

Документация к приложению «Распределение расстояний между частицами»

1 Введение в программу

Основная задача приложения — демонстрация фундаментальных принципов статистической физики и молекулярной динамики через непосредственное наблюдение за поведением частиц в реальном времени. Пользователи могут изменять параметры системы непосредственно во время симуляции и немедленно наблюдать последствия этих изменений.

2 Структура интерфейса

2.1 Главное меню

При запуске приложения пользователь попадает в главное меню, которое служит центральным узлом для навигации по всем функциям программы. Меню организовано минималистично и содержит четко выделенные кнопки основных действий:

- **Начать симуляцию** — переход к основному рабочему окну с настройками параметров и визуализацией
- **Теория** — открытие PDF-файла с теоретическими основами работы приложения
- **Об авторах** — информация о разработчиках проекта и научном руководителе
- **Выход** — корректное завершение работы приложения
- **Переключатель языка** — кнопка с изображением флага для быстрой смены языка интерфейса

2.2 Рабочее окно симуляции

После начала симуляции открывается основное рабочее окно, организованное по принципу трёхпанельного интерфейса.

Левая панель управления содержит все элементы для настройки параметров системы, сгруппированные по логическим разделам. Здесь пользователь может регулировать:

- Основные параметры частиц: количество (5-100), радиус (0.5-10), температура (0.1-50), масса (0.01-100)
- Настройки взаимодействий: тип потенциала и его параметры
- Геометрию системы: форму сосуда и его параметры
- Дополнительные опции: включение/выключение столкновений, частоту взаимодействий

Центральная область визуализации отображает движение частиц в реальном времени. Частицы представлены в виде цветных кружков, чётко видимых на фоне контура сосуда. Область автоматически масштабируется под выбранный тип сосуда, обеспечивая оптимальный обзор системы.

Правая панель анализа содержит три гистограммы, которые непрерывно обновляются в процессе симуляции:

1. Распределение частиц по координате X — показывает плотность вероятности нахождения частицы вдоль горизонтальной оси
2. Распределение по координате Y — аналогичный анализ для вертикального направления
3. Распределение парных расстояний — отображает статистику расстояний между всеми парами частиц

3 Управление параметрами системы

3.1 Типы межчастичных взаимодействий

Приложение поддерживает пять различных типов потенциалов взаимодействия, каждый из которых моделирует определённый класс физических явлений:

1. **Без взаимодействия** — частицы движутся независимо, взаимодействуя только при столкновениях
2. **Отталкивание** — сила отталкивания, убывающая как квадрат расстояния между частицами
3. **Притяжение** — сила притяжения с аналогичной зависимостью от расстояния
4. **Потенциал Леннард-Джонса** — стандартный 12-6 потенциал для моделирования жидкостей и газов
5. **Потенциал Морзе** — асимметричный потенциал для моделирования химических связей

3.2 Параметры потенциалов

Для потенциалов Леннард-Джонса и Морзе доступна следующая настройка параметров:

- Для потенциала Леннард-Джонса: энергия взаимодействия (0-100) и характеристическая длина (1-30)
- Для потенциала Морзе: глубина ямы D_e (0-100), параметр жёсткости a (0.01-5) и равновесное расстояние r (1-20)

4 Работа с геометрией системы

4.1 Стандартные типы сосудов

Пользователь может выбрать один из трёх стандартных типов сосудов, каждый из которых обладает уникальными свойствами:

- **Прямоугольный сосуд** — обеспечивает равномерное распределение частиц и идеально подходит для изучения базовых статистических закономерностей
- **Круглый сосуд** — демонстрирует радиальную симметрию и позволяет исследовать центральные силы
- **Многоугольный сосуд** — предоставляет максимальную гибкость для создания произвольных геометрий

4.2 Создание пользовательских сосудов

Одной из наиболее мощных возможностей приложения является инструмент для создания собственных многоугольных сосудов. Процесс создания интуитивно понятен и состоит из нескольких простых шагов:

1. Выберите тип «Многоугольник» в списке сосудов
2. Нажмите кнопку «Рисовать полигон» для входа в режим рисования
3. Левой кнопкой мыши последовательно добавляйте вершины многоугольника в области визуализации
4. Для завершения построения нажмите правую кнопку мыши после создания как минимум трёх вершин
5. При необходимости используйте кнопку «Очистить полигон» для удаления текущей конфигурации

Программа автоматически определяет внутреннюю область многоугольника и обеспечивает корректное отражение частиц от его границ.

5 Теоретические основы

5.1 Физическая модель и уравнения движения

Приложение реализует классическую молекулярную динамику для системы N частиц в двумерном пространстве. Движение каждой частицы описывается уравнениями Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i = - \sum_{j \neq i} \nabla U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

где m_i — масса i -й частицы, \vec{r}_i — её радиус-вектор, а $U(r)$ — потенциал межчастичного взаимодействия.

Для численного интегрирования уравнений движения используется алгоритм Верле (Velocity Verlet), который обеспечивает хорошую точность и сохранение энергии:

$$\begin{aligned} \vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 \\ \vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)]\Delta t \end{aligned}$$

5.2 Потенциалы взаимодействия

В приложении реализованы пять различных потенциалов взаимодействия. Потенциал Леннарда-Джонса задаётся формулой:

$$F_{LJ} = 24\epsilon \left(2\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{\sigma^6}{r^7} \right)$$

где ϵ — глубина потенциальной ямы, σ — расстояние, на котором потенциал обращается в ноль.

