

Этап 2

Алгоритм решения задачи

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

Описать алгоритмы для моделирования колебания цепочки атомов.

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

Выполнение лабораторной работы

Алгоритм для гармонических колебаний

$$x_i = id x_i = i_d$$

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

Задание параметров

- N – количество подвижных частиц
- m – масса каждой частицы
- k – жесткость пружины между частицами
- T – общее время моделирования
- Δt – шаг по времени
- Δd – расстояние между частицами (может быть единичным)

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

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

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

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

Алгоритм для ангармонических колебаний

Алгоритм для ангармонических колебаний

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

Задание параметров

- N — количество подвижных частиц
- m — масса частицы
- k — жесткость пружины
- α — коэффициент ангармоничности
- Δt — шаг по времени
- T — общее время моделирования

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

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

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

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

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