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 располагатся 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
- Глубина потенциальной ямы
- Ширина потенциальной ямы
- 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:

1. Плоский: $U(r) = -h = const$, где $h-$ глубина потенциальной ямы;
2. Параболический: $U(r) = \frac{4h}{d^2}(r - \frac{d}{2})^2 - h$, где $h-$ глубина потенциальной ямы, $d-$ ширина параболы;
3. 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 ε− 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 σ^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 $\sigma_0^2 = \int\limits_0^l (r^2 - \langle r \rangle^2) w(r) dr-$ дисперсия частицы с заданным распределением, $\langle r \rangle_0 = \int\limits_0^l r w(r) dr-$ математическое ожидание частицы с заданным распределением.

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 статистичекой физики есть отдельная глава, посвещённая распределению Больцмана. Данная показывает, как ведёт себя распределение при изменении температуры и потенциала.

Интересный факт - задача хорошо показывает построение различных полимеров.

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.

Кнопка "Назад" выведет вас на главную страницу программы, а кнопка "Фото" сделает скриншот экрана и его в папке "Скриншот".

In [ ]: