НИР

Выполнил: Степанов Алексей
Кафедра ТМ
5 курс

Уравнения для дискретных моделей

- Для одного тела:

$$F\left(p, \dots \underline{r}, \underline{\dot{r}}, \underline{\ddot{r}}, \dots, \boldsymbol{A}, \dots\right) = 0$$

- Для системы тел:

$$F_i\left(p_i, \dots, \underline{r_i}, \underline{r_j}, \underline{\dot{r}_i}, \underline{\dot{r}_j}, \underline{r}_i{}', \underline{r_j}{}', \dots, \boldsymbol{A_i}, \dots\right) = 0$$

Безмоментные среды

- Обычно в результате дискретизации модели получаются уравнения вида

$$\mathrm{m}\frac{d^2\underline{V_i}}{dt^2} = \sum_j F_i\left(t, \underline{r_i}, \underline{r_j}, \underline{\dot{r}_i}, \underline{\dot{r}_j}\right)$$

- Должен выполняться закон баланса энергии

Среды с моментным взаимодействием

- К уже имеющимся уравнениям добавляются уравнения вращательного движения

$$\left(\boldsymbol{\theta}_i \cdot \underline{\omega}_i\right)^{\cdot} = \sum_{j \neq i} \underline{M}_j + \underline{M}_i^e$$

- Должен выполняться закон баланса кинетического момента системы.

Качественные свойства физических процессов

- Причинность
- Положительность
- Обратимость
- Консервативность

Метод конечных разностей

- Алгоритм Верле

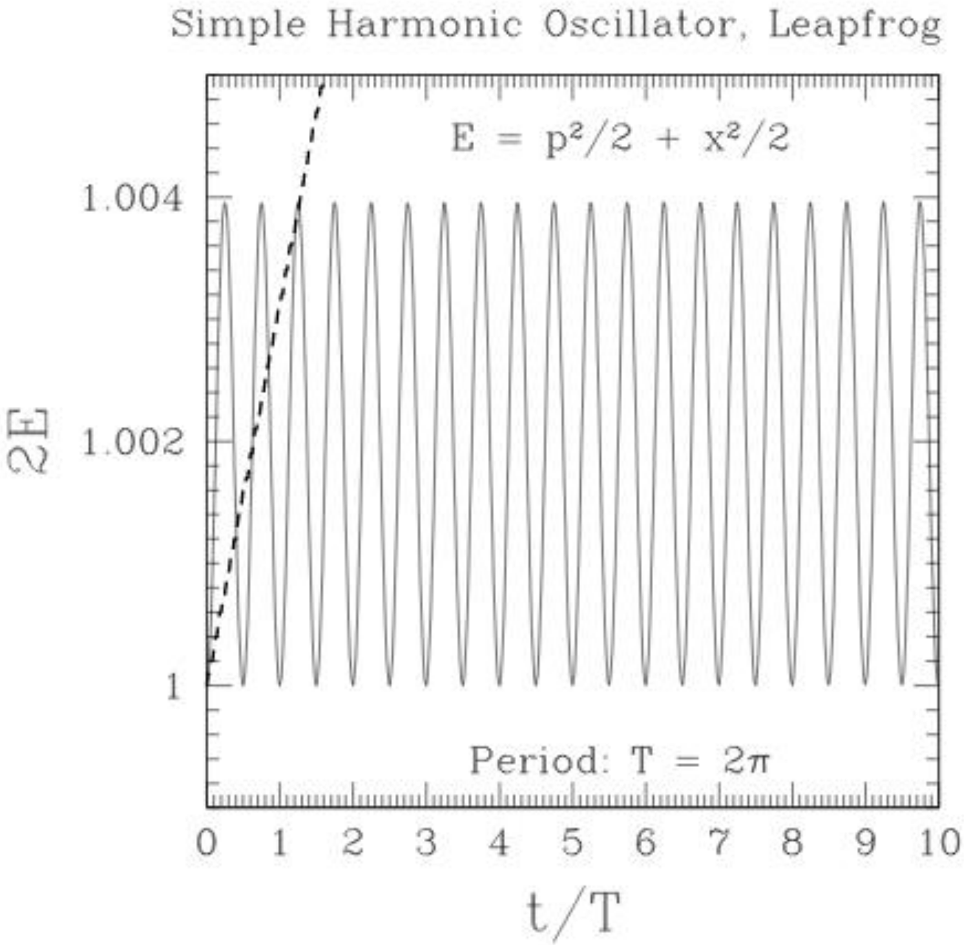
$$x(t+\Delta t) = 2x - x(t-\Delta t) + a\Delta t^2 + o(\Delta t^4)$$

- Метод leapFrog

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + hV_{n+1/2} \\ V_{n+3/2} = V_{n+1/2} + hF(x_{n+1}) \end{cases}$$

- Метод предиктора-корректора
- Методы Рунге-Кутта

Выполнение законов сохранения



Ошибка при интегрировании методом Рунге-Кутта 4 порядка накапливается.
При этом, при интегрировании методом leapfrog значение энергии осциллирует в близи точного решения.

$$\underline{F}(\underline{r}) = -\frac{\underline{r}}{r}\frac{dU(r)}{r}, \text{где } r = |\underline{r}|$$

