

УДК 004.94+004.4]:533.7

В. М. Бондарєв, канд. техн. наук, доц.; Ю. Ю. Черепанова**КОМП'ЮТЕРНА СИМУЛЯЦІЯ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ З
НАВЧАЛЬНИМИ ЦІЛЯМИ**

В роботі пропонується імітаційна модель ідеального газу, побудована на основі законів механіки, застосованих до великої кількості простих об'єктів. Об'єктами є абсолютно пружні кулі, які мають певну масу і розмір. Кулі стикаються одна з одною і зі стінками посудин абсолютно пружно, тобто без втрат енергії на пластичну деформацію. Розрахунок зіткнень виходить із законів збереження енергії та імпульсу, що є необхідною умовою фізичності моделі.

Кулі рухаються у дискретному часі, тобто їх координати і імпульси змінюються стрибками, що фактично є численним розв'язком диференційних рівнянь руху. Співвідношення між дискретним часом і реальним визначається частотою роботи програмного рушія і лежить в межах від 10 до 100 тактів за секунду. Частота роботи рушія залежить як від потужності процесора, так і від складності моделі, яка досліджується. Модель газу двовимірною, це зводить кількість необхідних обчислень до прийнятної і дає змогу використовувати модель для створення інтерактивного навчального ПО.

На базі моделі розроблена комп'ютерна програма, яка дозволяє імітувати лабораторні установки та проводити досліди з їх допомогою. Установки складаються з посудин, посудин із поршнями, нагрівальних та вимірювальних пристроїв. Досліди можуть охоплювати широкий спектр явищ, таких як дифузія, броунівський рух, різні види теплоємності газу, розподіл швидкостей частинок, перетворення теплової енергії в механічну, різноманітні термодинамічні цикли тощо.

Хоча комп'ютерна імітація не є повноцінною заміною фізичних експериментів, вона гнучка і здатна відтворити набагато більше експериментів, ніж будь-яка лабораторія пересічної школи або вишу. Комп'ютерна модель сприяє розвитку дослідницьких навиків студентів і робить навчання більш цікавим і результативним.

Ключові слова: ідеальний газ, імітаційна модель, комп'ютерна симуляція, навчальний процес.

Вступ

Класична термодинаміка важливий розділ фізики, який не є простим для засвоєння. Труднощі пов'язані з браком фізичної інтуїції стосовно поведінки газу і таких понять, як ентальпія, ентропія, ізохорна та ізобарна теплоємність тощо. Таке положення можна було б виправити, якщо підкріпити вивчення теорії достатнім лабораторним практикумом, але з відомих причин це наразі неможливо. Втім з розвитком апаратної і програмної бази побутових комп'ютерів відкривається можливість програмної імітації фізичних явищ навіть на ноутбуках і телефонах. Важливо, щоб така імітація не порушувала законів фізики і мала інтерактивний характер, бо тільки активні дії того, хто навчається, забезпечують успіх навчання.

В роботі пропонується імітаційна модель ідеального газу, побудована на основі законів механіки, застосованих до великої кількості простих об'єктів. Ідея імітації поведінки газу за допомогою багатьох об'єктів не нова [1]. Дослідження в цьому напрямку присвячені досягненню суто зовнішньої схожості з реальністю [2, 3] або підвищенню точності імітації окремих явищ [4, 5, 6], наприклад, врахування потенціалу Леннарда-Джонса [7] під час зіткнення частинок.

Труднощі комп'ютерного моделювання в тому, що частинок має бути достатньо багато (десятки і навіть сотні тисяч), щоб проявився статистичний характер поведінки газу. В той же час обчислення мають проводитись доволі швидко, щоб «лабораторні дослідження» протікали в реальному масштабі часу. Додаткова вимога полягає в тому, щоб модель працювала в широкому діапазоні значень своїх параметрів, бо це робить досліди більш різноманітними і змістовними.

Модель

Для моделювання ідеального газу використовуються «білярдні кулі» - абсолютно пружні сфери, які мають певну масу і розмір. Кулі стикаються одна з одною і зі стінками посудин абсолютно пружно, тобто без втрат енергії на пластичну деформацію. Розрахунок зіткнень виходить із законів збереження енергії та імпульсу, що є необхідною, хоч і не достатньою умовою фізичності моделі.

Кулі (далі будемо називати їх частинками) рухаються у дискретному часі. Співвідношення між дискретним часом і реальним визначається частотою роботи програмного рушія і лежить в межах від 10 до 100 тактів за секунду. Частота роботи рушія залежить як від потужності процесора, так і від складності моделі, яка досліджується.

Модель газу двовимірна, це зводить складність створення «лабораторних установок» користувачем до прийнятної. Також це суттєво зменшує кількість обчислень, необхідних для моделювання поведінки газу.

Підсумовуючі сказане, можна вказати наступні фактори ризику неадекватності моделі: дискретність часу, відносно мала кількість частинок і двовимірність модельного простору.

