УДК 53.072.001.57

Владимир Николаевич Нестеров, Дмитрий Александрович Сердюков
Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЛУЖДАНИЯ ЧАСТИЦ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗОМКНУТОЙ ЦЕПОЧКЕ©

Блуждания частиц достаточно распространённое явление в микромире. В общем случае движение частиц обусловлено термическими флуктуациями в системе с малым числом частиц системы. Впервые беспорядочное движение малых частиц взвешенных в жидкости было исследовано в 1827 году Р. Брауном, который наблюдал в микроскопе движения пыльцы взвешенной в воде [1]. Это движение получило название броуновского движения. Было отмечено, что интенсивность броуновского движения не зависит от времени, от возрастает с ростом температуры среды, уменьшением её вязкости и размеров частиц. Полная теория броуновского движения была дана А. Эйнштейном и М. Смолуховский в 1905-1906 [Там же]. Броуновское движение - это наиболее наглядное экспериментальное подтверждение представлений молекулярно-кинетической теории о хаотичном тепловом движении атомов и молекул.

В настоящей работе с помощью компьютерного моделирования исследовано блуждание частиц в низкомерной системе. Такие низкомерные системы соответствуют в природе наносистемам. В таких системах в связи с малым количеством частиц входящих в систему, согласно с законом термодинамики происходят интенсивные термические флуктуации [2]. Это приводит к случайным перебросками частиц из одного узла в другой узел низкомерной системы.

Для реализации моделирования блуждания частиц в низкомерных системах, выбрана интегральная математическая система MathCad [3]. Модель низкомерной системы представляет собой простую одномерную незамкнутую цепочку из Q узлов, связанных друг с другом последовательно (Рис. 1).

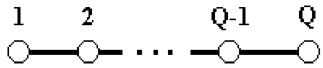


Рис. 1. *Схема модели низкомерной простой системы (1, 2,.. Q-1, Q - номера узлов связанных друг с другом последовательно)*

```
origin := 1

Q := 3      j0 := 1

T1 := 10000

FN := | j ← j0
      | for i ∈ 1..Q
      |   N_i ← 0
      | for i ∈ 1..T1
      |   | r ← rnd(1)
      |   | Δj ← −1  if r ≤ 0.5
      |   | Δj ← 1  if r > 0.5
      |   | Δj ← 1  if j = 1
      |   | Δj ← −1  if j = Q
      |   | j ← j + Δj
      |   | N_j ← N_j + 1
      | N ← N / T1
      | N
```

Рис. 2. *Реализация модели 1 простой одномерной незамкнутой цепочки в системе MathCad, для числа узлов Q=3*

В модели рассматривается блуждание одной частицы: первоначальное положение частицы - частица находится в узле 1. В каждый последующий момент времени частица переходит в соседние узлы. Принимается что вероятность перехода влево и вправо от текущего узла одинакова. Для определения функции плотности вероятности распределений посещения частицы по узлам берётся достаточно большое число шагов (T1:= 10000). На Рисунке 2 представлена реализация модели в MathCad.

Строка ORIGIN:= 1, задаёт первый номер массива, это необходимо для исключения нулевого элемента. В начале программы задаётся начальное положение частицы j0:= 1. Далее задаётся количество узлов (Q:= 3). Задаётся количество шагов исследуемой частицы (T1:= 10 000). Ниже располагается программный блок (FN), вычисляющий плотность вероятности появления частицы в каждом из узлов. В этом программном блоке в первой строке производится присваивания первоначального положения частицы (j←j0). Во второй-третьей строках программного блока организован цикл заполнения столбца начальным количеством посещений (т.е. N_i←0). В строках 4-11 организован цикл для подсчёта количества посещений узлов цепочки.

В 5 строке генерируется случайное значение переменной *r* определяющей направление перехода. Так если значение *r* попало в интервал от 0 до 0.5, то задаётся шаг перехода в лево (Δj←-1) (строка 6), если значение r попало в интервал от 0,5 до 1, то частица совершает переход вправо (Δj←1) (строка 7). В узле 1 переход влево не возможен, поэтому в случае j=1 , задаётся однозначный шаг вправо (Δj←1) (строка 8). В узле Q переход вправо невозможен, поэтому в случае j=Q , задаётся однозначный шаг влево (Δj←-1) (строка 9).

