

文章编号: 1672 - 058X(2009)06 - 0533 - 05

基于 Matlab 模拟的超细长弹性杆的数值仿真*

张光辉¹, 姜咏梅²

(1. 宿州学院 数学系, 安徽 宿州 234000; 2. 青岛农业大学 海都学院, 山东 烟台 265200)

摘要:在提出弯扭线的基础上,用曲面回扫方法结合刚体有限转动的有关理论研究超细长弹性杆的空间结构及空间曲面图形的描绘,为分析弹性杆的自身接触问题和动力学性态的计算机数值仿真及其图形后处理提供了模型和算法的支持.

关键词:弹性杆;数值仿真;模型和算法;刚体

中图分类号: O241. 8, O245

文献标志码: A

超细长弹性杆模型有着广泛的实际背景,电缆、绳索和纤维等都可以模型化为弹性细杆讨论并已有大量的研究成果^[1-3]. 自从 DNA 三维螺弦结构模型提出以来,关于 DNA 弹性细杆模型的研究工作已经取得了不少成果,其中大多数是以 Kirchhoff 理论为基础的研究. 另外需要注意的是在弹性杆模型的研究中所采用的数值方法,不管采用何种方式研究,结果都需要将 DNA 的三维结构模拟出来,这样才能直观的表达分子的空间拓扑结构,为了更加清晰表达 DNA 螺弦的状态,需要用 DNA 弹性杆的扭转来实现,下面采用 Matlab 编制计算程序对具有弯曲和扭转性能的弹性杆进行界面处理.

1 DNA 弹性杆曲面的模型建立

设 $O -$ 是惯性坐标系,弹性杆轴心曲线为空间中的 2 阶以上的光滑空间曲线^[4]:

$$r = r(s) \quad (1)$$

其中 s 是弧长参数,在曲线上任一点 P 建立曲线的 Frenet 坐标系 $P - NBT$,其中 3 个基矢量 T, N, B 分别是曲线 (1) 的切向,主法线方向和副法线方向的单位矢量. 借助于 Kirchhoff 的动力学比拟方法,把超细长弹性杆的表面看作一条刚性封闭的平面曲线点集 沿着空间曲线 $r(s)$ 移动和旋转得到^[5] (图 1). 按照 Kirchhoff 弹性杆^[4]的假定,把弧长 s 看作拟时间坐标,即将弹性杆曲面沿着弧坐标 s 变化看作一条封闭的平面刚性曲线随“时间” s 的匀速运动. 设 $X(s)$ 是在“时刻” s 的位置,它可以看作由点集 运动得到,则有:

$$\begin{aligned} X(s) &= Q(s) (X(0) - r(0)) + r(0) + (r(s) - r(0)) \\ &= Q(s) (X(0) - r(0)) + r(s) \end{aligned} \quad (2)$$

其中: $X(0) =$, $Q(s)$ 是由 $X(s) - r(0)$ 所在平面到 $X(0) - r(0)$ 所在平面的旋转矩阵, $Q(0) = I$ 在式 (2) 中对 s 微分得到:

$$\frac{dX}{ds} = \frac{dQ}{ds} (X(0) - r(0)) + T(s) \quad (3)$$

收稿日期: 2009 - 09 - 24; 修回日期: 2009 - 10 - 23

*基金项目: 宿州学院硕士科研启动基金项目 (2008yys21).

作者简介: 张光辉 (1980 -), 男, 河北保定人, 硕士, 从事微分方程的数值算法与应用研究.

注意到 $Q(s)$ 是正交矩阵, 利用 Q^T 左乘方程组 (2) 得到:

$$X(0) - r(0) = Q(s)^T (X(s) - r(s)) \tag{4}$$

将式 (4) 代入式 (3) 得到求解曲面网线 $X(s)$ 的微分方程初值问题:

$$\frac{dX}{ds} = \frac{dQ}{ds} Q(s)^T (X(s) - r(s)) + T(s) \tag{5}$$

$$X(0) = \tag{6}$$

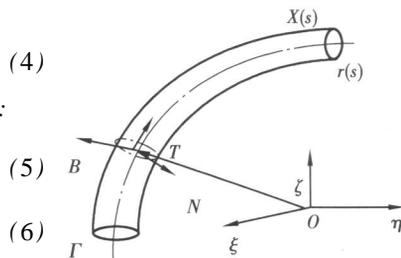


图 1 弹性杆

2 模型分析

2.1 弯扭线概念的提出

仿真中, 为区分弹性杆的抗性线 (中心线) 和形象的表达弹性杆的扭转概念, 提出了弯扭线的概念: 即尚未弯曲与扭转情况下与中心线平行的直杆边缘“母线”在扭转与弯曲后的形状. 此“弯扭线”与弯曲后直杆的中心线形成的对比, 充分表达了围绕中心线缠绕与扭转的意思. 根据文献“弹性杆的非线性力学”提出的弯扭度的概念, 采用弯扭线的概念来描述 DNA 弹性细杆在空间弯扭后的拓扑结构.

