

Лабораторная работа № 3. Исследование динамики одномерной цепочки частиц с различными потенциалами межчастичного взаимодействия

Цель работы: получить навык моделирования динамики системы многих частиц методами молекулярной динамики на примере задачи распространения возмущений в одномерной цепочке частиц одинаковой массы, связанных нелинейным потенциалом взаимодействия типа Ферми-Паста-Улама.

Задание на лабораторную работу

Рассматривается цепочка частиц одинаковой массы, находящаяся в начальный момент времени в состоянии равновесия (расстояния между частицами одинаковы). В качестве граничных условий используется условие периодичности (или условной замкнутости) цепочки. В качестве потенциала межчастичного взаимодействия рассматривается нелинейный степенной потенциал типа Ферми–Паста–Улама (FPU-потенциал)

$$V(r) = \frac{r^2}{2} + \alpha \frac{r^3}{3} + \beta \frac{r^4}{4}. \quad (4.1)$$

При $\alpha \neq 0, \beta = 0$ данный потенциал принято называть FPU- α , при $\alpha = 0, \beta \neq 0$ – FPU- β .

Уравнение движения i -ой частицы будут иметь вид

$$m \frac{d^2 q_i}{dt^2} = -\nabla V(q_i) \equiv -\frac{\partial}{\partial q_i} [V(q_{i+1} - q_i) + V(q_i - q_{i-1})]. \quad (4.2)$$

Правая часть этого уравнения представляет собой сумму двух сил, действующих на i -ю частицу со стороны соседних $(i-1)$ -ой и $(i+1)$ -ой частиц. Величина q_i – смещение i -ой частицы от положения равновесия.

Для интегрирования уравнений движения вида (4.1) в лабораторной работе используются два численных алгоритма

Алгоритм Верле в скоростной форме. Основные шаги алгоритма на каждом временном шаге:

$$1) \quad q_i(t + \Delta t) = q_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}a_i(t)\Delta t^2;$$

$$2) \quad v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_i(t) + \frac{1}{2}a_i(t)\Delta t;$$

$$3) \quad a_i(t + \Delta t) = -\frac{1}{m}\nabla V(q_i(t + \Delta t));$$

$$4) \quad v_i(t + \Delta t) = v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}a_i(t + \Delta t)\Delta t.$$

Здесь $v_i = \frac{dq_i}{dt}$ и $a_i = \frac{d^2 q_i}{dt^2}$ – скорость и ускорение i -ой частицы, соответственно. В начальный момент времени $t = 0$ значения $q_i(0)$ и $v_i(0)$ известны и по ним рассчитываются значения $a_i(0)$.

Симплектический алгоритм типа Верле в скоростной форме. Основные шаги алгоритма на каждом временном шаге:

- 1) $q_i^1(t) = q_i(t) + v_i(t)\xi\Delta t;$
- 2) $a_i^1(t) = -\frac{1}{m}\nabla V(q_i^1(t));$
- 3) $v_i^1(t) = v_i(t) + \frac{1}{2}a_i^1(t)\Delta t;$
- 4) $q_i^2(t) = q_i^1(t) + v_i^1(t)(1 - 2\xi)\Delta t;$
- 5) $a_i^2(t) = -\frac{1}{m}\nabla V(q_i^2(t));$
- 6) $v_i(t + \Delta t) = v_i^1(t) + \frac{1}{2}a_i^2(t)\Delta t;$
- 7) $q_i(t + \Delta t) = q_i^2(t) + v_i(t + \Delta t)\xi\Delta t.$

Здесь параметр ξ определяется из условия минимальности значения коэффициента при Δt^3 в оценке погрешности метода и равен

$$\xi = \frac{1}{2} - \frac{(2\sqrt{326} + 36)^{1/3}}{12} + \frac{1}{6(2\sqrt{326} + 36)^{1/3}} \approx 0.1931833275037836.$$

Для модели (4.1), (4.2) выполнить следующее.

- 1) Определить вид правой части уравнения (4.2) для потенциала (4.1).
- 2) На языке программирования Си (Си++) выполнить программную реализацию приведенных численных алгоритмов Верле и симплекстического типа Верле.
- 3) Провести сравнение точности алгоритмов посредством сравнения величины полной энергии системы (гамильтониана)

$$H = \sum_{i=0}^n \left[\frac{mv_i^2}{2} + V(q_{i+1} - q_i) \right].$$

после N временных шагов. Количество частиц n , параметры α и β потенциала взаимодействия, а также значение N задаются преподавателем.

4) Для FPU- α потенциала взаимодействия определить диапазон значений $\alpha \in (0,1)$ в котором в пространстве скоростей существуют односолитонные решения при условии, что возмущение задаются в центре цепочки в виде приложения заданных импульсов к двум соседним частицам, равных по величине и противоположных по направлению (так что суммарный импульс системы равен нулю). Выполнить анимационную визуализацию динамики цепочки.

5) Для FPU- β потенциала взаимодействия определить диапазоны значений $\beta > 0$ в которых в пространстве скоростей существуют одно-, двух- и трехсолитонные решения. Возмущения задаются аналогично п. 4). Выполнить анимационную визуализацию динамики цепочки.

Отчетность

По результатам решения задачи составить отчет по лабораторной работе, который должен содержать постановку решаемой задачи, численные алгоритмы и описание особенностей их программной реализации, результаты проведенных в соответствии с заданием вычислительных экспериментов, графики характерных режимов динамики цепочки частиц, анализ полученных результатов и выводы по работе.