В строке 10 задаётся новый узел положения частицы, путём приращения к старому значению положения частицы значения 1 (соответствует переходу вправо), или -1 (соответствует переходу влево). В 11-ой строке суммируется количество посещений j-го узла ($N_j \leftarrow N_j+1$). Описанная процедура повторяется T1 раз, с помощью цикла for $i \in 1..T1$ (строка 4). В строке 12 производится нормировка значений посещений частицы $(N \leftarrow \frac{N}{T})$, в результате в столбце N формируются значения плотности вероятности посещения частицей j-го узла. В строке 13 производится вывод значения результата работы программы FN. Далее, выводятся в виде столбца значения плотности посещения частицей узлов цепочки (Рис. 3). И ниже выводятся графическое представление функции плотности посещений частицей узлов цепочки (Рис. 3).

\

$$FN = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.247 \\ 0.5 \\ 0.253 \end{pmatrix}$$

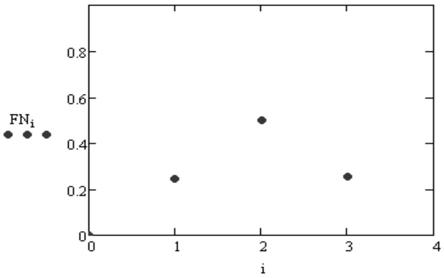
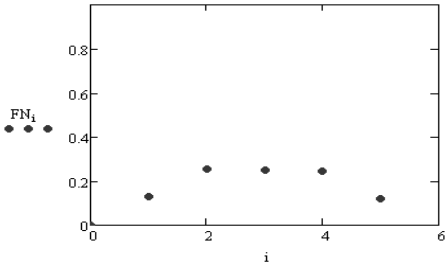


Рис. 3. *Значение и график плотности посещения частицей узлов для числа узлов Q=3*

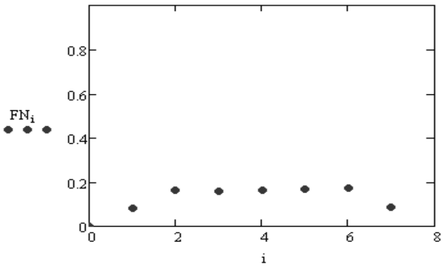
Для исследования случаев цепочки с количеством узлов Q=5, 7, 9, 11 изменяется в программе значение Q, на соответствующее значение (например, для случая с количеством узлов 11, задаётся $Q := 11$).

В результате получаются значения и графики плотности посещения частицей узлов для различного количества узлов цепочки Q=5, 7, 9, 11 (Рис. 4).

$$FN = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.131 \\ 0.256 \\ 0.249 \\ 0.244 \\ 0.121 \end{pmatrix}$$

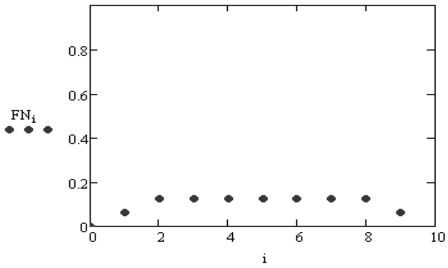


$$FN = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.084 \\ 0.164 \\ 0.159 \\ 0.162 \\ 0.169 \\ 0.173 \\ 0.088 \end{pmatrix}$$



FN =

	0
0	0
1	0.064
2	0.124
3	0.123
4	0.124
5	0.125
6	0.125
7	0.126
8	0.127
9	0.062



FN =

	0
0	0
1	0.046
2	0.092
3	0.092
4	0.094
5	0.1
6	0.106
7	0.107
8	0.106
9	0.105
10	0.102
11	0.051

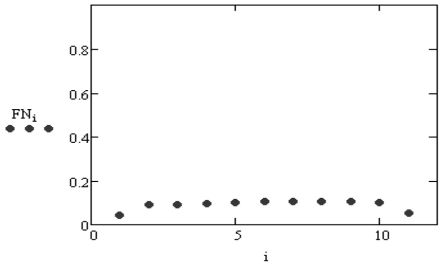


Рис. 4. *Значения и графики плотности посещения частицей узлов для различного числа узлов Q=5, 7, 9, 11; в простой одномерной незамкнутой цепочке*

Из анализа графиков 4 видно, что:
1) вероятности посещения частицей средних узлов цепочки равны;
2) вероятности посещения частицей крайних узлов цепочки, в 2 раза меньше, чем в средних узлах;
3) вероятности посещения узлов частицей уменьшается с ростом длины цепочки.

