

## **Флуктуация числа частиц в объёме.**

**Флуктуация** - термин, характеризующий любое случайное отклонение величины от среднего значения. В данной презентации проводится расчёт и визуализация изменения числа частиц в некотором выделенном объёме в зависимости от различных параметров. Из теории известно, что относительные флуктуации числа частиц и, следовательно, их концентрации в подсистеме тем больше, чем меньше её объём. Чтобы отобразить это используется некий фиксированный объём, внутри которого можно выделять область меньшего объема. Число хаотически движущихся частиц, попавших в выделенный объём, является случайной величиной. Статистические характеристики этой величины исследуются в презентации.

### **Эксперимент.**

Как было сказано ранее, у нас имеется некоторый сосуд фиксированного объёма, в котором реализовано движение взаимодействующих частиц. Сосуд можно поворачивать, приближать и удалять с помощью мыши. В данной презентации для моделирования взаимодействия частиц можно выбрать из двух видов потенциалов. Первый – это обычный кулоновский потенциал, а второй более интересный — потенциал Леннарда-Джонса. Пользователю предоставлена возможность изменения параметров потенциала Леннарда-Джонса, все формулы и параметры которого описаны в разделе «Основные формулы» презентации. В заданном фиксированном объёме пользователь может установить положение и размер выделенной области, относительно которой и будет измеряться флуктуация числа частиц. Изменяя различные параметры, мы можем наблюдать, как меняется количество частиц в выбранном объёме со временем.

### **Теория.**

В презентации приведено достаточное подробное описание потенциала Леннарда-Джонса и формулы для расчёта. Также приводится вывод формулы для относительной флуктуации числа частиц. Собственно это позволяет достаточно ясно представлять теоретическую подоснову эксперимента.

### **Наглядный материал.**

Кроме демонстрации движения и взаимодействия частиц в презентации также строится красным цветом график значений относительной флуктуации (число частиц внутри, деленное на полное число частиц) в зависимости от времени. При низких температурах можно видеть, что при попадании новой частицы в область график поднимается на ступеньку, а при выходе – опускается. Также строится график зависимости потенциала от расстояния между частицами. Благодаря ему можно увидеть разницу между двумя используемыми для моделирования взаимодействия частиц потенциалами. Также пользователь может наблюдать разницу между эмпирическими и теоретическими математическим ожиданием и дисперсией в специальных окошках, обозначенных E и D, соответственно. Заметим, что наибольшее сходство этих значений получается при максимальном количестве частиц. Пользователь может в реальном времени изменять количество взаимодействующих частиц. Этот параметр может принимать значения от 0 до 100. Также имеется возможность изменять размеры и положение выбранного объёма, относительно которого будут проводиться вычисления. Тут стоит заметить одну особенность, что при крайних значениях параметра положения, выбранного объёма, размер объёма автоматически уменьшается, чтобы соответствовать заданному положению его центра, что достаточно странно. Наряду с этим пользователь может изменять температуру системы и массу частиц. Соответственно при повышении температуры и уменьшении массы скорость движения частиц увеличивается, а в противоположном случае большее влияние оказывает взаимодействие частиц.

Данную презентацию можно использовать в двух различных целях. Во-первых, для

исследования изменения относительной флуктуации числа частиц. Для этого стоит выбирать не очень большие значения массы, среднюю температуру и достаточно большое число частиц, ну и в основном менять параметры выделенного объема, хотя с массой и температурой тоже, конечно, стоит поэкспериментировать. Эта презентация позволяет наблюдать разницу между двумя потенциалами взаимодействия частиц, для этого изначально стоит выбирать достаточно большие значения массы частиц и чуть больше 50 число частиц или две частицы. Интересно, что при взаимодействии с потенциалом Леннарда-Джонса результат не зависит от положения выделенного объема. А при кулоновском отталкивании и малой температуре видно, что большая часть частиц находится около стенок сосуда. Число частиц внутри исследуемой области будет зависеть от ее положения, однако теория этого не учитывает.

Во-вторых, данная презентация отлично подходит для демонстрации на лекции студентам по темам флуктуации плотности, взаимодействие молекул. Школьникам можно показать зависимость числа частиц от объема области, донести нестрогие полуинтуитивные представления о вероятности.