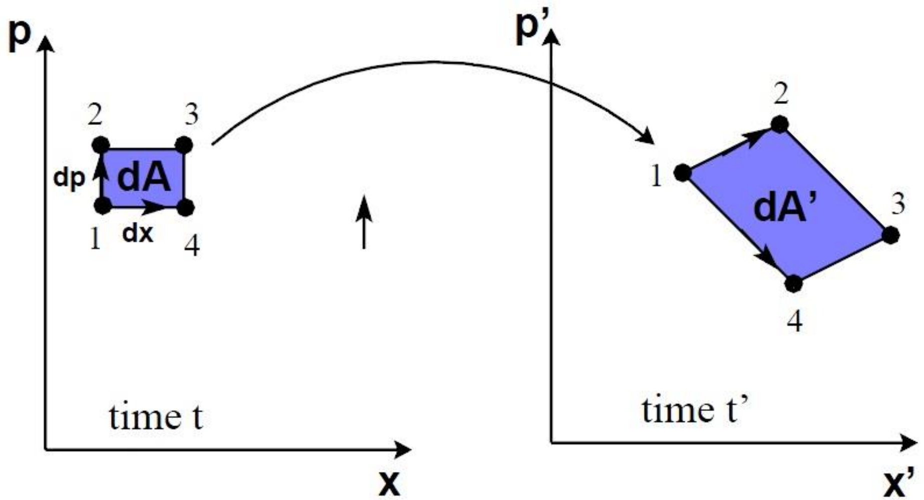
В таком случае, сила метод leapfrog точно сохраняет кинетический момент.

Симплектические методы

- Могут быть сформулированы в зависимости от функции Гамильтона
- В некоторых задачах, где Гамильтониан не может быть записан в виде $H(p, q) = T(p) + U(q)$ можно применять составные симплектические методы
- Некоторые численные схемы могут быть приведены к симплектическим

Что означает симплектичность?

$$dA = dA'$$



Симплектичность означает сохранение площади в фазовом пространстве.

Для численного метода

«Скоростной» алгоритм Верле

$$v_{n+1/2} = v_n + \frac{1}{2} hF(x_n)$$

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1/2}$$

$$v_{n+1} = v_{n+1/2} + \frac{1}{2} hF(x_{n+1})$$

Аналитическая формулировка

$$dA' = \det J \, dA$$

$$J = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial x'}{\partial x} & \dfrac{\partial x'}{\partial p} \\ \dfrac{\partial p'}{\partial x} & \dfrac{\partial p'}{dp} \end{pmatrix}$$

$$\det J = 1$$

Вращательное движение

$$\begin{cases} x_i = x_{i-1} + V_i dt \\ V_i = V_{i-1} + a_i dt \end{cases} \qquad \begin{cases} \underline{\varphi}_i = \underline{\varphi}_{i-1} + \underline{\underline{Z}}\left(\underline{\varphi}_{i-1}\right) \cdot \underline{\omega}_i \\ \underline{\omega}_i = \underline{\omega}_{i-1} + \underline{M}_i dt \end{cases}$$

Видна принципиальная разница при описании поступательного движения и вращательного

Немного теории

- Лагранжиан системы тел:

$$L = \sum_i \frac{M_i\left(\underline{v}_i\right)^2}{2} + \sum_i \frac{\left(\underline{\Omega}_i\right)^2 \boldsymbol{I}_i}{2} - \Pi(\{\underline{r}_i\}, \{\theta_i\})$$

Здесь $\underline{v}_i$ $\underline{\Omega}_i \underline{r}_i \boldsymbol{I}_i$ —скорость, угловая скорость, радиус вектор и тензор инерции. Π — потенциальная энергия, θ_i — ориентация тела.

Поступательное движение

- Уравнение движения центра масс:

$$\underline{\dot{r}_i} = \underline{v_i}$$

$$M_i \underline{\dot{v}_i} = -\nabla\Pi$$

- Численно интегрируется, например, leapfrog

Вращательное движение

- Модификация лагранжиана для одного тела

$$L = \frac{M_i\left(\underline{v}_i\right)^2}{2} + \frac{1}{2}Tr[\dot{\mathbf{Q}} \cdot \boldsymbol{J} \cdot \dot{\mathbf{Q}}^T] - \Pi\left(\{\underline{r}_i\}, \{\theta_i\}\right) - \mathrm{Tr}[\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} - \mathbf{1})]$$

Последнее слагаемое служит для того, чтобы обеспечить ортогональность $\mathbf{Q}$

Список литературы

- A. Peter Young The leapfrog method and other “symplectic” algorithms for integrating Newton’s laws of motion // http://young.physics.ucsc.edu 21.04.14
- A. Dullweber, B. Leimkuhler, R. McLachlan Symplectic splitting methods for rigid body molecular dynamics
- Y Kajima, M.Hiyama, S. Ogata, T. Tamura Exactly Time-Reversible Molecular Dynamics Algorithm for Rigid-Body Systems // Journal of the Physical Society of Japan 80 (2011)
- В.В. Мараев Е.Н. Станкова Основы методов конечных разностей // СПб.: Изд-во С.-Петерб ун-та, 2012
- A symplectic method for rigid-body molecular simulation // Ayla Kol, Brian B. Laird, Benedict J. Leimkuhler