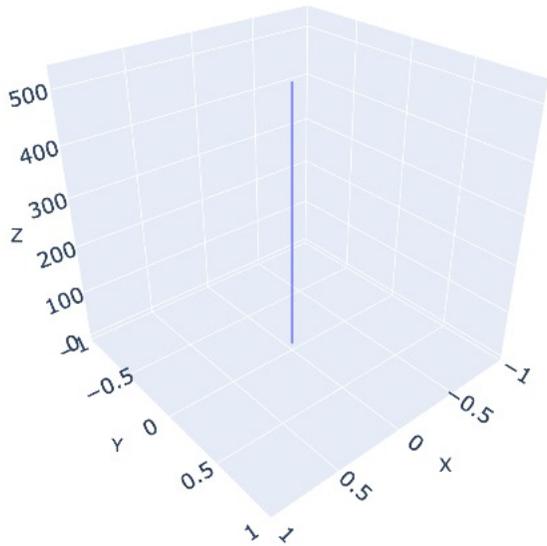
D, r_0 – параметры потенциала Леннарда – Джонса,
 l – длина диполя.

Динамика при начальном повороте диполя вокруг оси симметрии ($\omega_0 \neq 0$).
 $\Phi_0 = (0, 0, c1), \omega_0 = (0, 0, c2)$

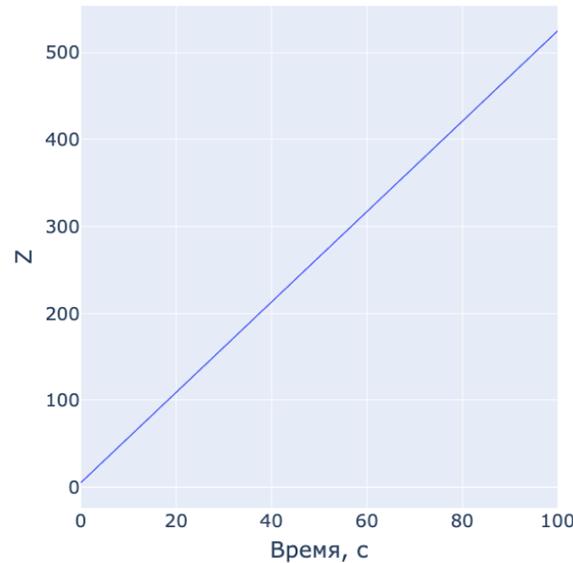


Задаем начальный угол поворота и начальную угловую скорость по оси изотропии.

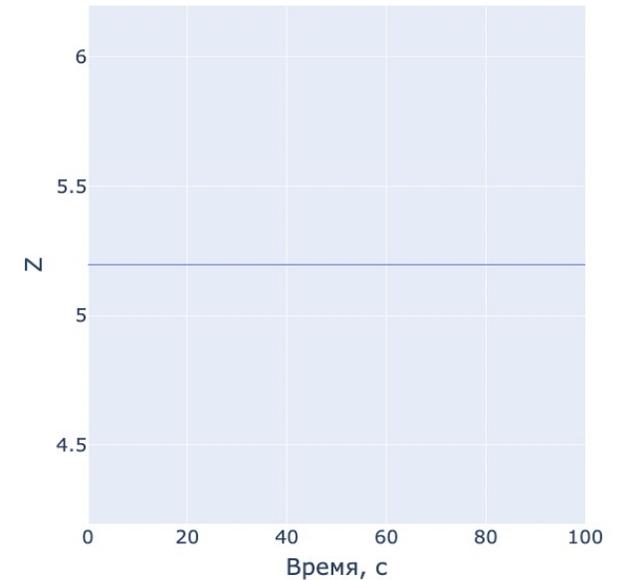
Ожидаем увидеть вращение диполя вокруг собственной оси симметрии, совпадающей с осью изотропии.



