

## Этап 2

Алгоритм решения задачи

Канева Екатерина      Клюкин Михаил  
Ланцова Яна

# Содержание

1	Цель работы	5
2	Задание	6
3	Выполнение лабораторной работы	7
3.1	Алгоритм для гармонических колебаний . . . . .	7
3.2	Алгоритм для ангармонических колебаний . . . . .	9
4	Выводы	12
	Список литературы	13

## Список иллюстраций

## Список таблиц

# 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  $N$  точек (частиц), соединённых пружинами с жесткостью  $k$ . Частицы могут двигаться только вдоль одной прямой. Начальное состояние системы – равновесное, то есть все пружины недеформированы, а частицы находятся в точках  $x_i = id$ , где  $d$  – расстояние между частицами.

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

Исходные уравнения

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

$$m \frac{d^2 y_i}{dt^2} = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N.$$

С граничными условиями:

$$y_0 = 0, y_{N+1} = 0$$

Задание параметров

- $N$  – количество подвижных частиц
- $m$  – масса каждой частицы
- $k$  – жесткость пружины между частицами

- $T$  – общее время моделирования
- $\Delta t$  – шаг по времени
- $\Delta d$  – расстояние между частицами (может быть единичным)

Начальные условия:

- $y_i(0)$  – начальное смещение для каждой частицы
- $v_i(0)$  – начальная скорость

Инициализация массивов

Создаем три массива длиной  $N + 2$  (включая фиктивные граничные точки  $y_0 = y_{N+1} = 0$ ):

- $y[i]$  – смещения частиц
- $v[i]$  – скорости частиц
- $a[i]$  – ускорения частиц

Все индексы  $i$  идут от 0 до  $N + 1$ , чтобы удобно учитывать граничные условия.

Основной цикл моделирования

Запускаем цикл по времени от  $t = 0$  до  $T$  с шагом  $\Delta t$ .

Вычисление ускорений:

Для всех  $i = 1, \dots, N$  (внутренние точки):

$$a_i = \frac{k}{m}(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1})$$

Обновление скоростей (например, по методу Эйлера):

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + a_i \Delta t$$

Обновление смещений:

$$y_i(t + \Delta t) = y_i(t) + v_i(t + \Delta t) \Delta t$$



Применение граничных условий:

$$y_0 = 0, y_{N+1} = 0$$

Сохранение или визуализация

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

Результат работы алгоритма

После завершения моделирования у нас есть набор значений  $y_i(t)$  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  $F = -kx$  добавляются нелинейные поправки – чаще всего в виде члена третьего порядка:

$$F(x) = -kx - \alpha x^3$$

Здесь  $\alpha$  – коэффициент ангармоничности (обычно малый,  $\alpha > 0$ ).

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

$$m \frac{d^2 y_i}{dt^2} = F_{i+1 \rightarrow i} + F_{i-1 \rightarrow i}$$

Силы между частицами:

$$F_{i+1 \rightarrow i} = -k(y_i - y_{i+1}) - \alpha(y_i - y_{i+1})^3$$

$$F_{i-1 \rightarrow i} = -k(y_i - y_{i-1}) - \alpha(y_i - y_{i-1})^3$$

Подставляя, получаем уравнение движения:

$$m \frac{d^2 y_i}{dt^2} = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \alpha[(y_{i+1} - y_i)^3 + (y_{i-1} - y_i)^3]$$

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

- $N$  — количество подвижных частиц
- $m$  — масса частицы
- $k$  — жесткость пружины
- $\alpha$  — коэффициент ангармоничности
- $\Delta t$  — шаг по времени
- $T$  — общее время моделирования

Начальные условия  $y_i(0), v_i(0)$  — например, одна синусоида или случайное возмущение.

Инициализация массивов

Создаются массивы:

- $y[i]$  — смещения
- $v[i]$  — скорости
- $a[i]$  — ускорения
- индексы  $i = 1, \dots, N$  (фиктивные граничные условия)

Цикл по времени

Вычисление ускорений:

Для каждого  $i = 1, \dots, N$ :

$$a_i = \frac{1}{m}[k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \alpha((y_{i+1} - y_i)^3) + (y_{i-1} - y_i)^3]$$

Обновление скоростей:

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + a_i \Delta t$$

Обновление смещений:

$$y_i(t + \Delta t) = y_i(t) + v_i(t + \Delta t) \Delta t$$

Граничные условия:

$$y_0 = 0, y_{N+1} = 0$$

Сохранение или визуализация

Сохраняем массивы  $y_i(t)$  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  $\alpha$ .

## 4 Выводы

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

## Список литературы