

Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова

Распределение расстояний между частицами

Документация к приложению

Научный руководитель:

Чичигина Ольга

Алекснадровна

Разработчики:

Енягин Станислав

Александрович

Кожемякова Елизавета

Александровна

Москва, 2025

Содержание

1	Введение	2
2	Структура интерфейса	2
2.1	Главное меню	2
2.2	Рабочее окно симуляции	3
2.3	Изучение конкретной пары частиц	4
3	Параметры	4
3.1	Типы межчастичных взаимодействий	4
4	Работа с геометрией сосуда	5
4.1	Типы сосудов	5
4.2	Создание пользовательских сосудов	5
5	Теоретическое обоснование	6
5.1	Физическая модель и уравнения движения	6
5.2	Потенциалы взаимодействия и их физический смысл	6
5.3	Граничные условия и геометрия сосуда	6
5.4	Распределение энергии и теорема равнораспределения	7
5.5	Метастабильные состояния и модель Ван-дер-Ваальса	7
5.6	Бимодальные распределения	8

1 Введение

Основная задача нашего приложения — наглядная демонстрация принципов статистической физики и молекулярной динамики. Приложение даёт возможность наблюдать за поведением частиц в реальном времени. Одной из сильных сторон нашей программы является возможность динамического изменения параметров системы, т.е. вы можете изменять параметры системы **прямо во время симуляции** и сразу же видеть, как это отражается на физическом взаимодействии частиц.

2 Структура интерфейса

2.1 Главное меню

При запуске вы попадаете в главное меню. Оно содержит кнопки основных действий:

- **Начать моделирование** — непосредственное начало симуляции: переход к основному окну с настройками параметров и визуализацией.
- **Теория** — открывает данный PDF-файл.
- **Об авторах** — информация о разработчиках проекта и научном руководителе.
- **Выход** — завершить работу приложения.
- **Переключатель языка** — возможность переключения языка приложения между русским/английским/китайским.

2.2 Рабочее окно симуляции

После нажатия «Начать моделирование» открывается основное рабочее окно, как показано на Рис. 1.

