

Инструкция:

Установите необходимые параметры и нажмите кнопку "Начать демонстрацию". После этого на нити появится колеблющаяся бусина. Чтобы остановить её колебания, нажмите кнопку "Следующая частица" — сразу после этого на некотором расстоянии от остановившейся бусины появится новая колеблющаяся бусина. График коэффициента периодичности будет строится параллельно работе программы. График потенциала будет нарисован сразу после установки параметров.

Чтобы изменить параметры во время работы демонстрации, то после изменения необходимо снова нажать кнопку "Начать демонстрацию" для обновления программы.

Кнопка "Назад" выведет вас на главную страницу программы.

Влияние взаимодействия частиц на одномерные случайные структуры

Постановка задачи:

Демонстрация различных случайных одномерных структур на основе теории процессов обновления. На экране изображена уложенная горизонтальными участками, изгибающаяся по краям нить, на которой будут располагаться бусины. Они появляются последовательно так, что каждая следующая рисуется относительно предыдущей на некотором случайном расстоянии вдоль оси. А именно, первая точка просто появляется в начале оси, вторая появляется и колеблется хаотически вдоль оси около некоторого положения равновесия на некотором расстоянии от первой. Распределение вероятностей для этих интервалов между точками является распределением Больцмана для взаимодействия двух соседних частиц. В некоторый момент времени вторя частица замирает там, где была, и относительно нее так же начинает строиться следующая. Потенциал взаимодействия может быть выбран из меню готовых базовых потенциалов. Во всех случаях пользователь видит график потенциала и может менять его параметры и температуру. Коэффициент периодичности вычисляется численно и высвечивается на графике. Также численно считается и выводится энтропия распределения. Таким образом, можно создавать структуры с различной периодичностью, задавая тот или иной вид взаимодействия между соседними частицами.

Задаваемые пользователем параметры:

- Температура (0; 5000]
- Глубина потенциальной ямы (0; 150]
- Ширина потенциальной ямы (0; 200]
- Расстояние между ямами (0; 50]
- Вид потенциала

Математическая постановка задачи

Основной формулой в нашей задаче будет являться распределение Больцмана:

$$w(r) = C * \exp^{-\frac{U(r)}{kT}},$$

где  $C = (\int \exp^{-\frac{U(r)}{kT}} dr)^{-1}$

В задаче реализованы 3 вида потенциалов:

- Плоский:  $U(r) = -h = const$ , где  $h$  — глубина потенциальной ямы;
- Параболический:  $U(r) = \frac{4h}{d^2} (r - \frac{d}{2})^2 - h$ , где  $h$ — глубина потенциальной ямы,  $d$ — ширина параболы;
- Леннарда-Джонса:  $U(r) = \varepsilon((\frac{r_{min}}{r})^{12} - 2(\frac{r_{min}}{r})^6)$ , где  $r_{min}$  — точка минимума функции (т.е. центр ямы), а  $\varepsilon$  — глубина потенциальной ямы.

Теоретическая дифференциальная энтропия будет иметь вид:

$$H = - \int \ln(w(r)) * w(r) dr$$

Коэффициент периодичности:

$$p = 1 - \frac{\sigma^2}{\langle r \rangle^2},$$

где  $\sigma^2$  — дисперсия расстояний между частицами системы,  $\langle r \rangle$  — математическое ожидание расстояний между частицами системы.

Коэффициент периодичности подсчитывается для полученной системы частиц и отображается на графике. При этом с увеличением числа частиц его значение будет стремиться к

$$p_0 = 1 - \frac{\sigma_0^2}{\langle r \rangle_0^2},$$

где  $\sigma_0^2 = \int (r^2 - \langle r \rangle^2) w(r) dr$  — дисперсия частицы с заданным распределением,  $\langle r \rangle_0 = \int r w(r) dr$  — математическое ожидание частицы с заданным распределением.

Сдвиг ямы задаёт расстояние, на котором будет колебаться следующая частица. Энтропия является функцией состояния и определяется только начальным и конечным состояниями системы, а поскольку частица колеблется в пределах потенциальной ямы, то расстояние между ямами не влияет на энтропию. Периодичность же вычисляется в зависимости от расстояния, поэтому сдвиг ямы добавляет вес в эту величину — сдвиг ямы вправо уменьшает периодичность, а влево — увеличивает

Метод Монте—Карло

Для генерации случайных чисел по заданному распределению используется метод Монте—Карло. Метод заключается в использовании равномерного распределения для моделирования любого другого. Число, полученное с помощью генератора случайных чисел, берется или отбрасывается с вероятностью, соответствующей распределению, которое необходимо построить.