Потенциал Морзе описывается выражением:

$$F_M = 2D_e a e^{-a(r-r_0)}(1 - e^{-a(r-r_0)})$$

где D_e — энергия диссоциации, r — равновесное расстояние, a — параметр, определяющий ширину потенциальной ямы.

5.3 Граничные условия и отражения

Для различных типов сосудов реализованы соответствующие граничные условия. В прямоугольном сосуде частицы упруго отражаются от стенок:

$$v'_x = -0.95v_x \quad \text{при отражении от вертикальных стен}$$

$$v'_y = -0.95v_y \quad \text{при отражении от горизонтальных стен}$$

В круглом сосуде отражение происходит от окружности радиуса R :

$$\vec{v}' = \vec{v} - 2(\vec{v} \cdot \vec{n})\vec{n}$$

где \vec{n} — нормаль к поверхности в точке столкновения.

5.4 Статистические распределения

Важнейшим аспектом приложения является анализ статистических распределений, которые позволяют количественно изучать поведение системы частиц. В отличие от визуального наблюдения, статистические распределения дают точную информацию о том, как частицы распределены в пространстве и как они взаимодействуют друг с другом.

Распределение координат показывает плотность вероятности нахождения частицы в определённой точке пространства. Это распределение вычисляется по формуле:

$$p(x) = \frac{\text{число частиц в интервале } [x, x + dx]}{N \cdot dx}$$

где N — общее число частиц, а dx — ширина бина гистограммы. Аналогичное распределение строится для координаты y , что позволяет анализировать анизотропию системы.

Распределение парных расстояний является ещё более информативной характеристикой, поскольку оно отражает корреляции между положениями частиц. Это распределение показывает вероятность того, что две произвольно выбранные частицы находятся на расстоянии r друг от друга:

$$p(r) = \frac{\text{число пар на расстоянии } [r, r + dr]}{\text{общее число пар} \cdot dr}$$

Именно это распределение наиболее чувствительно к типу межчастичного взаимодействия и позволяет обнаруживать образование упорядоченных структур.

5.5 Теоретические распределения в различных условиях

5.5.1 Распределения по координатам

Прямоугольный сосуд без взаимодействий:

- Распределение является равномерным: $p(x) = \frac{1}{L}$, $p(y) = \frac{1}{H}$, где L и H — ширина и высота сосуда

- Все положения внутри сосуда равновероятны, что соответствует концепции идеального газа

Круглый сосуд без взаимодействий:

- Распределение становится неравномерным: концентрация частиц увеличивается по мере приближения к центру сосуда
- Математически в полярных координатах это описывается как $p(r) = \frac{2r}{R^2}$ для $0 \leq r \leq R$, где R — радиус сосуда
- В декартовых координатах распределение имеет форму: $p(x) = \frac{2}{\pi R^2} \sqrt{R^2 - x^2}$ для $-R \leq x \leq R$

Системы с взаимодействиями:

- При сильном отталкивании распределение стремится к равномерному
- Сильное притяжение приводит к образованию пиков в местах скопления частиц

5.5.2 Распределения парных расстояний

Идеальный газ (без взаимодействий):

- Для прямоугольного сосуда размерами $L \times L$ распределение парных расстояний задаётся формулой:

$$p(r) = \frac{2r}{L^2} \left[\frac{2}{\pi} \left(\cos^{-1} \left(\frac{r}{L} \right) - \frac{r}{L} \sqrt{1 - \left(\frac{r}{L} \right)^2} \right) + \frac{r}{L} \left(4 - \frac{r}{L} \right) \right]$$

- Для больших систем распределение аппроксимируется как $p(r) \approx \frac{2\pi r}{A}$ для малых r , где A — площадь сосуда
- Максимум распределения находится на расстояниях порядка половины характерного размера системы

Системы с отталкиванием:

- Распределение описывается радиальной функцией распределения $g(r)$, которая стремится к нулю при $r \rightarrow 0$
- Для потенциала твёрдых сфер $g(r) = 0$ для $r < \sigma$ и $g(r) = 1$ для $r > \sigma$
- При конечной температуре появляется размытие ступеньки из-за теплового движения

Системы с притяжением:

- Радиальная функция распределения $g(r)$ имеет пик на расстоянии минимума потенциала
- Высота пика определяется глубиной потенциальной ямы и температурой системы
- Ширина пика обратно пропорциональна жёсткости потенциала притяжения

Потенциал Леннард-Джонса:

- Потенциал взаимодействия имеет вид:

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

- Радиальная функция распределения $g(r)$ показывает осцилляции с периодами, кратными параметру σ
- Положение первого пика определяется из условия $\frac{dU_{LJ}}{dr} = 0$, что даёт $r_{peak} = 2^{1/6}\sigma \approx 1.12\sigma$
- Амплитуда осцилляций затухает с расстоянием как $\sim \frac{1}{r} \exp(-r/\xi)$, где ξ — корреляционная длина

Потенциал Морзе:

- Потенциал взаимодействия задаётся формулой:

$$U_M(r) = D_e [1 - e^{-a(r-r_0)}]^2$$

- Радиальная функция распределения имеет очень острый пик вблизи $r = r_0$
- Ширина пика определяется параметром жёсткости a : $\Delta r \sim \frac{1}{a}$
- При низких температурах распределение аппроксимируется гауссовым пиком:

$$g(r) \approx g_0 \exp \left(-\frac{a^2 D_e}{k_B T} (r - r_0)^2 \right)$$