Вектор поворота в пространстве

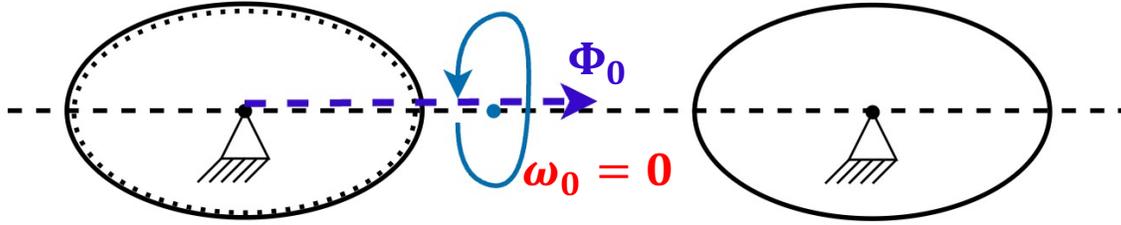


Проекция вектора поворота на ось изотропии



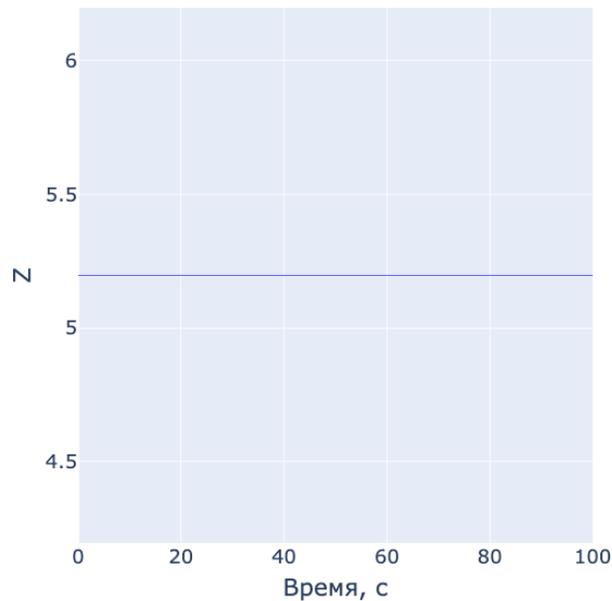
Проекция вектора угловой скорости на ось изотропии

Динамика при начальном повороте диполя вокруг оси симметрии ($\omega_0 = 0$).
 $\Phi_0 = (0, 0, c1)$, $\omega_0 = (0, 0, 0)$

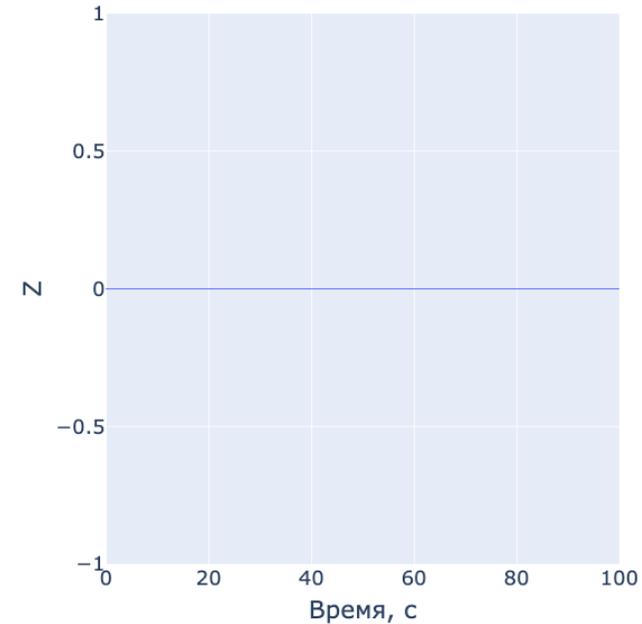


Задаем начальный угол поворота по оси изотропии. Начальная угловая скорость равна нулю.

Ожидаем увидеть, что ни угол, ни угловая скорость изменяться не будут.