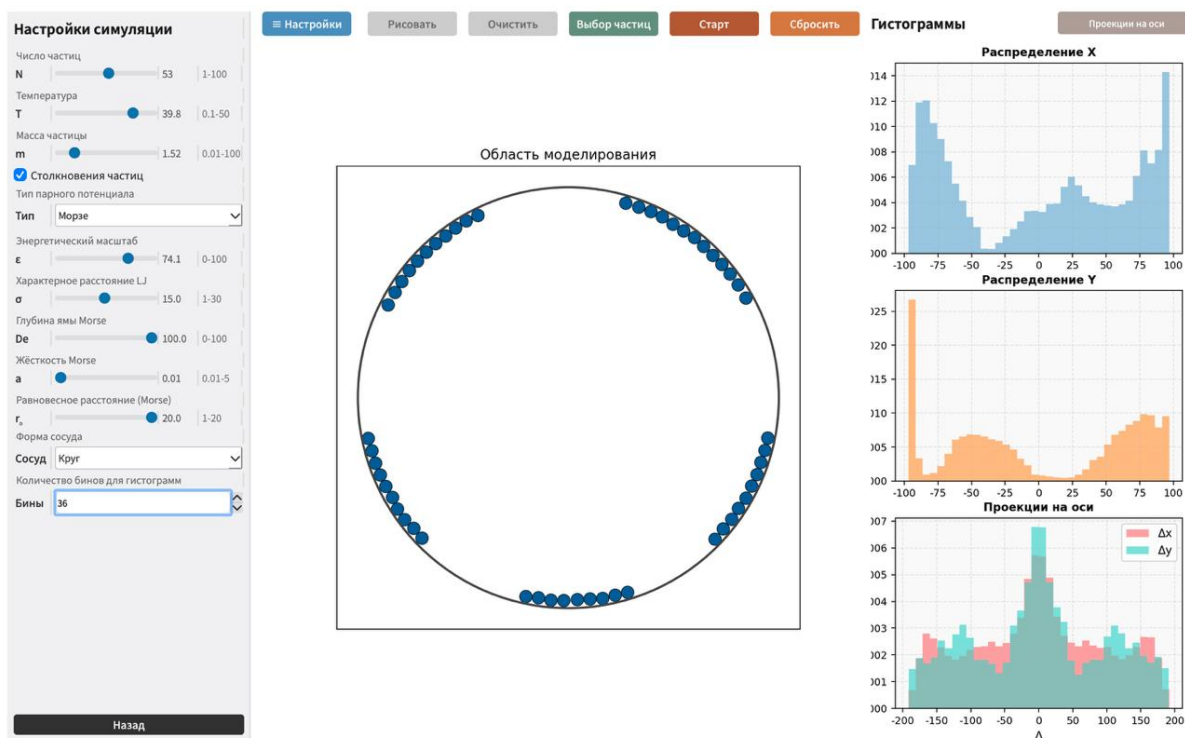


Рис. 1: Общий вид рабочего окна симуляции. Чётко видны три основные области: левая панель управления, центральная область визуализации и правая панель анализа с гистограммами.

Левая панель управления содержит все элементы для настройки системы, Здесь можно регулировать:

1. Основные параметры частиц: количество (от 1 до 100), температура (0.1-50), масса (0.01-100).
2. Настройки взаимодействий: выбор типа потенциала и задание его параметров.
3. Геометрию системы: выбор формы сосуда и его параметров.
4. Дополнительные опции: возможность включать/выключать столкновения и регулировать частоту взаимодействий.

Центральная область визуализации отображает движение частиц в реальном времени. Область автоматически масштабируется под выбранную геометрию.

Правая панель содержит три гистограммы, которые **непрерывно обновляются** по мере развития 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. Отображается на одном графике с анализом для оси X.

3. Распределение парных расстояний — отображает статистику расстояний между всеми парами частиц (или двумя, если задана соответствующая настройка симуляции) , позволяя увидеть формирование кластеров или упорядоченной структуры.
4. Распределение парных расстояний со знаком — аналогичный предыдущему графику, однако в нем демонстрируется не модуль расстояния, а его значение со знаком.

2.3 Изучение конкретной пары частиц

Для детального анализа взаимодействия между отдельными частицами в приложении предусмотрена специальная функция **выбора конкретной пары**.

Как это работает:

1. На левой панели управления нажмите кнопку **Выбор**
2. В области визуализации левой кнопкой мыши кликните на две частицы, которые хотите изучить
3. Выбранная пара будет подсвечена красным цветом
4. Все гистограммы на правой панели мгновенно перестраиваются и начинают отображать статистику только для этой пары частиц

Выбор можно отменить нажатием на кнопку **Отменить**, и все графики снова будут показывать статистику для всех частиц.

Таким образом, вы можете переключаться между анализом всей системы и исследованием отдельных пар частиц, что значительно расширяет аналитические возможности программы.

3 Параметры

3.1 Типы межчастичных взаимодействий

Приложение поддерживает пять различных потенциалов взаимодействия:

1. **Без взаимодействия** — частицы движутся свободно, взаимодействуя только при непосредственном столкновении (модель идеального газа):

$$U(r) = 0,$$

где r — расстояние между частицами.

2. **Отталкивание** — моделирует силу отталкивания, ослабевающую с квадратом расстояния:

$$U_{\text{rep}}(r) = \frac{k}{r},$$

где r — расстояние между частицами, $k > 0$ — коэффициент интенсивности отталкивания.

3. **Притяжение** — моделирует силу притяжения с аналогичной зависимостью от расстояния:

$$U_{\text{attr}}(r) = -\frac{k}{r},$$

где r — расстояние между частицами, $k > 0$ — коэффициент интенсивности притяжения.