现研究长度 L 的细杆, 将弹性杆横截面的几何中心连接成不自交的空间曲线 C_1 称为中心线, 以空间固定点为原点建立惯性坐标系 $O - \xi \eta$, 以细杆端点 P_0 为原点沿中心线建立弧坐标 s , 并在曲线 C_1 上以任意点 P 为原点建立主轴坐标系 $P - xyz$, 其中 z 轴为中心线的切线, 也是杆的横截面的法线. 当 P 点沿中心线 C_1 以单位速度朝弧坐标 s 的正向运动时, 截面以角速度 ω 相对 $O - \xi \eta$ 转动. 显然, 截面内任意矢量的端点也随着 P 点移动和绕切线转动而在空间划出一条轨迹, 形成一条缠绕的空间曲线, 称为“弯扭线” (图 2).

2.2 旋转矩阵应用的实例模拟

设 $O - x_i y_i z_i$ 和 $O - x_k y_k z_k$ 是以 O 为同一原点的不同坐标系, 对应的基向量分别为 e_i 和 e_k , 则同一矢量 a 可以用两种不同的基表示为:

$$a = e_i^T \cdot a^{(i)} = e_k^T \cdot a^{(k)}$$

其中: $a^{(i)}, a^{(k)}$ 为向量 a 的坐标阵列. 将上式后一等号的两边用 e_i 点乘, 得到:

$$a^{(i)} = A_{ik} \cdot a^{(k)}$$

其中: A_{ik} 为 3×3 标量矩阵, 定义为:

$$A_{ik} = e_i e_k^T = (a_{ij})_{3 \times 3} \tag{7}$$

由式 (7) 可以判断, 相同基之间的旋转矩阵为三阶单位阵, 即 A_{ii} (或 A_{kk}) = E, 并且 $A_{ik}^{-1} = A_{ki} = A_{ik}^T$, 与实际情况相符合.

下面以一个算例来实现旋转矩阵的应用.

考虑直角坐标系 $o - xyz$ 的 $o - xy$ 平面上的圆 C :

$$r(t) = \begin{pmatrix} 10 \cos t \\ 10 \sin t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad 0 \leq t \leq 2\pi$$

选择 $o - xyz$ 空间中的小圆环 c :

$$c(t) = \begin{pmatrix} 10 + \cos t \\ 0 \\ \sin t \end{pmatrix}$$

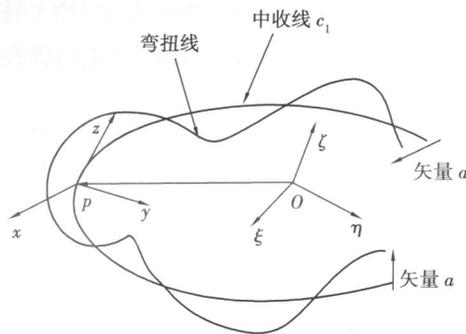


图 2 弯扭线

下面考虑两种情况:

(1) 让小圆环 c 的圆心始终在大圆 C 上,且在任意时刻,大圆 C 都垂直小圆 c 所在平面,小圆环在绕坐标系原点 O 沿大圆转动的同时自身不发生任何转动,此过程用到一个旋转矩阵 (图 3).

(2) 让小圆环 c 的圆心始终在大圆 C 上,且在任意时刻,大圆 C 都垂直小圆 c 所在平面,小圆环在绕坐标系原点 O 沿大圆转动的任意时刻自身也以一定的速度绕大圆在该时刻的切线发生转动,此过程用到了两个旋转矩阵 (图 4).