Проекция вектора поворота на ось изотропии



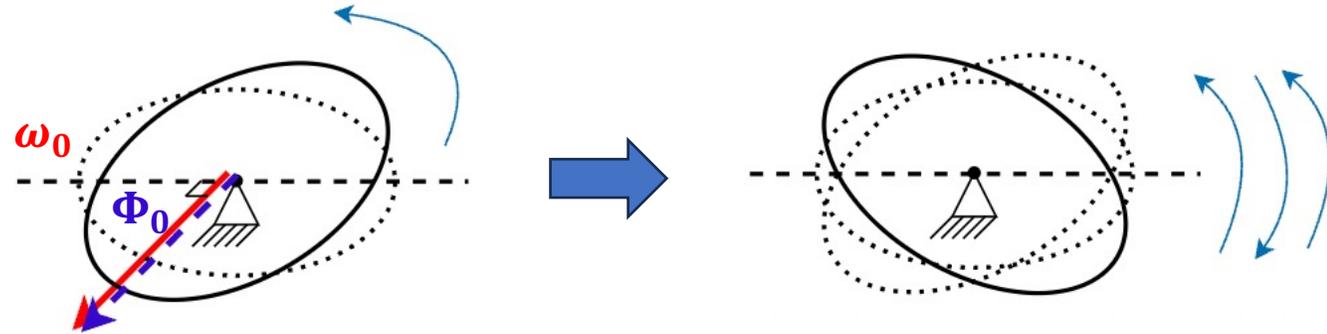
Проекция вектора угловой скорости на ось изотропии

Динамика при отклонении диполя от оси изотропии при коллинеарных начальных векторах.

$$\Phi_0 = (0, c1, 0), \omega_0 = (0, c2, 0)$$

Задаем начальный угол поворота перпендикулярно оси изотропии. Начальная угловая скорость сонаправлена с начальным вектором поворота.

Ожидаем увидеть, что диполь будет совершать колебания относительно оси изотропии.



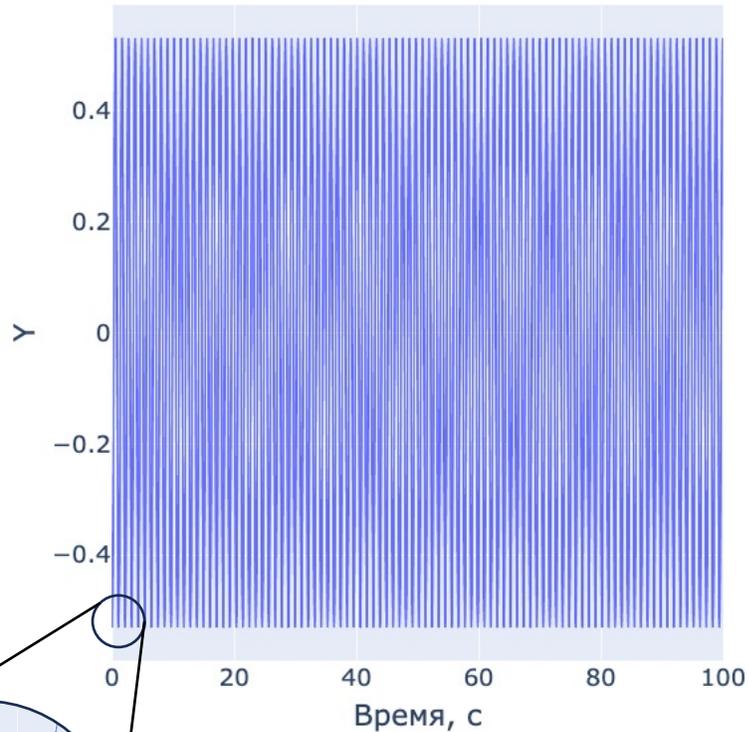
Интересно рассмотреть три случая:

- 1) Начальная угловая скорость имеет такое направление, что еще сильнее отклоняет диполь от положения равновесия;
- 2) Начальная угловая скорость имеет такое направление, что стремится вернуть диполь в положение равновесия;
- 3) Начальная угловая скорость равна нулю.

