

## Этап 4

### Результаты проекта

---

Канева Екатерина    Клюкин Михаил    Ланцова Яна

11 апреля 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

# Информация

---

Студенты группы НФИбд-02-22:

- Канева Екатерина
- Клюкин Михаил
- Ланцова Яна

# Введение

---

Все вещества состоят из атомов, которые постоянно колеблются. Изучение этих колебаний помогает нам понять, как материалы ведут себя при разных температурах. Особенно важно понимать, как колебания приводят к тепловому равновесию. Исследование цепочек атомов, связанных пружинками, это простая модель, чтобы понять, как возникают колебания в кристаллах. Эта модель помогает объяснить, почему некоторые классические законы физики работают только при высоких температурах. Понимание колебаний важно для создания новых материалов с нужными свойствами, например, для электроники или термоизоляции.

Исследовать закономерности колебаний в простейшей одномерной цепочке атомов, связанных между собой.

1. Изучение условий для установления равновесия
2. Изучение условий для приближения к равновесию
3. Изучение явлений в простейшем одномерном случае

1. Построить модель цепочки из  $N$  частиц.
2. Описать алгоритм для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.
3. Реализовать программу для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.



## Язык программирования Julia

- Plots.jl
- LinearAlgebra
- FFTW

## **Теоретическое описание задачи**

---

$$F_i = k(y_{i+1} - y_i) - k(y_i - y_{i-1}) = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}).$$

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

$$U = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{dy_i}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^2.$$

$$y_i = (A \cos(px_i) + B \sin(px_i)) \cos(\omega t).$$

$$\sin(p(N + 1)d) = 0.$$

$$p_l = \frac{l\pi}{(N+1)d}, \quad l = 1, \dots, N.$$



$$F = -kx \left( 1 - \frac{\alpha x}{d} \right).$$

$$U = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{dy_i}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^2 - \frac{k\alpha}{3d} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^3.$$

*# Гармонические колебания*

**function** harmonic\_chain\_simulation(;

N=20,       *# Количество частиц*

m=1.0,       *# Масса частицы*

k=1.0,       *# Жёсткость пружины*

alpha=0.0,       *# Коэффициент ангармоничности (0 для гармонического случая)*

T=100.0,       *# Общее время моделирования*

dt=0.01,       *# Шаг по времени*

dd=1.0,       *# Расстояние между частицами*

initial\_displacement=0.1, *# Амплитуда начального возмущения*

save\_every=10 *# Сохранять состояние каждые save\_every шагов*

)

```
# Инициализация массивов (включая граничные условия)  
y = zeros(N+2) # Смещения (y[1] и y[N+2] - граничные условия)  
v = zeros(N+2) # Скорости  
a = zeros(N+2) # Ускорения
```

*# Начальные условия - синусоидальное возмущение*

**for** i **in** 2:N+1

    y[i] = initial\_displacement \* sin(pi\*(i-1)/N)

**end**

*# Массивы для сохранения результатов*

times = Float64[]

positions = Vector{Float64}[]

velocities = Vector{Float64}[]

## Программная реализация

*# Вычисление ускорений для внутренних частиц*

**for** i **in** 2:N+1

dy\_prev = y[i] - y[i-1]

dy\_next = y[i+1] - y[i]

*# Гармоническая часть силы*

F\_harmonic = k \* (y[i+1] - 2\*y[i] + y[i-1])

*# Ангармоническая часть силы (если  $\alpha \neq 0$ )*

F\_anharmonic = alpha \* (dy\_next<sup>3</sup> + dy\_prev<sup>3</sup>)

a[i] = (F\_harmonic + F\_anharmonic) / m

**end**

*# Обновление скоростей и смещений (метод Верле)*

**for** i **in** 2:N+1

$v[i] += a[i] * dt$

$y[i] += v[i] * dt$

**end**



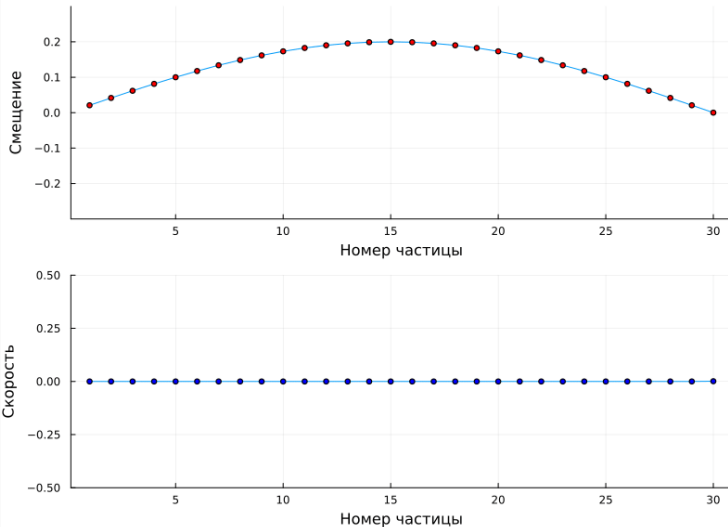
*# Применение граничных условий*

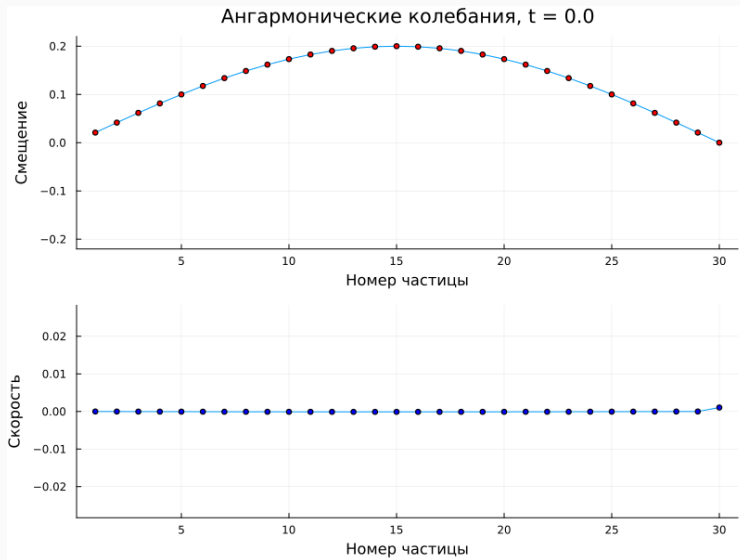
$y[1] = 0.0$

$y[N+2] = 0.0$

```
# Сохранение состояния (не на каждом шаге для экономии памяти)  
if mod(round(t/dt), save_every) == 0  
    push!(times, t)  
    push!(positions, copy(y[2:N+1])) # Исключаем граничные точки  
    push!(velocities, copy(v[2:N+1]))  
end
```

Гармонические колебания,  $t = 0.0$





- Построили модель цепочки из  $N$  частиц.
- Описали алгоритм для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.
- Реализовали программу для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.