metody dynamiki molekularnej w zastosowaniu do symulacji ciała miękkiego

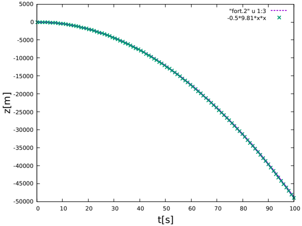
14 marca 2022

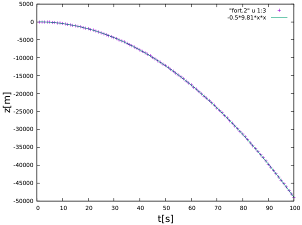
schemat prędkościowy Verleta

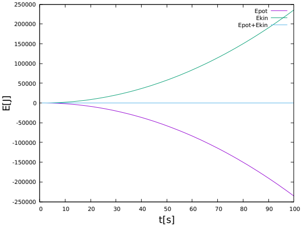
- ciało o położeniu **r**, prędkości **v**, przyspieszeniu **a**
- $\mathbf{r}(r + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{a}(t)$
- $\mathbf{v}(r + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t)\right)$
- schemat jest dokładny dla ruchu jednostajnie przyspieszonego niezależnie od Δt

schemat prędkościowy Verleta

- ciało o masie 0.5kg, rzucone w polu $g_z = -9.81$ m/s^2, z prędkością $(0.5\text{m/s}, 0, 0)$ z wysokości 8m

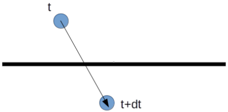






- po lewej tor ciała $z(t)$ - góra krok jedna setna sekundy, doł krok sekunda
- po prawej u górzy energia potencjalna, kinetyczna oraz energia całkowita

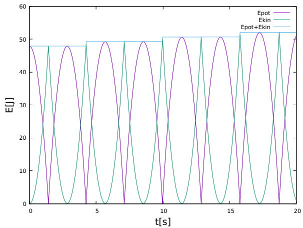
poziom gruntu

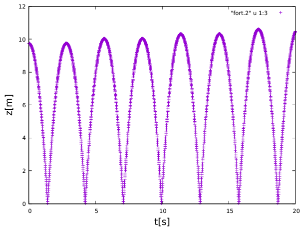


-
- poziom gruntu $z_g = 0$
- jeśli $z(t + dt) < 0$ musimy obsłużyć odbicie
- pomysł obsługi: $z(t + dt) := -z(t + dt)$ oraz $v_z(t + dt) := -v_z(t + dt)$

odbicie

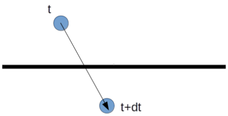
- poziom gruntu $z_g = 0$
- jeśli $z(t + dt) < 0$ musimy obsłużyć odbicie
- pomysł obsługi: $z := -z$ oraz $v_z := -v_z$
- $dt = 0.01$s

- 

- 

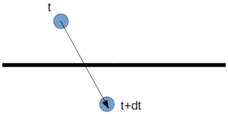
- ewidentnie: przy odbiciach rośnie energia
- dlaczego ?

poziom gruntu



- poziom gruntu $z_g = 0$
- jeśli $z(t + dt) < 0$ musimy obsłużyć odbicie
- pomysł obsługi: $z := -z$ oraz $v_z := -v_z$
- dlatego, że w drugim podstawieniu zachowujemy energię kinetyczną, a w pierwszym zwiększamy potencjalną