В этой задаче метод Монте—Карло используется для определения координаты появления каждой следующей частицы.

Как можно использовать задачу?

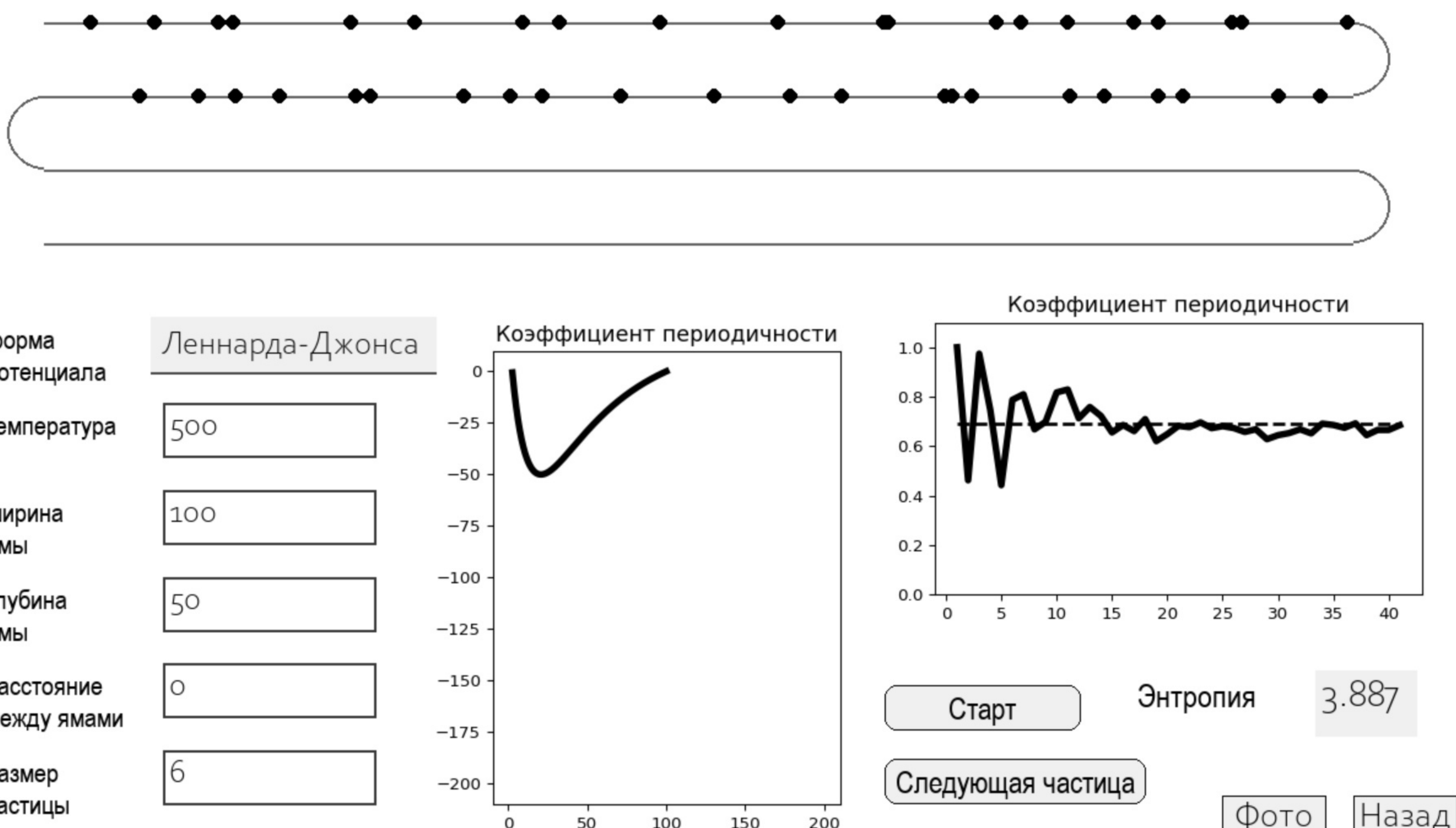
В курсе статистической физики есть отдельная глава, посвящённая распределению Больцмана. Данная задача показывает, как ведёт себя распределение при изменении температуры и потенциала.

Интересный факт — задача хорошо показывает построение различных полимеров.