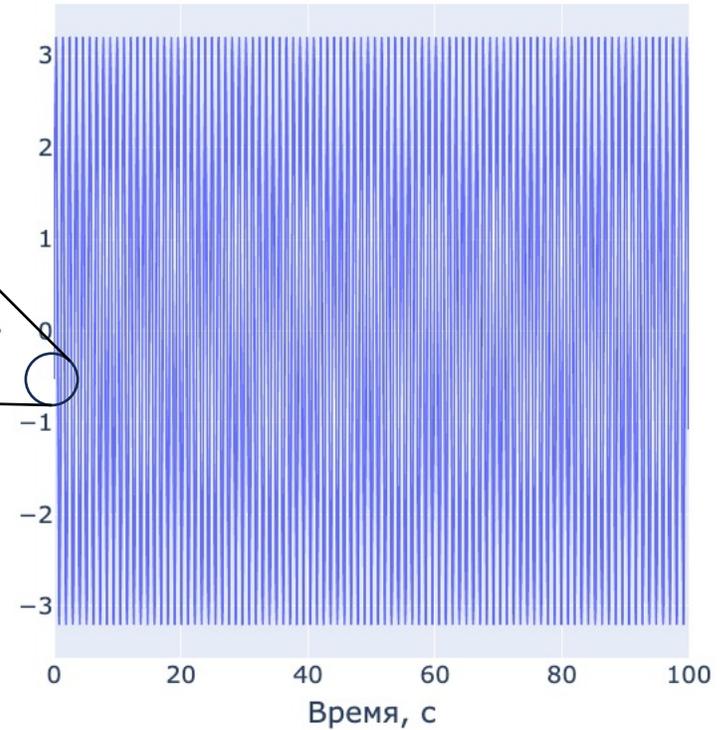
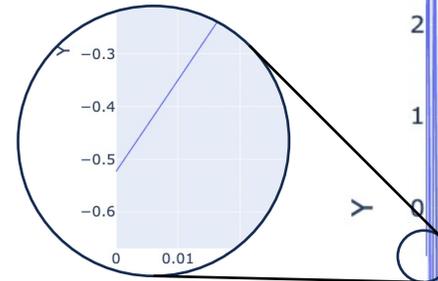
Динамика при отклонении диполя от оси изотропии при коллинеарных начальных векторах.

$$\Phi_0 = (0, c1, 0), \omega_0 = (0, c2, 0)$$

1) Начальная угловая скорость имеет такое направление, что еще сильнее отклоняет диполь от положения равновесия.



