Этап 2

Алгоритм решения задачи

Канева Екатерина

Клюкин Михаил

Ланцова Яна

Содержание

# 1 Цель работы

Описать алгоритмы для моделирования колебания цепочки атомов.

# 2 Задание

1. Описать алгоритм для моделирования гармонических колебаний.
2. Описать алгоритм для моделирования ангармонических колебаний.

# 3 Выполнение лабораторной работы

## 3.1 Алгоритм для гармонических колебаний

Мы моделируем одномерную цепочку из точек (частиц), соединённых пружинами с жесткостью . Частицы могут двигаться только вдоль одной прямой. Начальное состояние системы – равновесное, то есть все пружины недеформированы, а частицы находятся в точках , где – расстояние между частицами.

После небольшого возмущения система начинает совершать колебания. Цель – численно смоделировать движение частиц с течением времени.

**Исходные уравнения**

Для -й частицы записывается уравнение движения, следующее из второго закона Ньютона и действия силы упругости от соседних пружин:

С граничными условиями:

**Задание параметров**

* – количество подвижных частиц
* – масса каждой частицы
* – жесткость пружины между частицами
* – общее время моделирования
* – шаг по времени
* – расстояние между частицами (может быть единичным)

Начальные условия:

* – начальное смещение для каждой частицы
* – начальная скорость

**Инициализация массивов**

Создаем три массива длиной (включая фиктивные граничные точки ):

* – смещения частиц
* – скорости частиц
* – ускорения частиц

Все индексы идут от до , чтобы удобно учитывать граничные условия.

**Основной цикл моделирования**

Запускаем цикл по времени от до с шагом .

Вычисление ускорений:

Для всех (внутренние точки):

Обновление скоростей (например, по методу Эйлера):

Обновление смещений:

Применение граничных условий:

**Сохранение или визуализация**

На каждом шаге (или через несколько шагов) можно сохранять текущие значения массива в список или файл, чтобы потом построить графики движения или анимацию колебаний.

**Результат работы алгоритма**

После завершения моделирования у нас есть набор значений для всех частиц и моментов времени, с помощью которого можно:

* Построить графики смещений и скоростей
* Сделать анимацию колебаний
* Проанализировать спектр колебаний (через БПФ)

## 3.2 Алгоритм для ангармонических колебаний

В ангармонической модели учитываются нелинейные эффекты. Это более реалистичная модель, в которой сила взаимодействия между частицами не строго линейна по закону Гука. Например, к линейной силе добавляются нелинейные поправки – чаще всего в виде членa третьего порядка:

Здесь – коэффициент ангармоничности (обычно малый, ).

Для цепочки из частиц с массами , соединённых ангармоническими пружинами, общее уравнение движения для -й частицы:

Силы между частицами:

Подставляя, получаем уравнение движения:

Это — нелинейная система уравнений, и её решение ведёт к появлению таких эффектов, как генерация обертонов, смешивание мод, переход энергии между модами и т.п.

**Задание параметров**

* — количество подвижных частиц
* — масса частицы
* — жесткость пружины
* — коэффициент ангармоничности
* — шаг по времени
* — общее время моделирования

Начальные условия — например, одна синусоида или случайное возмущение.

**Инициализация массивов**

Создаются массивы:

* — смещения
* — скорости
* — ускорения
* индексы (фиктивные граничные условия)

**Цикл по времени**

Вычисление ускорений:

Для каждого :

Обновление скоростей:

Обновление смещений:

Граничные условия:

**Сохранение или визуализация**

Сохраняем массивы на каждом шаге или делаем Fourier-анализ, чтобы увидеть развитие обертонов.

В отличие от гармонической цепочки, волны разных частот взаимодействуют. Появляются обертоны — кратные и некратные частоты. Энергия может перетекать между модами, что моделирует реальные физические системы (кристаллы, цепочки молекул и т.п.). Возможно появление хаотического поведения при больших .

# 4 Выводы

В ходе выполнения второй части группового проекта мы описали алгортмы для моделирования колебания цепочки атомов.

# Список литературы