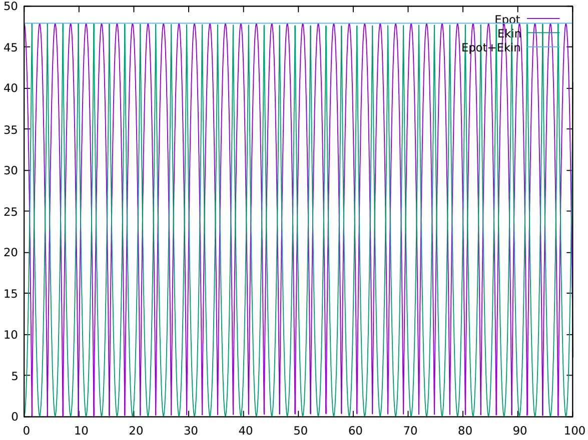
poprawka na odbicie



-
- poziom gruntu $z_g = 0$
- jeśli $z(t + dt) < 0$ musimy obsłużyć odbicie
- zamiast: $z := -z$ oraz $v_z := -v_z$
- zróbmy tak:
- odbijamy położenie: $z := -z$ (*) – mamy przyrost energii potenjalnej o $\Delta E_p = 2mgz$, o tyle powinniśmy zmniejszyć energię kinetyczną, czyli $E'_{kin} - E_{kin} = -\Delta E_p$, przy czym $E'_{kin} = \frac{mv'^2_{kin}}{2}$ ze zmanipulowana prędkością
- $\frac{mv'^2_z}{2} - \frac{mv_z^2}{2} = -2mgz$
- $v_z := v'_z = \sqrt{v_z^2 - 4gz}$ (**)
- obsługa: równania (*) oraz (**)

poprawka na odbicie

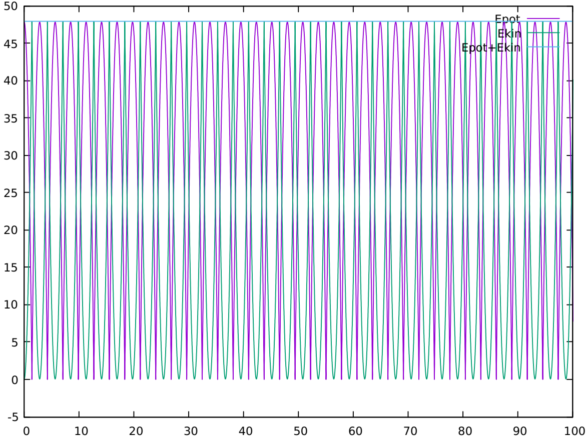
- wynik: energie od czasu



-

poprawka na odbicie

- inny pomysł zachowujący energię: zmiana tylko znaku składowej z wektora prędkości, $v_z = -v_z$



-
- w tej wersji energia jest zachowana, ale pojawią się chwilowo ujemne wartości energii potencjalnej i naruszona zostanie granica ruchu

dwa ciała

- $m_1 = m_2$
- $E_{kin} = \frac{m_1 \mathbf{v}_1^2}{2} + \frac{m_2 \mathbf{v}_2^2}{2}$
- $E_{pot} = m_1 g z_1 + m_2 g z_2 + V(r_{12})$,
- gdzie $V(r_{12})$ -energia potencjalna oddziaływania tych ciał
- np. $V(r_{12}) = \alpha(r_{12} - r_0)^n$, gdzie r_0 - odległość równowagowa, n, oraz α - parametry potencjału
- dla pary ciał mamy:
- $\mathbf{r}_i(r + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{a}_i(t)$
- $\mathbf{v}_i(r + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \Delta t)\right)$
- oraz $\mathbf{a}_i = -\frac{1}{m_i} \nabla_i E_{pot}$

dwa ciała - symulacja

- sumulacja dla : $n = 2$, $\alpha = 10^4 J/m^2$, $r_0 = 0.5$ m
- w chwili początkowej ciała w odległości równowagowej, środek masy na poziomie 10m
- prędkość pozioma ciał 2.1 oraz 1.9 m/s aby dostać obrót
- 1 krok czasowy
-
  - $\mathbf{r}_i(r + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{a}_i(t)$
  - $\mathbf{v}_i(r + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \Delta t) \right)$
  - oraz $\mathbf{a}_i(t) = -\frac{1}{m_i} \nabla_i E_{pot}(r_1(t), r_2(t))$

```
c liczymy sily
call liczsily(r,f,xm,dr)
call shiftr(r,v,f,xm,dt)
fo=f
call liczsily(r,f,xm,dr)
call shiftv(v,f,fo,xm,dt)
c odbij
call odbij(r,v,g)
t=t+dt
```

