**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Уфимский государственный авиационный технический университет”**

**Кафедра** Высокопроизводительных вычислительных технологий и систем

**Дисциплина:** Математическое моделирование

Лабораторная работа №3

**Тема:** “Исследование динамики одномерной цепочки частиц с различными потенциалами межчастичного взаимодействия.”

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Группа ПМ-453 | ФИО | Подпись | Дата | Оценка |
| Студент | Купряхин В.В. |  |  |  |
| Преподаватель | Лукащук В.О. |  |  |  |

Уфа 2023

**Цель:** 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:**

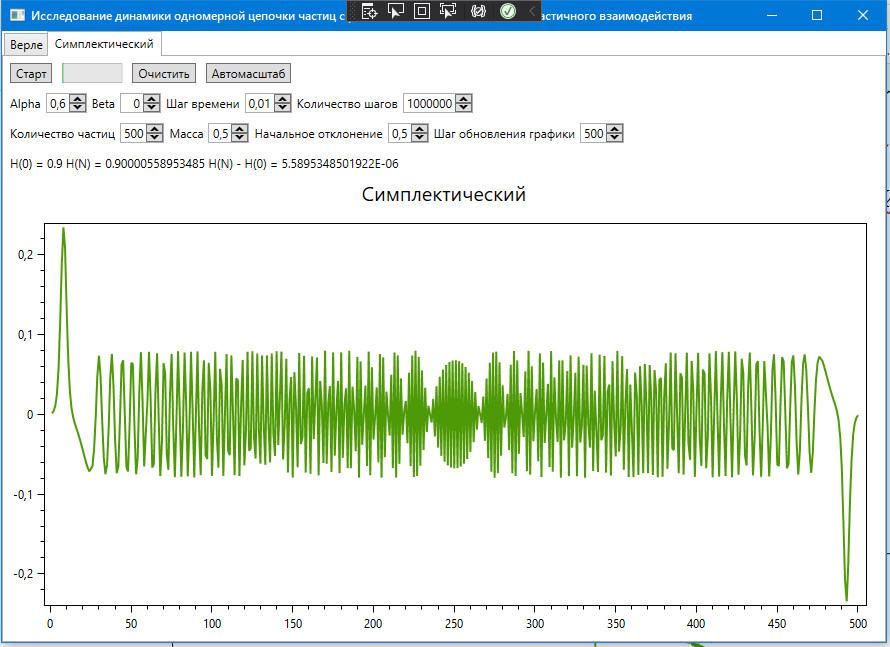
1. Получить уравнение движения для FPU потенциала.
2. Смоделировать распространение возмущений в одномерной цепочке частиц, связанных потенциалом взаимодействия FPU, с помощью скоростного алгоритма Верле.
3. Смоделировать распространение возмущений в одномерной цепочке частиц, связанных потенциалом взаимодействия FPU, с помощью симплектического алгоритма.
4. Проверить сохраняется ли закон сохранения энергии вы численных моделях.
5. Для FPU-alpha найти диапазон, в котором существует односолитонные решения.
6. Для FPU-beta найти диапазоны, в котором существует одно, двух, трех солитонные решения.
7. Уравнение FPU: ;   
   Уравнение движения i-ой частицы:

**4.**

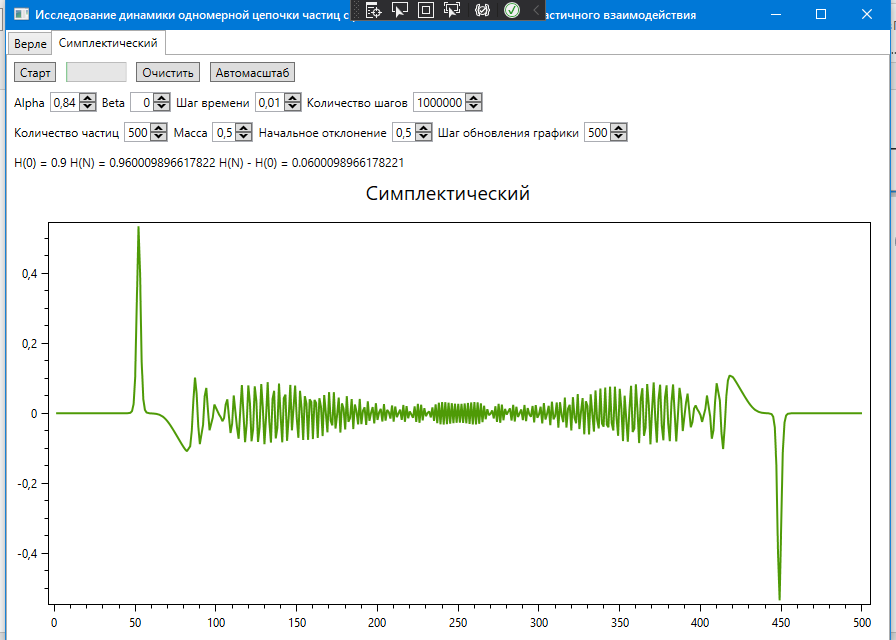
|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Алгоритм | Количество итераций | | |
|  |  |  |
| Верле |  |  |  |
| Симплектический |  |  |  |

Эксперимент показал, что полученные модели, строго математически, не соблюдают закон сохранения энергии. Более точным с точки зрения сохранения энергии является симплектический алгоритм.