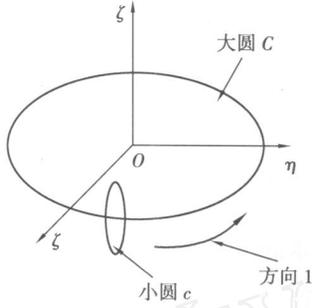


图 3 用到一个旋转矩阵情形

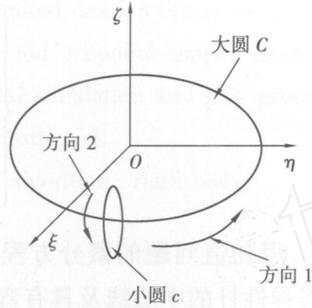


图 4 用到两个旋转矩阵情形

用 matlab 实现上述 (1)、(2) 过程,仿真结果见图 5, 图 6

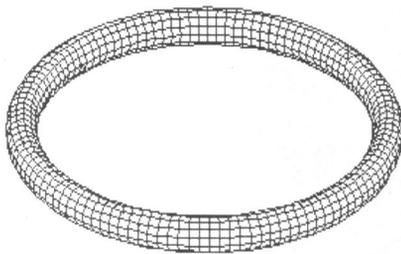


图 5 小圆绕大圆旋转运动表面示意

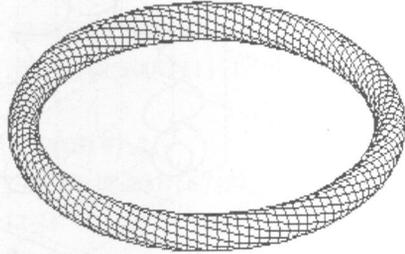


图 6 小圆环绕大圆旋转且自身扭转表面示意

2.3 刚体的有限转动的欧拉定理

DNA 弹性杆模型以其极端细长性和超大变形而完全不同于传统弹性力学的研究对象,也给 DNA 结构的图形描绘和动力学性质的数值仿真也增添了困难.在理论问题中,人们往往将弹性杆结构模型视为刚体有限转动模型.

刚体的有限转动的欧拉定理,即:

定理 1 刚体绕定点的任意有限转动可由绕过该点的某根轴一次转动某个有限角度来实现.

从欧拉定理不难看出,DNA 弹性杆横截面不同时刻的姿态均可由初始时刻 (弧坐标 $s=0$) 的圆截面绕某个转动矢量作相应的一次有限转动来实现,这里的转动矢量和一次转动角的出现正是上文的“弯扭线”形成的原因.

3 DNA 弹性杆模型曲面的数值仿真

利用上文中的准备知识,给出 DNA 弹性杆的图形描述.为简单起见,考虑圆截面弹性杆.在 Kirchhoff 的圆截面弹性杆的简化假设下,利用超细长圆截面杆的 Schrodinger 方程^[6],得到曲率和挠率的微分方程组^[11]:

$$\frac{d^2}{ds^2} - \left(-\frac{m}{2} \right)^2 - c_1 + \frac{3}{2} = \frac{f_n}{A} \tag{8}$$

$$\frac{d}{ds} + 2 \frac{d}{ds} \left(-\frac{m}{2} \right) = \frac{f_b}{A} \quad (9)$$

其中

$$c_1 = \frac{h}{2} - \frac{m^2}{4}$$

m, h 是材料和运动有关的常数.

将方程(8)和方程(9)与 Frenet - Serret方程^[11]

$$\begin{cases} \frac{d}{ds} = N - T \\ \frac{dB}{ds} = -N \\ \frac{dT}{ds} = N \end{cases} \quad (10)$$

及式(6)、式(7)联立,得初值问题的微分方程组^[8],用 Runge-Kutta解得数值解,采用曲面回扫方法^[7],用 malab编制程序,可得弹性杆的中心线及具有弯扭度的表面网格(图7、图8).

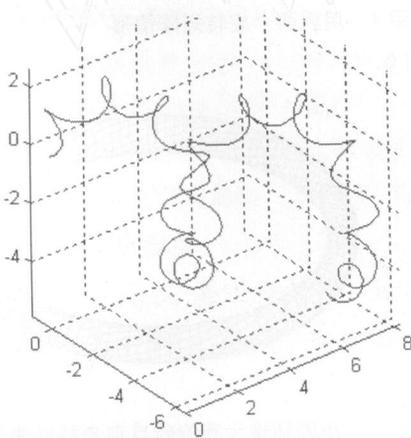


图7 弹性杆中心线

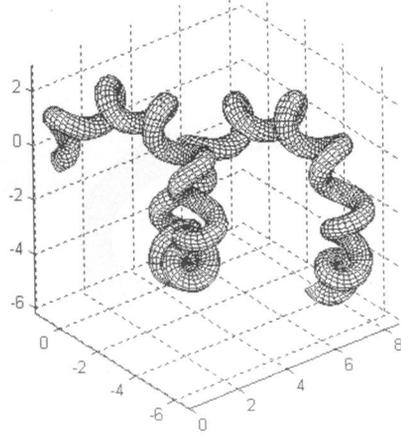


图8 弹性杆表面网格

参考文献:

- [1] SMITH SB, FNCIL, Bustamante C. Direct mechanical measurement of the elasticity of single DNA molecules by using magnetic beads[J]. Science, 1992, 258(5): 1122-1126
- [2] BUSTAMANTE C, BRYANT Z. Ten years of tension: single molecule DNA mechanics[J]. Nature, 2003, 421: 423-427
- [3] MESROV J P, SCHULTEN K, SUMNERS D W. Mathematical approaches to biomolecular structure and dynamics[M]. New York: Springer, 1996
- [4] 刘延柱. 弹性细杆的非线性力学—DNA力学模型的理论基础[M]. 北京:清华大学出版社, 2006
- [5] 赵维加, 张光辉. 超细长弹性杆动力学仿真的曲面处理算法[J]. 计算力学学报, 2008, 25(2): 265-268
- [6] LANGER J, SINGER D. Lagrangian aspects of the Kirchhoff Elastic Rod[J]. AM Review, 1996, 35(4): 605-618
- [7] DUNCAN M. Applied Geometry for Computer Graphics and CAD[M]. Springer, 2000
- [8] HARRIS E, WANNER G. Solving Ordinary Differential Equations II Stiff and Differential-Algebraic Problems 2nd ed[M]. New York: Springer-Verlag, 1996

Numerical simulation of super-long thin elastic rod and implementation of Matlab

ZHANG Guang-hui¹, JIANG Yong-mei²

(1. Mathematics Department, Suzhou College, Anhui Suzhou 234000;

2. Haidu College, Qingdao Agriculture University, Shandong Yantai 265200, China)

Abstract: Using Swept Volumes method, combining with limited rotation theory of rigid body, this paper studies the elastic rod's spatial structure, including the elastic rod's spatial shape, depicts the surface figure of the rod, provides model and algorithm supports for numerical simulation and post-processing of the numerical results, as well as studies the dynamical properties of the elastic rod

Key words: elastic rod; numerical simulation; model and algorithm; rigid body

责任编辑:田 静

(上接第 532 页)

参考文献:

- [1] 范南,王礼平.我国印花税变动对证券市场波动性影响实证研究[J].金融研究,2005(6):1
- [2] 王聪,李道叶.交易成本对我国股票市场价格波动性的影响分析[J].南方金融,2007(11):1
- [3] 陈侃.我国证券交易印花税研究报告[J].中国高新技术企业,2008(21):7
- [4] 曹伟龙.应用 ARCH 模型对中国股市波动性的实证分析[J].世界经济,2005(9):2
- [5] 马明.基于 GARCH 模型的股市波动特征及相关性分析[J].南京理工大学学报,2007(6):27
- [6] 易丹辉.数据分析与 Eviews 应用[M].北京:中国统计出版社,2002.12-22
- [7] 徐剑刚.中国金融市场计量分析[M].上海:上海财经大学出版社,2008.5-14
- [8] 苗强,刘秀文,万中.证券组合投资的一般失望模型的改进[J].重庆工学院学报,2008,22(1):59-64
- [9] 汪卫,阳彩霞,万中.含有模糊信息的证券组合投资模型[J].重庆工学院学报,2008,22(11):89-93

Modeling analysis of the influence of taxation policy on China's stock market ——Taking stamp duty of stock as an example

JIA Hong-wen, CUI Yong-gan

(School of Economics, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

Abstract: With the constantly deepening of China's financial market reform and constantly perfecting of market system and constantly completing of market resources allocation mechanism, it is very important to make quantitative study on the whole movement situation of China's stock market and to evaluate operation effect of stock market. Based on the influence of stamp duty adjustment on the effect of the characteristics of the market volatility index and the average level of trading volume, this paper analyzes the impact of China's taxation system arrangement on stock market and gives suggestions on establishing and completing China's tax system of stock market under present economic conditions

Key words: stock market; stamp duty; tax policy

责任编辑:李翠薇