Проекция вектора поворота

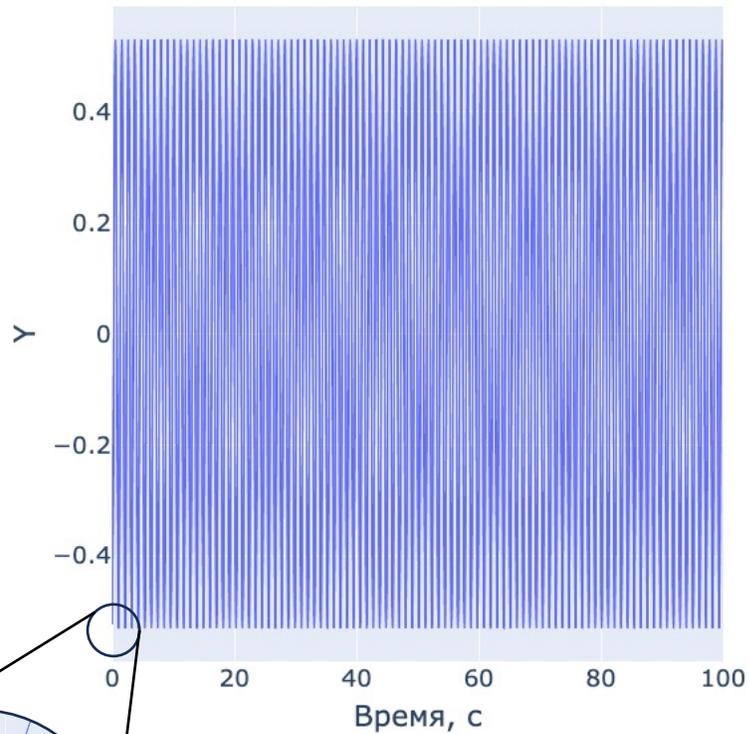


Проекция вектора угловой скорости

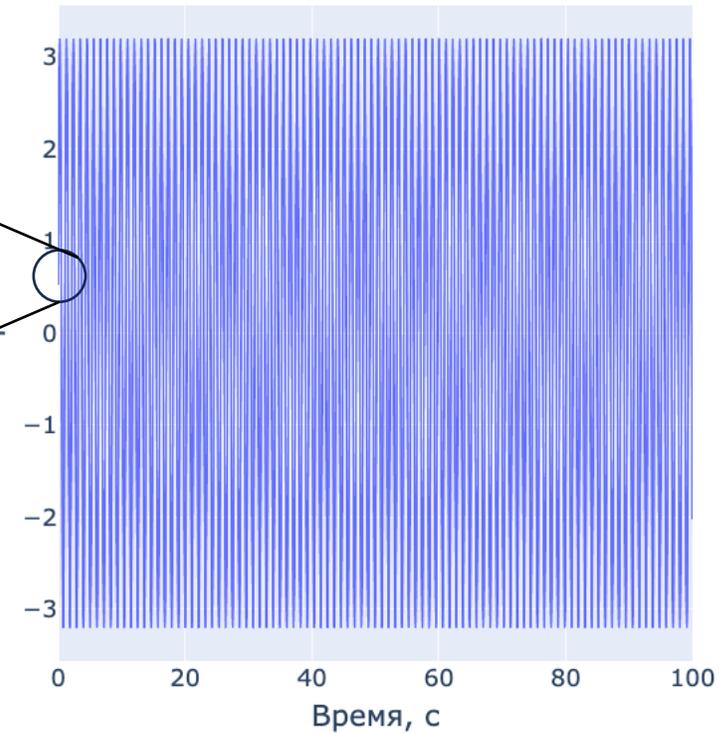
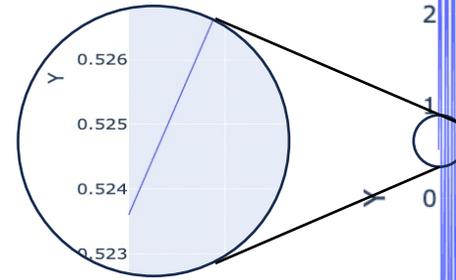
Динамика при отклонении диполя от оси изотропии при коллинеарных начальных векторах.

$$\Phi_0 = (0, c1, 0), \omega_0 = (0, c2, 0)$$

2) Начальная угловая скорость имеет такое направление, что стремится вернуть диполь в положение равновесия.



Проекция вектора поворота

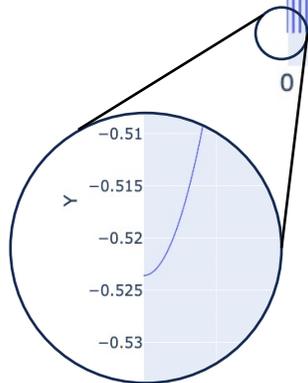
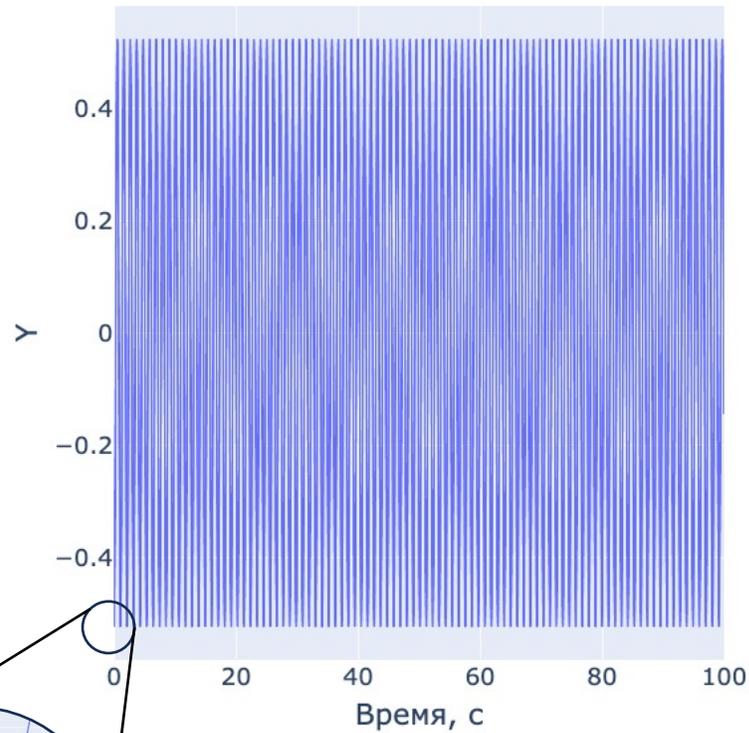