**5.** Для FPU-alpha односолитонное решение существует в интервале [0,60;0,84].

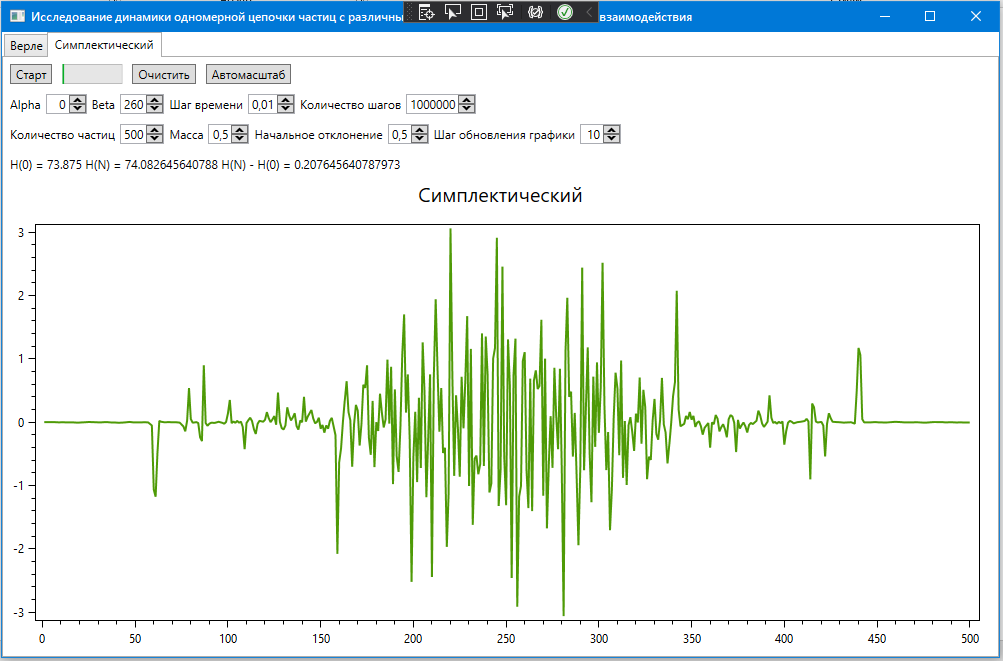


Один солитон



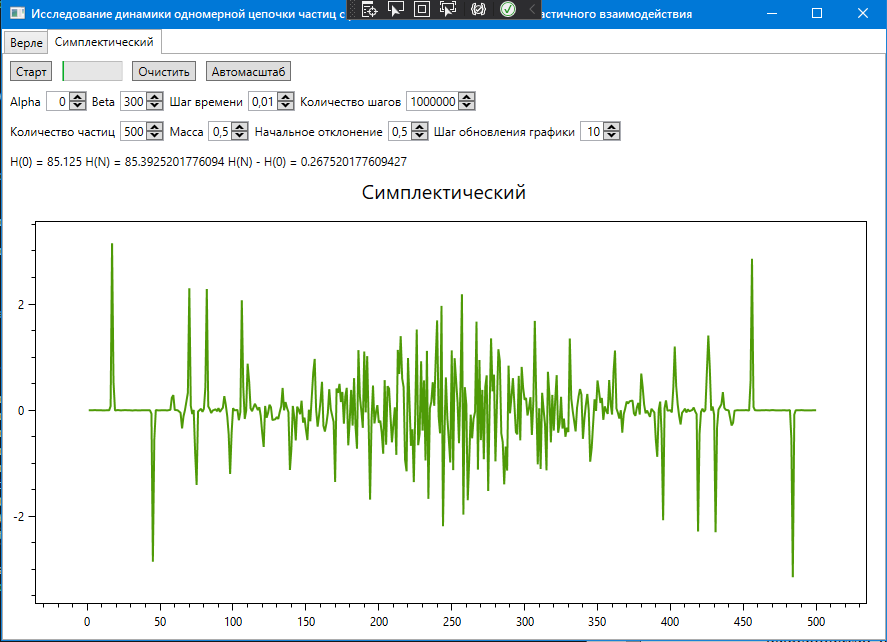
Один солитон

**6.1** Односолитонное решение



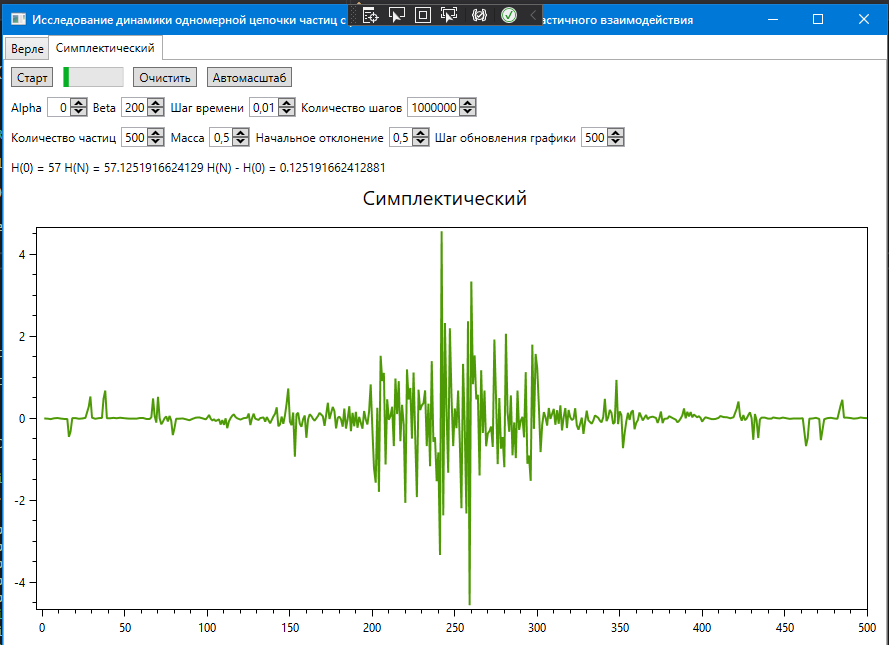
Один солитон

**6.2** Двухсолитонное решение



Два солитона

**6.3** Трехсолитонное решение



Три солитона

**Вывод:** в ходе лабораторной работы было разработано приложение моделирующеераспространение возмущений в одномерной цепочке частиц одинаковой массы, связанных нелинейным потенциалом взаимодействия типа Ферми-Паста-Улама.