Анализируя закономерности вероятности посещения частицей узлов незамкнутой цепочки, можно сделать вывод, что в незамкнутой цепочке возникают краевые эффекты, проявляющиеся в уменьшении вероятности посещения частицей крайних узлов цепочки.

Приведенная выше программа, реализованная в среде *MathCad*, позволяет моделировать блуждание частиц в низкомерных системах и выявлять особенности появления частиц в незамкнутых цепочках.

Список литературы

1. Ландау Л. Д. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. Ч. 1. 567 с.
2. Макаров Е. Г. Инженерные расчеты в *Mathcad 14*. СПб.: Питер, 2007. 592 с.
3. Эйнштейн А., Смолуховский М. Броуновское движение / пер. с нем. Л., 1936. 608 с.

УДК 517.3

Олеся Валерьевна Ноговицина
Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова

ИНТЕГРАЛЬНОЕ ИСЧИСЛЕНИЕ©

В наши дни, когда математика естественно и неотразимо проникает не только в научные исследования, но и непосредственно в практическую деятельность, вопросы математического образования вызывают интерес, выходящий далеко за пределы узкого круга специалистов в области собственно математики. Для научно-исследовательского прогресса особое значение представляют различные аспекты математического образования будущего инженера, всестороннее обсуждение укоренившихся представлений о содержании и характере обучения студентов [2, с. 180].

Важное значение в математической подготовке студентов технического университета играет раздел «Интегральное исчисление». Изучение данного раздела рекомендуется начинать с исторических замечаний, подчеркивая при этом международный характер развития науки, в том числе отмечая и вклад отечественных ученых [Там же, с. 112].

Понятие интеграла и интегральное исчисление возникли из потребности вычислять площади любых фигур и поверхностей, объемы произвольных тел. Задачи на вычисление площадей математики Древней Греции и Рима называли задачами о квадратуре. Латинское слово «квадратура» переводится как «придание квадратной формы». Необходимость в специальном термине объясняется тем, что в античное время еще не были достаточно развиты привычные для нас представления о действительных числах. Математики оперировали с их геометрическими аналогами или скалярными величинами, которые нельзя перемножать. Поэтому и задачи на нахождение площадей приходилось формулировать так: «Построить квадрат, равновеликий данному кругу» (эта задача «о квадратуре круга не может быть решена с помощью циркули и линейки). Символ $\int$ был введен Лейбницем в 1686 году. В нем знак $\int$ представляет как бы удлиненную букву S (первая в латинском слове Summa). Само слово интеграл придумал Я. Бернулли в 1609 году. Вероятно, оно происходит от латинского «интегро», которое переводится как «приводить в прежнее состояние, восстанавливать». Возможно, происхождение термина интеграл иное: слово integer означает целый. В ходе переписки И. Бернулли и Г. Лейбниц согласились с предложением Я. Бернулли. Г. Лейбниц этот термин одобрил, но неохотно, он до этого пользовался выражением «сумма все y dx». Это произошло в 1696 году. Тогда же появилось и название новой ветви математики - интегральное исчисление, которое ввел И. Бернулли. Употребляющееся сейчас название «первообразная функция» заменило более раннее «примитивная функция», которое ввел Лагранж в 1797 году. Латинское слово «примитиус» переводится как «начальный»: $F(x) = \int f(x)dx$ - начальная (первоначальная, первообразная) для f(x), которая получается из F(x) дифференцированием. В современной литературе множество всех первообразных для функции f(x) называется также неопределенным интегралом. Это понятие выделил Лейбниц, заметивший, что все первообразные функции отличаются на произвольную постоянную. Интеграл от a до b от функции f(x) называют определенным интегралом. Обозначение ввел Фурье, но пределы интегрирования указывал уже Эйлер. В общей форме определение интеграла было сформулировано немецким математиком Б. Риманом примерно в середине девятнадцатого века. Вследствие этого интегральную сумму часто называют римановой суммой [1].