Проекция вектора угловой скорости

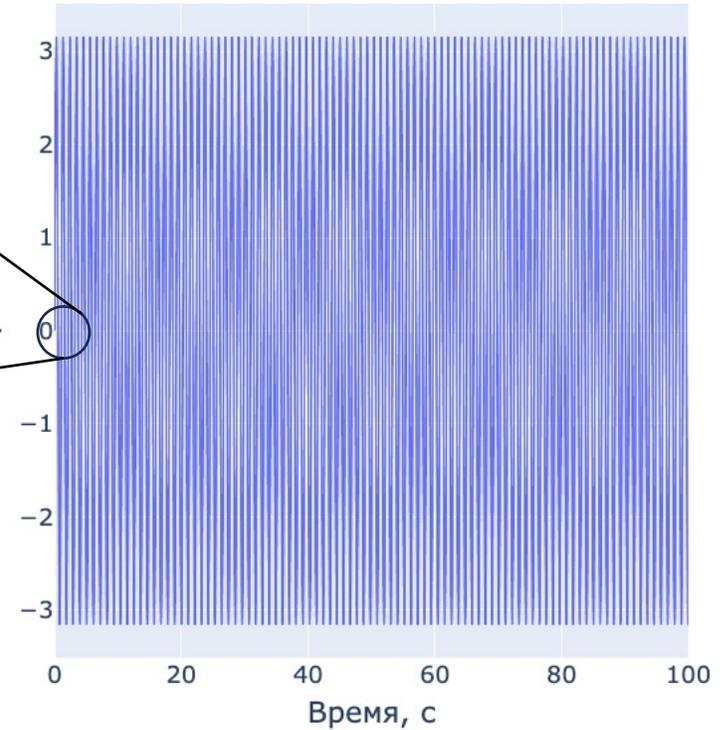
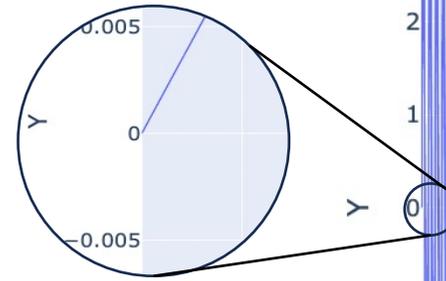
Динамика при отклонении диполя от оси изотропии при коллинеарных начальных векторах.

$$\Phi_0 = (0, c1, 0), \omega_0 = (0, 0, 0)$$

3) Начальная угловая скорость равна нулю.