4. **Потенциал Леннарда-Джонса** — используется для реалистичного моделирования жидкостей и газов:

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

где ε — глубина потенциальной ямы, σ — характерный линейный размер частицы, r — расстояние между частицами.

5. **Потенциал Морзе** — используется для моделирования химических связей или мягких связанных состояний:

$$U_{\text{M}}(r) = D_e \left(1 - e^{-a(r-r_0)} \right)^2,$$

где D_e — энергия связи, r_0 — равновесное расстояние между частицами, a — параметр жёсткости потенциала, r — расстояние между частицами.

4 Работа с геометрией сосуда

4.1 Типы сосудов

Вы можете выбрать одну из трёх стандартных форм сосуда:

- **Прямоугольный сосуд** — обеспечивает равномерное распределение и идеально подходит для изучения базовых закономерностей.
- **Круглый сосуд** — позволяет продемонстрировать радиальную симметрию.
- **Многоугольный сосуд** — дает максимальную свободу для создания произвольных, сложных фигур и распределений

4.2 Создание пользовательских сосудов

Одной из самых важных возможностей нашего приложения является инструмент для создания собственных сосудов произвольной формы:

1. В списке сосудов выберите тип «Многоугольник».
2. Нажмите кнопку «Рисовать полигон» для входа в режим построения.
3. **Последовательно добавляйте вершины:** щелкайте левой кнопкой мыши в области визуализации.
4. **Завершите построение:** нажмите правую кнопку мыши после того, как создадите как минимум три вершины.
5. Если нужно начать заново, используйте кнопку «Очистить полигон».

Программа автоматически определяет внутреннюю область многоугольника и гарантирует, что частицы будут корректно отражаться от его границ.

5 Теоретическое обоснование

5.1 Физическая модель и уравнения движения

Приложение реализует классическую молекулярную динамику для системы из N частиц в двумерном пространстве. Каждая частица движется под действием межчастичного взаимодействия и взаимодействия со стенками. Движение подчиняется уравнениям 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 $U(r)$ — потенциальная энергия взаимодействия двух частиц.

5.2 Потенциалы взаимодействия и их физический смысл

Межчастичное взаимодействие задаётся центральными потенциалами. Одним из важнейших является потенциал Леннарда–Джонса, моделирующий короткодействующее отталкивание и более дальноедействующее притяжение:

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

а сила имеет вид

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

Этот потенциал является моделью ван-дер-ваальсовых сил. Именно из него, при переходе к термодинамическому пределу, выводятся уравнения состояния реальных газов (например, уравнение Ван-дер-Ваальса).

Потенциал Морзе,

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

используется для моделирования «мягкого» связанного состояния, позволяя наглядно наблюдать формирование устойчивых кластеров.

5.3 Граничные условия и геометрия сосуда

Система частиц заключена в ограниченный сосуд, форма которого сильно влияет на динамику. В простейшем прямоугольном случае реализуется упругое отражение от стенок:

$$v'_x = -\alpha v_x, \quad v'_y = -\alpha v_y, \quad \alpha < 1.$$

где

$$\alpha = 0.95$$

В более сложных случаях (криволинейная граница) численные эксперименты показывают, что алгоритм устойчив и частицы корректно отражаются.

Однако необходимо помнить об ограничении: при больших значениях σ (слишком «жесткий» потенциал) может наблюдаться нефизичный эффект «пролёта» частиц сквозь стенки. Это происходит, потому что характерная длина взаимодействия становится сравнимой с шагом интегрирования.

5.4 Распределение энергии и теорема равнораспределения

Одним из хороших наблюдений является образование устойчивых кластеров при наличии притяжения. Несколько частиц собираются в «каплю», которая начинает двигаться как единое целое с меньшей скоростью центра масс. **Это иллюстрация теоремы о равнораспределении энергии** по степеням свободы.