Примеры:

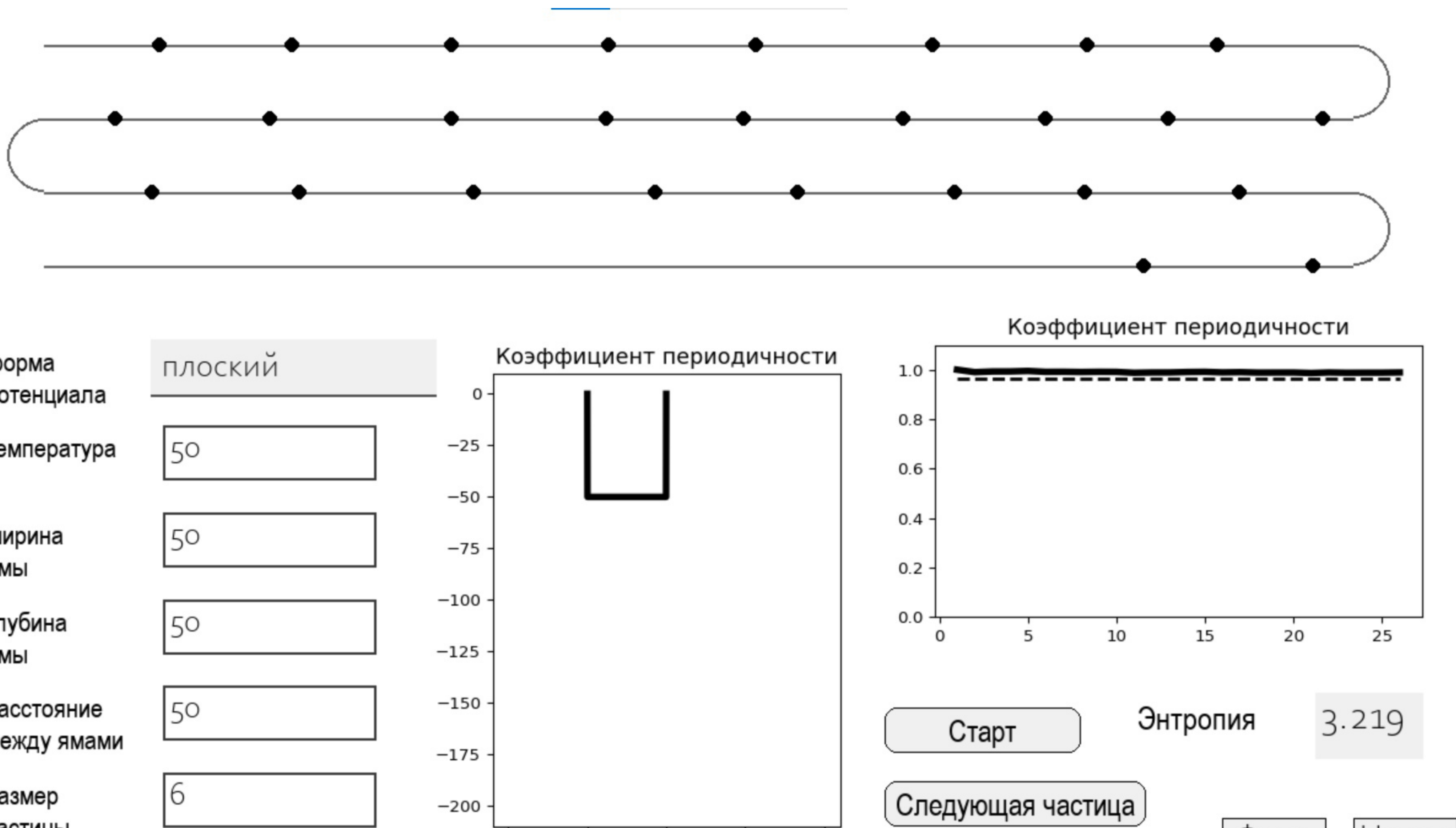
Низкая периодичность:

Здесь задана необычная форма ямы, а также высокая температура, из-за чего увеличивается скорость колебаний частицы внутри ямы.



Высокая периодичность:

Здесь выбрана достаточно обычная форма ямы, где колебания происходят симметрично, поэтому легко установить периодичность.



Периодичность зависит от соотношения температуры и глубины, а не этих величин по отдельности:

В следующих двух примерах отношение температур к глубине ямы одинаковое. По графику периодичности, что периодичность одинакова.