Відбиття частинок від стінок посудин

В перших версіях моделі посудини з газом були багатогранниками довільної форми. Але згодом виявилось, що від такої можливості доволі мало користі, і наразі форма посудин обмежена багатокутниками, в яких всі кути прямі, а грані паралельні осям координат, і найчастіше це прямокутники. Накладені обмеження не зменшують учбову цінність моделі, але спрощують обчислення, що, в свою чергу, дозволяє збільшувати кількість частинок і таким чином наближати модель до реальності.

Частинки рухаються всередині посудини, відбиваючись від стінок. Будемо нехтувати розміром частинок при розрахунку їх зіткнень зі стінками, що цілком відповідає концепції ідеального газу і до того ж спрощує обчислення.

Нехай x_t, y_t – координати частинки в момент часу t , а vx_t, vy_t – швидкість частинки в цей момент. Стінка посудини є відрізком прямої лінії, кінці якого мають координати x_1, y_1 та x_2, y_2 . При відсутності перешкод у наступний момент дискретного часу координати частинки будуть

$$x_{t+1} = x_t + vx_t, y_{t+1} = y_t + vy_t \quad (1)$$

В формулах (1) проміжок дискретного часу між моментами t і $t+1$ дорівнює одиниці, тому множення швидкості на одиницю опущене.

Вважається, що в момент часу t частинка стикається зі стінкою, якщо відрізки $((x_1, y_1), (x_2, y_2))$ і $((x_t, y_t), (x_{t+1}, y_{t+1}))$ перетинаються. При абсолютно пружному зіткненні частинки зі стінкою компонента швидкості частинки, направлена вдовж стінки, не змінюється, а компонента швидкості, нормальна до стінки, змінює свій знак на протилежний (рис. 1 а).

Може статися так, що відбита таким чином частинка опиниться за межами посудини (рис. 1 б). Щоб запобігти цьому, треба враховувати не одне, а всі можливі зіткнення частинки зі стінками, які б відбувалися, якби частинка була реальною. Таких зіткнень буде тим більше, чим більша швидкість частинки (рис. 1 в).

Зіткнення частинок між собою

Деякі моделі ідеального газу взагалі не враховують зіткнення частинок [8]. Але в нашому випадку це не прийнятне, бо позбавляє нас можливості моделювання багатьох явищ, як то дифузія, розподіл швидкостей частинок, врівноваження системи частинок тощо.

В поточній версії моделі зіткнення двох частинок визнається таким, що відбулося, коли відстань між їх центрами, по-перше, стає менше за суму їх радіусів, по-друге, буде зменшуватися, якщо рух частинок продовжиться (рис. 2а).

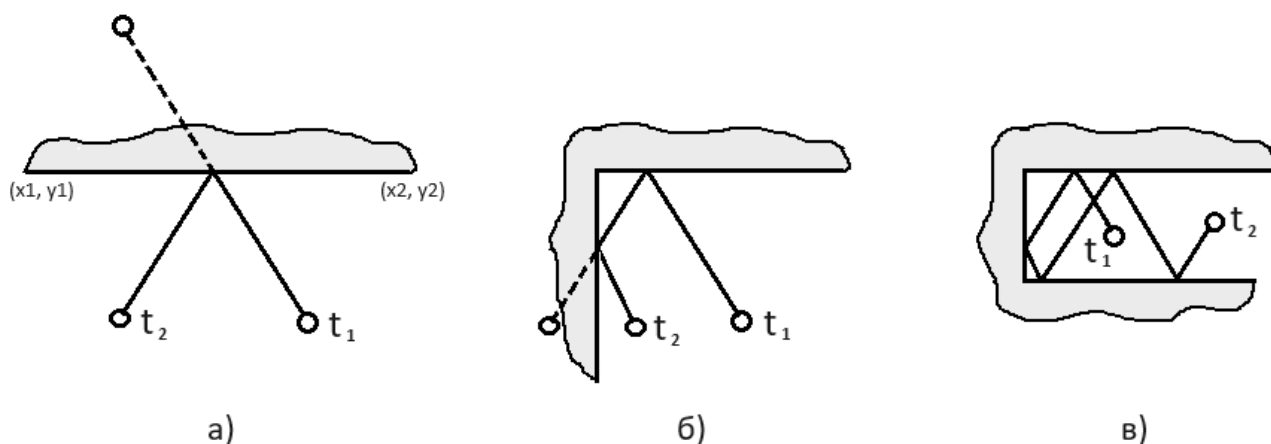


Рис.1. Відбиття частинок від стінок посудин

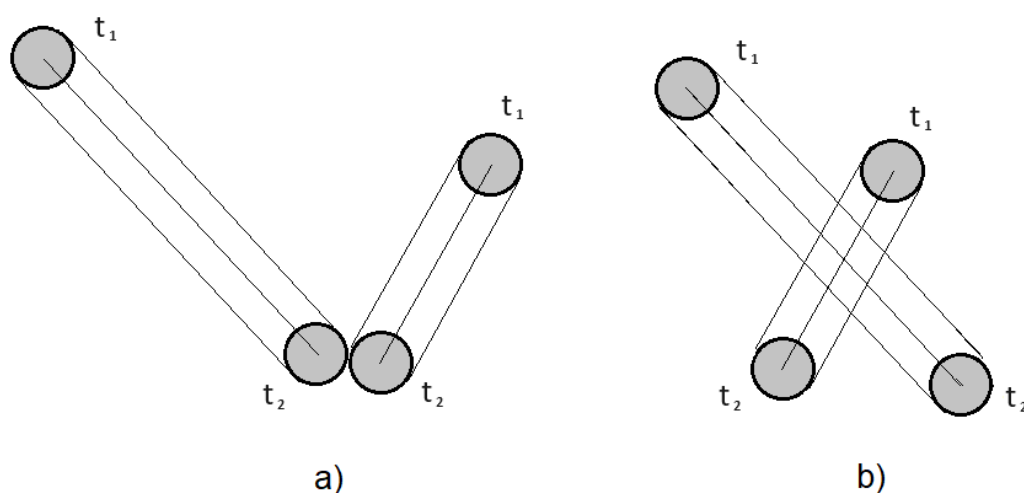


Рис. 2. Зіткнення частинок

Можливість одночасного зіткнення трьох і більше частинок в моделі взагалі не враховується.

Зіткнення відбувається абсолютно пружно, тому розрахунок ведеться згідно з законами збереження сумарної енергії і імпульсу двох частинок [9].

Розрахунок починається з повороту системи відліку так, щоб лінія, яка з'єднає центри куль, була паралельна до вісі Ox . При такому положенні куль в разі зіткнення змінюються лише проекції швидкостей на вісь Ox , а проекції швидкостей на вісь Oy залишаються незмінними.

Якщо m_1 і m_2 – маси куль, v_1 і v_2 – швидкості куль до зіткнення, u_1 і u_2 – швидкості куль після зіткнення, проекції швидкостей на вісь Ox визначаються за формулами:

$$u_{1x} = \frac{(m_1 - m_2) \cdot v_{1x} + 2 \cdot m_2 \cdot v_{2x}}{m_1 + m_2} \quad (2)$$

$$u_{2x} = \frac{(m_2 - m_1) \cdot v_{2x} + 2 \cdot m_1 \cdot v_{1x}}{m_1 + m_2} \quad (3)$$

Завершує обчислення оберт системи відліку в зворотному напрямку.

Якщо перевіряти умови зіткнень лише в дискретні моменти часу (як то робиться зараз), будуть не помічені такі зіткнення, що відбулися б, якби час моделі був безперервний, а не

дискретний (рис. 2б). Врахувати такі зіткнення можливо, але не доцільно, бо кількість обчислень при такому врахуванні кардинально збільшується. В той же час ясно, що роль зіткнень частинок між собою зводиться до перерозподілу швидкостей частинок (або їх кінетичної енергії) в межах простору, який займають частинки. Чим більше зіткнень, тим швидше іде перерозподіл і система швидше переходить в рівноважний стан.

Якщо врахованих зіткнень мало, перехідні процеси в моделі сповільнюються і спостереження за нею стають некомфортними. Довести кількість зіткнень до прийнятної можна просто збільшивши радіус куль. Про прийнятну кількість зіткнень ми ще поговоримо, коли будемо визначати межі застосування моделі.

Якщо перевіряти можливість зіткнень для кожної пари частинок в модельному просторі, кількість потрібних перевірок буде оцінюватися як $O(n^2)$, де n – кількість частинок. Такий висновок витікає з того, що кількість пар, створених з елементів, дорівнює $n(n - 1)/2$.

Втім зіткнення більш вірогідні саме з найближчими сусідами частинки і мало вірогідні з віддаленими частинками. Можна поділити модельний простір на комірки, і перевірку можливих зіткнень проводити локально в межах комірки, де знаходиться частинка. При цьому на кожному такті модельного часу розподіл частинок по коміркам треба оновлювати.

Поділення простору на комірки призведе до подальшої втрати потенційних зіткнень, бо не будуть враховані можливі зіткнення між частинками, які близькі одна до одної, але знаходяться в різних комірках. Але, як вже було зауважено, врахування всіх зіткнень не є обов'язковим і їм можна поступитися заради ефективності. Хоча поділення простору на комірки не змінює оцінки $O(n^2)$ часової складності обчислень, воно може на два порядки зменшити їх кількість.

Втім, як показав досвід, сталі границі між комірками і фіксований порядок їх обходу призводять до небажаних ефектів в поведінці газу, які стають доволі помітними за низьких температур тобто при дуже малих швидкостях частинок. Зазначимо, що такі явища вдалося усунути шляхом змінювання порядку обходу комірок на протилежний на кожному такті дискретного часу.

Вимірювання

Для спостереження за процесами, що відбуваються в моделі, необхідні вимірювання температури та тиску в заданому об'ємі газу. З огляду на суто механічну природу моделі можна безпосередньо спостерігати такі речі, як загальну кількість частинок, об'єм, в якому вони знаходяться, координати, масу та швидкість кожної частинки. Показники тиску та температури будуть похідними від вище перелічених.

За визначенням температури

$$T = \frac{2}{i} \frac{\varepsilon_{\text{сер}}}{k_B}, \quad (4)$$

де T – температура газу, $\varepsilon_{\text{сер}}$ – середня кінетична енергія частинок, i – кількість ступенів свободи (для двомірної моделі вона дорівнює двом), k_B – стала Больцмана.

Середня кінетична енергія вираховується як $\varepsilon_{\text{сер}} = \frac{\varepsilon_{\text{сум}}}{N}$, де N – кількість частинок в області вимірювання, $\varepsilon_{\text{сум}}$ – загальна кінетична енергія усіх частинок. Отже, для вимірювання температури достатньо знати сумарну кінетичну енергію та кількість частинок в області вимірювання.

$$T = \frac{\varepsilon_{\text{сум}}}{Nk_B} \quad (5)$$

З основного газового рівняння

$$pV = Nk_B T \quad (6)$$

слідє, що тиск – це відношення сумарної кінетичної енергії частинок до об'єму, який вони займають.

$$p = \frac{Nk_B T}{V} = \frac{\varepsilon_{\text{сум}}}{V} \quad (7)$$

Тобто тиск, як і температура, залежить в моделі лише від сумарної енергії та кількості частинок в об'ємі вимірювання, і для визначення тиску достатньо знати сумарну енергію частинок і об'єм області вимірювання.

При такому способі вимірювання закон Шарля ($p/T = \text{const}$ при $V = \text{const}$)

$$\frac{p}{T} = \frac{\varepsilon_{\text{сум}}/V}{\varepsilon_{\text{сум}}/Nk_B} = \frac{Nk_B}{V} \quad (8)$$

і Бойля-Маріотта ($pV = \text{const}$ при $T = \text{const}$)

$$pV = \frac{\varepsilon_{\text{сум}}}{V} V = \varepsilon_{\text{сум}} \quad (9)$$

виконуються автоматично. Втім практична перевірка обох законів доречно, бо є перевіркою обчислювальної коректності моделі.

Перевірку співвідношення $pV = \text{const}$ можна провести за допомогою установки, яка є посудиною, що містить 3 частини або секції у співвідношенні 1:2:4 (рис. 3а).

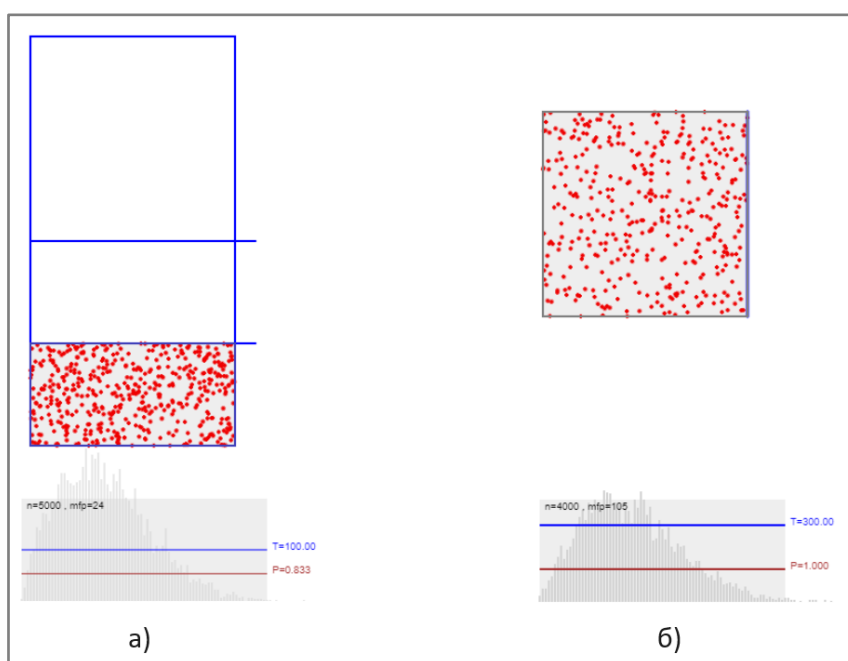


Рис. 3. Перевірка законів Шарля і Бойля-Маріотта

В нижній секції посудини знаходиться певна кількість газу, тиск і температуру якого виміряємо за допомогою певного приладу. Прилад підраховує енергію і кількість частинок в межах прямокутника приладу (на малюнку прямокутник приладу забарвлено сірим. Контур прямокутника приладу також сірий і співпадає з границями секції, тому не дуже добре видний. Показання приладу у числовій і графічній формі можна бачити нижче зображення посудини, детальніше про прилади буде далі.

Приберемо нижню заслінку, що дозволить газу зайняти вдвічі більший об'єм, і знову виміряємо тиск. Відомо, що при розширенні газу в вакуумі його температура не змінюється, бо він не виконує роботи, але ми температуру також виміряємо безпосередньо.

Приберемо другу заслінку, що збільшить доступний газу об'єм вчетверо та знову виміряємо тиск. Параметри установки такі: загальний об'єм посудини $V = 200 \cdot 400$, кількість частинок газу $N = 5000$, температура $T = 100$, радіус частинки $r = 0.25$, маса частинки $m = 1$. Результати вимірювань тиску зведені в таблицю 1.

Таблиця 1.

Закон Бойля-Маріотта

V	p	pV
200*100	0.833	16660
200*200	0.417	16680
200*400	0.208	16640

Перевірку співвідношення $p / T = \text{const}$ зробимо за посудини з газом, який будемо нагрівати і охолоджувати за допомогою нагрівального пристрою і при цьому вимірювати тиск (рис. 3б). Параметри установки такі: загальний об'єм посудини $V = 200*200$, кількість частинок газу $N = 4000$, радіус частинки $r = 0.25$, маса частинки $m = 1$. Результати вимірювань температури та тиску зведені в таблицю 2.

Таблиця2

Закон Шарля

T	P	p/T
199.30	0.664	0.003332
300.00	1.000	0.003333
399.32	1.331	0.003333

Вимірювальні прилади

Вимірювання робляться в прямокутній області простору, за допомогою програмних об'єктів – вимірювальних приладів. За один такт модельного часу вимірювальний прилад підраховує кількість частинок газу, які знаходяться в межах прямокутника приладу, їх сумарну та середню кінетичну енергію. Результати вимірювання відображуються у вигляді значень температури та тиску.

Прилади можна створювати, коли вони потрібні, і видаляти, коли потреба в них зникає. Прилад можна налаштувати на вимірювання парціального тиску та температури, селекція відбувається за кольором частинок.

На екрані прилад виглядає як напівпрозорий прямокутник сірого кольору. Покази приладу відображуються на окремій панелі поруч із прямокутником приладу. Там можна бачити значення тиску і температури в числовій і графічній формі. В побудові графіків приймають участь останні 50 вимірювань, що дає змогу спостерігати не тільки миттєві значення, а і тенденцію їх змінювання.

Вимірювальний пристрій також відображує гістограму модулів швидкостей молекул. По вигляду такого розподілу можна оцінювати, чи знаходиться газ у рівноважному стані – коли система частинок знаходиться у рівновазі, розподіл повинен наближатися до розподілу Максвелла-Больцмана [9].

Як виглядають вимірювальні пристрої і їх покази можна побачити на рис. 3.

Нагрівальні пристрої

Нагрівальний пристрій підводить або відбирає тепло від газу. Пристрій має параметри: прямокутник в просторі (задається координатами лівого верхнього, x_1, y_1 , і правого нижнього, x_2, y_2 , кутів) і $gate$ – швидкість нагрівання. Пристрій діє на газ, що знаходиться в прямокутнику.

На кожному такті дискретного часу пристрій збільшує швидкість кожної частинки за формулою $v = v * rate$. Якщо $rate > 1$ пристрій передає тепло газу, якщо $rate < 1$, навпаки, відбирає. Пристрій також підраховує сумарну кількість переданого тепла, вона додатна під час нагрівання і від'ємна під час охолодження газу.

Пристрій виглядає як напівпрозорий прямокутник помаранчевого кольору, коли він нагріває газ, і синього кольору, коли охолоджує. Як і вимірювальні прилади, нагрівальні пристрої створюються і видаляються за необхідністю.

Одиниці вимірювання

Значення параметрів моделі (тиск, об'єм, температура тощо) можна виразити в умовних одиницях, і це ніяк не вплине на результати дослідів, запроваджених на моделі. Умовні (або модельні) одиниці обрані так, щоб зменшити кількість коефіцієнтів в формулах, за якими робляться обчислення, необхідні для функціонування моделі.

Лише для зручності спостерігачів можна під час відображення результатів вимірів замінити модельні одиниці вимірювання більш звичними – сантиметрами, градусами, атмосферами тощо. Основні одиниці можна просто переназвати, модельну одиницю довжини назвати сантиметром, одиницю маси – грамом, одиницю часу – секундою. Похідні одиниці – імпульсу, сили, енергії, тиску виражаться через основні.

Що стосується градусів, то тут треба зважати на діапазон можливих швидкостей частинок. Створимо сцену, в якій в посудині ємністю 200x200 розташовано 4000 частинок масою 1 і радіусом 0.25. Якщо частинки рухаються з середньою швидкістю 0.1, тобто 1 піксель за 10 тактів модельного часу (приблизно 5 пікселів за секунду), то це виглядає дуже повільно, майже на межі прийнятної для спостережень. Домовимося, що це відповідає абсолютній температурі в 1 градус.

За визначенням температури $T = \frac{\varepsilon_{\text{сеп}}}{k_B}$ вирахуємо «сталу Больцмана» для нашої моделі, $k_B = 0.005$. Тепер ми маємо коефіцієнт переведення кінетичної енергії частинки в абсолютну температуру.

Відомо, що в житті нормальні умови відповідають 300 градусам і одній атмосфері. Але в модельних одиницях тиск при такій конфігурації стане $p = \frac{\varepsilon_{\text{сум}}}{V} = \frac{N\varepsilon_{\text{сеп}}}{V} = \frac{NTk_B}{V} = 0.15$. Виходить, що при відображенні вимірювань тиску ми повинні поділяти їх на 0.15.

Співвідношення між модельними і звичними одиницями виміру можна звести в таблицю 3.

Таблиця 3

Модельні і фізичні одиниці виміру

Величина	Модельна одиниця	Одиниця СГС	СГС / модель
Довжина	піксель (p)	см	1 / 1
Час	такт (t)	с	1 / 50
Маса	одиниця маси (m)	г	1 / 1
Сила	$m \cdot p / t^2$	г·см/с ²	2500 / 1
Енергія	$m \cdot p^2 / t^2$	г·см ² /с ²	2500 / 1
Тиск	одиниця тиску (m/t^2)	атм	1 / 0.15
Температура	градус	градус	1 / 1

Поршні

Поршнями зуться рухливі стінки посудин. Поршні здебільшого застосовуються для моделювання перетворення теплової енергії в механічну і навпаки. Завдяки їм можна відтворювати цикли теплових і холодильних машин, як оборотні, так і не оборотні. При застосуванні поршнів рухлива стінка прямокутної посудини знаходиться між двох вертикальних стінок і рухається у вертикальному напрямку (рис. 4а).

На поршень може діяти зовнішня сила, направлена зверху до низу. Для спостерігача це виглядає, як навантаження на поршень, яке здійснює певна маса в постійному полі тяжіння. Зовнішня сила врівноважується тиском газу під поршнем, або не врівноважується, і тоді поршень рухається.

Рух поршня є виключно наслідком ударів частинок газу і сили тяжіння, що діє на його вантаж. Частинки газу, які стикаються з поршнем, передають йому імпульс, завдяки чому в кожний момент модельного часу поршень зсувається на певну відстань.

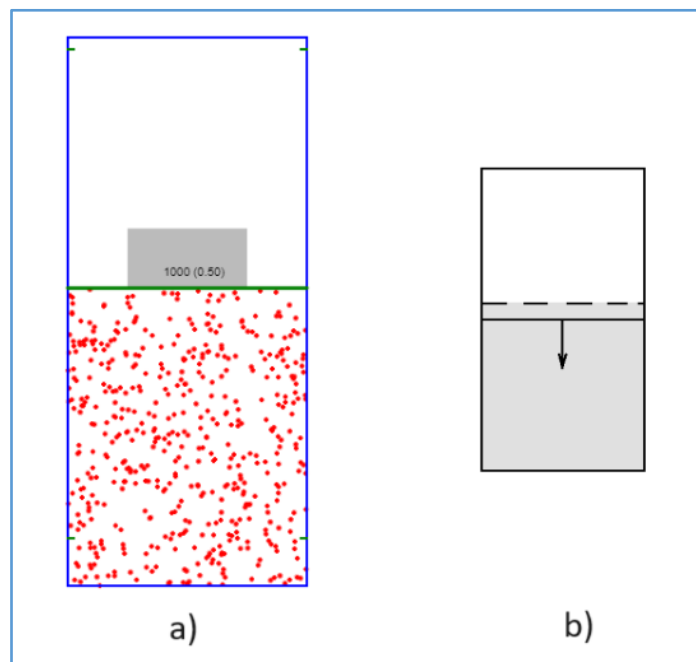


Рис. 4. Посудина із поршнем

Зсув поршнів відбувається вже після того, як всі частинки газу отримали своє нове положення, і якщо в просторі, який долає поршень, знаходяться частинки, вони опиняться поза поршнем (рис. 4б). Щоб цього не відбувалося, такі частинки примусово зсуваються по вертикалі на довжину шляху поршня. Це не впливає на поведінку моделі, тому що швидкість частинок не змінюється, а розмір зсуву незначний.

Оскільки така модель не передбачає розсіювання енергії, будь які відхилення від рівноважного стану, як то нагрівання чи охолодження частини газу, рухи поршня і таке інше, призводять до того, що процес врівноваження завжди носить коливальний характер. Щоб запобігти надмірних коливань поршню, можна обмежити швидкість руху поршня. Таке обмеження призводить до втрати енергії і може бути скасовано, якщо такі коливання не завадять ходу дослідження.

З поршнями також пов'язані вимірювання на кшталт тих, що виконують вимірювальні пристрої, прямокутником вимірювання вважається частина посудини під поршнем. На додачу до тиску і температури враховується робота, яку виконує газ проти сили тяжіння і втрати енергії внаслідок обмеження швидкості, якщо таке є.

Межі застосування моделі

Областю застосування моделі будуть такі комбінації її параметрів за яких виконується основний газовий закон і все, що з нього витікає. Наприклад, вимірний тиск газу під поршнем повинен дорівнювати тиску, який створює зовнішня сила, у випадку коли поршень не рухається. Або фактичний розподіл швидкостей частинок у врівноваженій системі повинен наближатися до розподілу Максвелла-Больцмана.

Область застосування можна уявити як частину простору параметрів моделі, в якій модель поводить себе коректно. Важко точно окреслити цю частину, тому що до параметрів моделі, окрім очевидних, тиску, об'єму, температури, відносяться розмір частинок, їх маса, і загальна кількість. Тому було б зручно скористатися якимось одним показником, який би свідчив, що модель знаходиться в допустимих межах і на дані вимірювань можна

покладатися.

Вочевидь такий показник має бути мірою наближення моделі до ідеального газу і це може бути середня довжина вільного пробігу частинок, відносний простір, який займають частинки в посудині, відношення зіткнень частинок в одиницю часу до їх кількості тощо. Зупинимось на середній довжині вільного пробігу, як на найбільш застосованій. Середню довжину вільного пробігу можна оцінити, якщо поділити сумарний шлях, пройдений частинками за один такт модельного часу, на подвоєну кількість зіткнень між частинками за той же самий час (одне зіткнення перериває траєкторії двох частинок).

Довжину шляху, пройденого однією частинкою за один такт модельного часу, можна вимірити безпосередньо на підставі положення частинки в два суміжних моменти часу. Це вірно тому, що зіткнення частинок реєструються лише наприкінці їх траєкторій, а всі інші можливості зіткнень ігноруються (рис. 2).

Частинки, які зазнали зіткнення зі стінками, з підрахунку виключаються. Це не суттєво впливає на результат, бо він не залежить від точної кількості частинок, які прийняли участь в обчисленні середнього.

З дослідів визначено, що модель поводить себе коректно, якщо середня довжина вільного пробігу не менше ніж 50 – 100 модельних одиниць довжини. Два числа тут наведені тому, що межа залежить від температури газу, для низьких температур вона приблизно 50, для високих 100.

Суть дослідів полягала в тому, що посудина із поршнем заповнювалася газом за певної температури та навантаження на поршень. Далі вимірювався тиск газу під поршнем і порівнювався із тиском, який створювало зовнішнє навантаження на поршень. Якщо показники зовнішнього та внутрішнього тиску співпадали, поведінка моделі вважалася коректною. В серії вимірів температура газу и навантаження на поршень зберігалися постійними, змінювався лише розмір частинок.

Дані двох серій вимірів наведені у таблиці 4. Зона параметрів, в якій поведінка моделі була коректною, забарвлена сірим. Загальні параметри обох серій вимірювань такі: кількість частинок 5000, маса частинки 1, об'єм посудини під поршнем від 40000 до 70000 кв. одиниць в залежності від положення поршня. Кожен вимір проводився після врівноваження системи, яке відбувалося на протязі 1000 тактів дискретного часу.

Таблиця 4

Область коректності моделі

Радіус частинок	T=100, P=0.25		T=1000, P=2.5	
	Вимірний тиск	Середня довжина пробігу	Вимірний тиск	Середня довжина пробігу
0.0625	0.250	1050	2.50	5532
0.125	0.250	230	2.50	1011
0.25	0.250	58	2.50	260
0.5	0.245	15	2.49	65
1.0	0.223	4	2.45	17
2.0	0.137	1	2.30	5

Пояснити поведінку моделі в зоні некоректності можна тим, що коли щільність частинок велика, їх повна внутрішня енергія складається із кінетичної енергії руху і потенційної енергії відштовхування завдяки стиканням частинок між собою. Тиск газу, що врівноважує зовнішній тиск на поршень, залежить від повної енергії газу, а вимірюється лише кінетична енергія. Звідси виникає розбіжність, яка тим більше, чим більше доля потенційної енергії в повній.

Програмна реалізація

Комп'ютерна симуляція реалізована у вигляді односторінкового веб-застосунку [10]. Користувачу надається конструктор лабораторних установок і панель команд. На рис. 5 наведено віконний інтерфейс програми. Користувач може створити власну установку, або завантажити одну із вже готових.

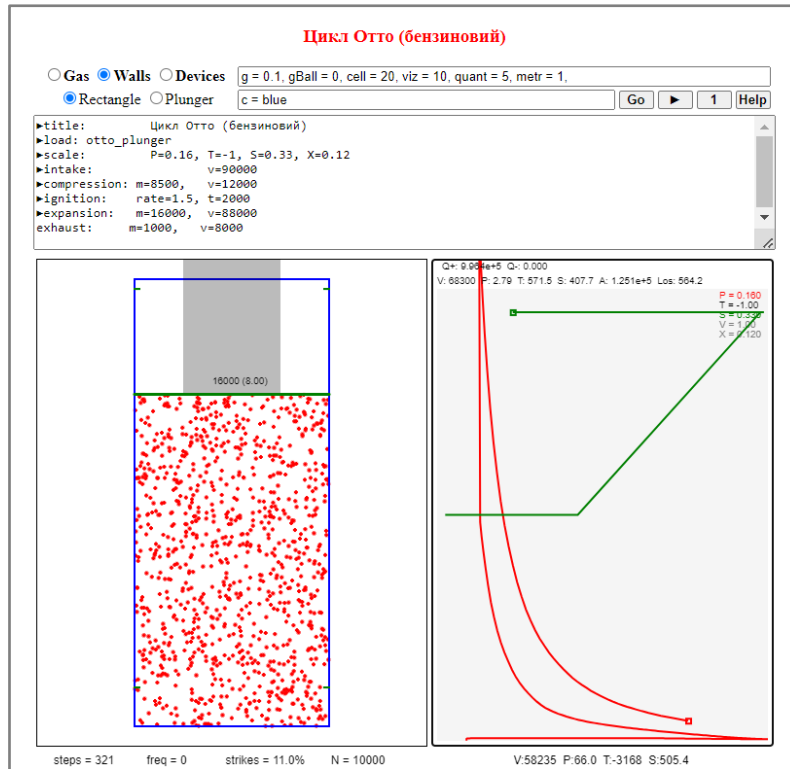


Рис. 5. Комп'ютерна симуляція термодинамічних процесів

Установка створюється шляхом додавання до неї різних об'єктів. Конструктор установок працює в трьох режимах: Gas, Walls і Devices. В кожному режимі можна додавати і змінювати відповідні об'єкти. Властивості нового об'єкта задаються в полі вводу у вигляді пар «ключ = значення». Тип нового об'єкта обирається радіокнопками.

В панель команд користувач додає одну або декілька команд, які стосуються моделювання термодинамічних процесів. Команди виконуються інтерпретатором, і в той же час в лівій частині екрану демонструється поведінка лабораторної установки, а в правій частині числові і графічні характеристики процесів, що відбуваються.

Висновки

В роботі запропонована комп'ютерна модель ідеального газу, яка доволі точно відтворює його поведінку і може бути використана для імітації лабораторних досліджень при вивченні фізики та термодинаміки. Модель була досліджена на предмет її коректності, були окреслені межі її застосування.

На базі моделі була розроблена комп'ютерна програма, яка дозволяє імітувати лабораторні установки і проводити досліди з їх допомогою. Досліди можуть охоплювати широкий спектр явищ, таких як дифузія, броунівський рух, різні види теплоємності газу, розподіл швидкостей частинок, перетворення теплової енергії в механічну, різноманітні термодинамічні цикли тощо.

Хоча комп'ютерна імітація не є повноцінною заміною справжніх лабораторних досліджень, вона гнучка і здатна відтворити набагато більше експериментів, ніж будь-яка лабораторія пересічної школи або вишу. Комп'ютерна модель сприяє розвитку

дослідницьких навиків студентів і дозволяє їм пройти шляхом, подібним до того, яким колись пройшли першовідкривачі.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Чернишов Ю. К. Методи обчислення статистичних параметрів в подійному моделюванні / Ю. К. Чернишов. – Харків: Фактор, 2014. – 248 с.
2. Matthias Müller. Particle-Based Fluid Simulation for Interactive Application / Matthias Müller, David Charypar, Markus Gross // SCA '03: Proceeding sof the 2003 ACM SIGGRAPH / Euro graphics symposium on Computer animation July 2003. – P. 154 – 159.
3. Interactive Simulations. [Electronic resource] – Access mode : <https://phet.colorado.edu>.
4. Shivam Garg N-Body Simulation of Ideal and Non-Ideal Gas [Electronic resource] – Access mode : <https://students.iiserkol.ac.in/~sg12ms102/ADG.pdf>.
5. Aiello-Nicosia M. L. Computer simulation of a two-dimensional ideal gas: a simple molecular dynamics method for teaching purposes / M. L. Aiello-Nicosia, R. M. Sperandeo-Mineo // European Journal of Physics. – Jul 1, 1985. – Volume 6 (3). – P. 148 – 153. DOI 10.1088/0143-0807/6/3/005.
6. Bonomo R. P. The evolution of the speed distribution for a two dimensional ideal gas; A computer simulation / R. P. Bonomo, F. Riggi // American Journal of Physics. – Jan 1, 1984. – Volume 52 (1). – P. 54 – 55. DOI 10.1119/1.13809.
7. Allen M. P. Computer Simulation of Liquids / M. P. Allen, D. J. Tildesley. – Oxford University Press, 1991. – 400 p.
8. Фелінський Г. С. Загальна фізика : Підручник / Г. С. Фелінський. – Київ : Каравела, 2020. – 601 с.
9. Maxwell J. C. Illustrations of the dynamical theory of gases. Part I. On the motions and collisions of perfectly elastic pheres / J. C. Maxwell // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 4th Series. – 1860. – Vol. 19. – P. 19 – 32.
10. Веб-застосунок для симуляції термодинамічних процесів [Електронний ресурс] – Режим доступу:<https://tss.co.ua/gas/>.

Стаття надійшла до редакції 06.05.2024.

Стаття пройшла рецензування 27.05.2024.

Бондарев Володимир Михайлович – канд. техн. наук, доцент, професор кафедри програмного забезпечення.

Черепанова Юлія Юрїївна – старший викладач кафедри програмного забезпечення, e-mail: yulia.cherapanova@nure.ua.

Харківський національний університет радіоелектроніки.