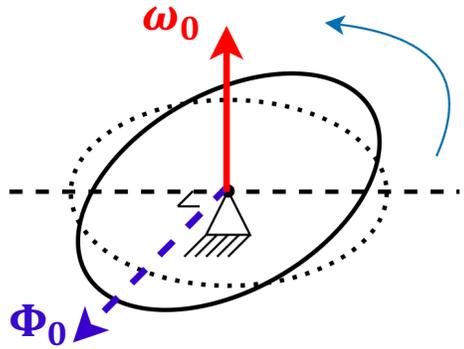
Проекция вектора поворота



Проекция вектора угловой скорости

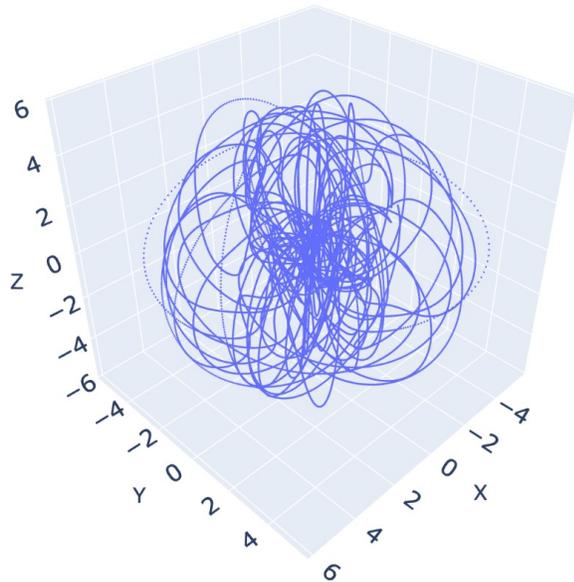
Пространственное вращение диполя.

$$\Phi_0 = (c1, 0, 0), \omega_0 = (0, c2, 0)$$

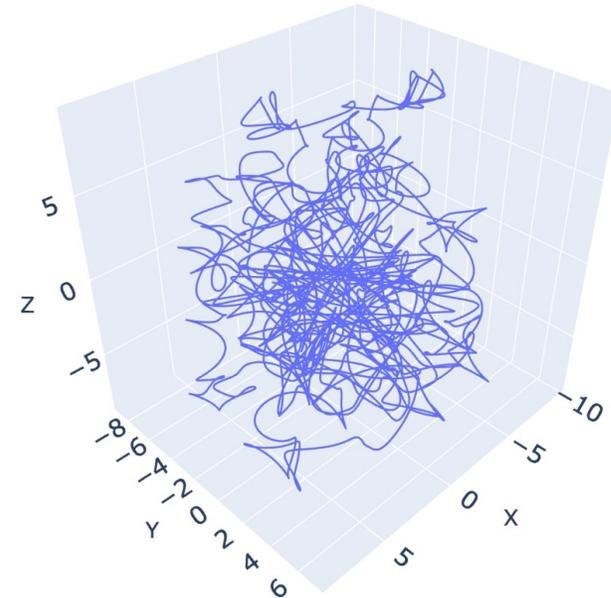


Задаем начальный угол поворота и начальную угловую скорость перпендикулярно оси изотропии.

Ожидаем увидеть пространственное вращение диполя.



Вектор поворота в пространстве



Вектор угловой скорости в пространстве

Выводы, касающиеся численных методов

- Все три адаптированные схемы метода Leapfrog и метод Рунге-Кутты являются устойчивыми.
- Ни одна из схем метода Leapfrog, ни метод Рунге-Кутты не сохраняют энергию. При использовании метода Leapfrog энергия системы увеличивается. При использовании метода Рунге-Кутты энергия в системе уменьшается.
- Метод Рунге-Кутты 4 порядка показал лучшие результаты по среднеквадратичной ошибке: $2.611\text{E}-21 \text{ Н}^2 \cdot \text{м}^2$ при шаге $\Delta t = 0.0001 \text{ с}$.

Выводы, касающиеся динамики системы двух диполей:

- В случае, когда начальные векторы поворота и угловой скорости направлены по оси изотропии, угол поворота со временем увеличивается с постоянной угловой скоростью. Если угловая скорость задана нулевой, то угол остается постоянным.
- В случае, когда начальный вектор угловой скорости задан перпендикулярно оси изотропии, а начальный вектор поворота сонаправлен с начальным вектором поворота или равен нулю, диполь совершает колебательные движения около положения равновесия.
- В случае, когда начальный вектор поворота и начальный вектор угловой скорости неколлинеарны и направлены не вдоль оси изотропии, диполь совершает пространственное вращение.