  - 2ciala.gif

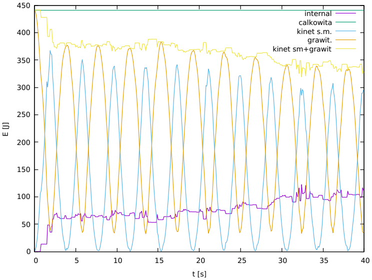
- ciało z 7 punktów: w równowadze szesciokąt foremny + punkt w środku
- potencjał: $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_i \sum_j' V_i(r_{ij})$
- $V_i = \alpha\left(\left(\frac{r_0}{r_{ij}}\right)^{2n} - \left(\frac{r_{ij}}{r_0}\right)^{2n}\right)$
- prim we wzorze – oddziaływanie najbliższych sąsiadów. rachunek dla $n = 4$.
- brzydkapilka.gif

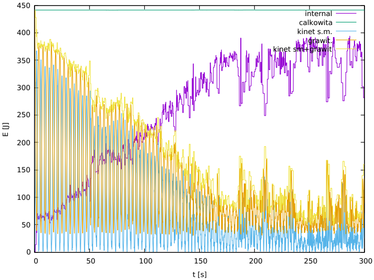
energia środka masy i energia wewnętrzna

- położenie środka masy $\mathbf{r}_{CM} = \frac{\sum_i m_i \mathbf{r}_i}{\sum_i m_i}$,
- masa $M = \sum_i m_i$
- energia grawitacyja całego układu: $E_{graw} = Mgz_{CM}$,
- prędkość środka masy $\mathbf{v}_{CM} = \frac{\sum_i m_i \mathbf{v}_i}{\sum_i m_i}$,
- energia kinetyczna środka masy $E_{kinCM} = M\frac{\mathbf{v}_{CM}^2}{2}$
- energia środka masy $E_{CM} = E_{graw} + E_{kinCM}$
- energia wewnętrzna: $E_w = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \ldots \mathbf{r}_N) + E_{kinW}$
- wewnętrzna energia kinetyczna $E_{kinW} = \sum_i m_i \frac{(\mathbf{v}_{CM} - \mathbf{v}_i)^2}{2} =$
  $\mathbf{V}_{CM}^2 \sum_i m_i \frac{1}{2} + \sum_i m_i \frac{\mathbf{v}_i^2}{2} - \mathbf{V}_{CM} \cdot \sum_i m_i \mathbf{v}_i = \sum_i m_i \frac{(\mathbf{v}_i)^2}{2} - E_{kinCM}$
- $E_{tot} = E_W + E_{CM}$
- zamiast prostszego zapisu $E_{tot} = \sum_i \left(m_i g z_i + \frac{m_i v_i^2}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j' V_i(r_{ij})$

energia środka masy i energia wewnętrzna

- typowy wynik bez tłumienia





dno paraboliczne

- $z(x) = \frac{x^2}{16}$
- $(x, 0, \frac{x^2}{16}) \rightarrow$ wektor styczny do powierzchni $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) = \frac{1}{\sqrt{1+64x^2}}(1, 0, 8x)$ - wersor po unormowaniu
- wektor normalny do powierzchni $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) = (-s_z, 0, s_x)$
- liczymy rzuty $\mathbf{s} \cdot \mathbf{v}$ oraz
- $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}$
- przy odbiciu zachowujemy składową styczną, zmieniemy znak składowej normalnej
- $v_x := -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})n_x + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})s_x$
- $v_z := -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})n_z + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})s_z$
- dodatkowo: tłumienie
- $\mathbf{a}_i = -\frac{1}{m_i}\nabla_i E_{pot}(r_{12}) - \beta \mathbf{v}_i$
- wynik : parabolaslizg.gif

dno paraboliczne

- wynik – ślizgająca się piłka
- aby wymusić toczenie: tarcie, które utrzymuje punkt kontaktu piłka - podłoże w spoczynku
- zamiast:
- $v_x := -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})n_x + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})s_x$
- $v_z := -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})n_z + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})s_z$
- toczenie nastąpi przy:
- $v_x := -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})n_x$
- $v_z := -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})n_z$
- wynik: toczeniela.gif
- zabieg odbiera energię kinetyczną (dla czystego toczenia tak być nie powinno), aby odzyskać: oddać prędkość pozostałym punktom w stopniu proporcjonalnym do punktu styku