Кинетическая энергия центра масс кластера определяется как

$$E_{cm} = \frac{1}{2} M V_{cm}^2,$$

где M — суммарная масса кластера. При тепловом равновесии средняя кинетическая энергия кластера оказывается сравнимой с кинетической энергией одиночной частицы, поскольку обе величины соответствуют двум поступательным степеням свободы. Вся "лишняя" энергия аккумулируется во внутренних колебательных степенях свободы кластера.

5.5 Метастабильные состояния и модель Ван-дер-Ваальса

В реальных газах и жидкостях существуют **метастабильные состояния**, например, перегретая жидкость или пересыщенный пар. Эти состояния могут сохраняться некоторое время, хотя в равновесии система должна находиться в другой фазе.

Качественное описание такого поведения даёт уравнение состояния Ван-дер-Ваальса:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT,$$

где P — давление, V — молярный объём, T — температура, R — универсальная газовая постоянная, a — параметр, учитывающий межмолекулярное притяжение, b — параметр, учитывающий конечный размер молекул.

На изотермах Ван-дер-Ваальса существует участок, где

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T > 0,$$

что соответствует неустойчивым и метастабильным состояниям системы.

Наша программа позволяет наблюдать подобные эффекты на уровне движения частиц. При плавном изменении параметров взаимодействия система может в течение некоторого времени сохранять исходную фазу, прежде чем перейти в более устойчивое состояние. Такая задержка перехода является проявлением **метастабильности**.

Таким образом, программа связывает микроскопическую динамику частиц с термодинамическими закономерностями, демонстрируя, как коллективное поведение молекул приводит к эффектам, описываемым уравнением Ван-дер-Ваальса.

5.6 Бимодальные распределения

Наша программа позволяет исследовать системы, в которых могут возникать сложные структуры, отображаемые на гистограммах как **бимодальные распределения** – графики с двумя чёткими пиками.

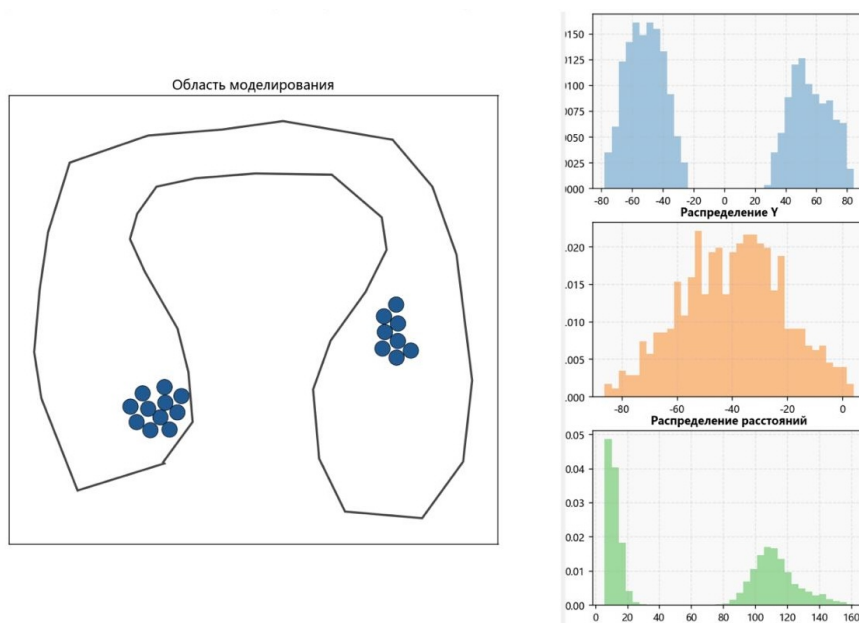


Рис. 2: Пример бимодального распределения межчастичных расстояний.

В контексте распределения парных расстояний это может означать, например, что в системе сосуществуют две характерные длины, на которых чаще всего находятся частицы относительно друг друга. Экспериментируя с параметрами (типом и силой потенциала, температурой, количеством частиц), можно добиваться появления, смещения и исчезновения таких пиков, что является наглядным индикатором изменения внутренней организации системы.