Оглавление

[Моделирование движения молекул идеального 2D газа в замкнутом пространстве под давлением 2](#_Toc134644940)

[1. Поиск столкновений. 2](#_Toc134644941)

[2. Поиск скоростей атомов после их соударения. 4](#_Toc134644942)

[3. Удар атома об стенку 5](#_Toc134644943)

[4. Новые направления атомов после удара 5](#_Toc134644944)

[5. Давление. 6](#_Toc134644945)

[6. Температура газа. 6](#_Toc134644946)

[7. Столкновение атома с движущимся поршнем 6](#_Toc134644947)

[8. Изменение температуры с движением поршня 7](#_Toc134644948)

To Do list

1. ? Опубликовать драфт (до конца недели)
2. Данные (более реальные)
3. Графики
4. Набросать слайды (< 15)
5. Цели и выводы
6. Наполнение слайдов
7. Тренировки

### 1.План доклада

* 1. Цель: проверить некоторые газовые законы с помощью модели 2D газа, используя Ньютоновскую механику.
     1. Закон идеального газа PV = ηRT P(V)
        1. T(V) -- работа
        2. P(V) -- эксперимент / закон идеального газа
     2. ~~P = nkT~~
  2. Модель: герметичная куб с атомами газа внутри:
     1. Газ: одноатомный, идеальный (все атомы имеют одинаковые радиус и массу). Атомы не могут вращаться, все удары между атомами абсолютно упругие
     2. Сосуд: так как моделируем двухмерный газ, стенку по оси z считаем равной 1[м]. Все удары шариков абсолютно упругие.
  3. Особенности вычислительной модели
     1. Использование каскадно-непрерывного расчёта. Вместо самого банального нахождения столкновений по времени мы решили использовать метод предугадывания места и времени столкновения атомов.
     2. Использование floating point ~~в питоне~~. Из-за ~~не идеального перевода чисел после запятой присутствуют~~ ограниченной точности вычислений с плавающей точкой при решении уравнений возникают погрешности.
     3. Для визуализации движения атомов был использован PyGame.
     4. Для “эталонных” вычислений мы отключали визуализацию (как самую медленную часть программы) и моделировали большое кол-во шаров
  4. Ожидаемые результаты. Если все расчёты были произведены нами верно, то характеристики газа, посчитанные с помощью Ньютоновой механики должны совпадать с теми, которые могут быть получены из газовых законах, а именно:
     1. Температура. берем из PV = ηRT
     2. Давление. P = nkT

1. Физические задачи
   1. Кинематика (как летают атомы)

Удары абсолютно упругие

* + 1. Поиск столкновений атомов
       1. Объяснить особенность нашего способа (предугадывание)
       2. Условие, изображение задачи (можно упомянуть наличие 2 корней)
       3. Показать выбранную для решения с.о, использовали теорему Пифагора
       4. Объяснить условия корней разных знаков
    2. Поиск скоростей атомов после соударения
       1. Дано: время, место столкновения и скорости
       2. Показать с.о (через центры 2 атомов)
       3. Решить с ЗСЭ и ЗСИ
       4. Выбираем нужный корень
       5. Это обмен скоростями
    3. Удар атома об стену
       1. Удар абсолютно упругий, угол падения равен углу отражения
    4. Направление вектора скорости после удара
       1. Показать выбранную систему отсчета
       2. Сказать и показать, что мы использовали матрицу
    5. Удар атома о движущийся поршень
       1. Угол падения равен углу отражения
       2. Объяснить почему
  1. Некоторые характеристики газа
     1. Давление
        1. P = F/S
        2. Из 2 з.н формула импульса силы
        3. P для 1 атома
        4. Обобщаем, добавляя
     2. Температура
        1. Сказать, что это просто
        2. Упомянуть что это будет полезно при движении поршня
  2. Полученные результаты:
     1. Код
     2. Х-ки из программы
     3. Графики
        1. T от совершенной поршнем работы (они будут почти совпадать)
        2. P (давление газа) от V (объем коробки)
  3. Выводы:
     1. Ньютоновской механикой можно рассчитывать параметры газовых законов (получилось, совпало с ожиданиями)
     2. Модель несовершенная. Из-за использования floating point атомы могут немного залетать в стенки/друг друга.
     3. …

# Моделирование движения молекул идеального 2D газа в замкнутом пространстве под давлением

Цель работы: с помощью знаний по физике запрограммировать движение молекул двумерного одноатомного идеального газа в коробке сначала без изменения давления, а потом - с постепенным его увеличением. Исследование зависимости температуры газа от давления.

Идеальный газ - газ, в котором молекулы не взаимодействуют между собой на расстоянии, а лишь при соударении друг с другом. Также, в нашей работе эти соударения являются абсолютно упругими. Также масса всех атомов этого газа одинакова.

Абсолютно упругое соударение - столкновение двух атомов (в нашем случае), при котором механическая энергия атомов не переходит в другие виды энергии. При таком ударе кинетическая энергия полностью переходит в потенциальную энергию упругой деформации. Простыми словами - тепло не выделяется, вся энергия остаётся в нашей системе из двух сталкивающихся атомов.

Общая картина: в герметичной коробке имеется N атомов идеального газа. Массы этих атомов одинаковы, отличаются лишь скорости.

Для начала нужно смоделировать их движение без всякого поршня, давящего на них. Для этого решим 2 кинематические задачи:

# Поиск столкновений.

Даны позиции и начальные скорости двух атомов. Нужно выяснить, столкнутся ли они,   
и если так, узнать время до их столкновения.



Момент столкновения - время, когда расстояние между центрами двух этих атомов стало равно их диаметру.

Сложность: при достаточно большой U1 (скорость первого) возможно два варианта столкновения

этих атомов, то есть два корня.



Решение: перейдем в с.о, где телом отсчета будет выступать атом 1. Его скорость(U1’) будет равна 0. Тогда найдём скорость атома 2 в этой с.о.



Измененные скорости обозначим как U2’ и U1’ . U1’ = 0 и U2’ = U2-U1. Dx и Dy - расстояние между центрами этих атомов по осям x и y соответственно. По теореме Пифагора получаем, что:

Соответственно:

В этом случае могут получаться корни разных знаков

1. 2 положительных корня. Мы берем меньший из них, говорящий нам о более раннем “столкновении”
2. Положительный и отрицательный корень. Особый случай, когда один атом изначально по ошибке появился В другом. В таком случае нужно просто перегенерировать появление атомов.
3. 2 отрицательных корня. Столкновение произошло в прошлом. Просто пропускаем этот случай.

(Тут возникает одно из возможных проявлений ошибки округления float -- при значении около 0 знак решения может оказаться не тем. Можно отметить это место.)

# Поиск скоростей атомов после их соударения.

Известно место, время столкновения и скорости. Напоминаю, что удар атомов друг об друга абсолютно упругий.

При столкновении атомов надо перейти в систему отсчета, где ось X проходит через их центры, а ось Y – касательная для обоих. Тогда из законов сохранения энергии и импульса следует:

*U1y = U2y = Uy*

*V1y = V2y = Vy*

*U1x – U2x = V2x – V1x*

*U1x2 + V1x2 = U2x2 + V2x2*

*U1x2 - U2x2 = V2x2 – V1x2*

*(U1x2 - U2x2)( U1x2 - U2x2) = (V2x2 – V1x2)( V2x2 + V1x2)*

Здесь 2 корня, от ненужного (скорости до столкновения) можно избавиться

*(U1x2 - U2x2) = (V2x2 + V1x2)*

*V2x = U1x – V1x + U1x – V2x + V1x = 2U1x – V2x*

Значит:

*U1x = V2x* ; *V1x = U2x*

Это обмен скоростями.



1. Удар атома об стенку.

Удар а.у. (абсолютно упругий, вся энергия остается в системе шара и стены), поэтому угол, под которым атом влетает в стенку равен углу, под которым он отлетает от нее.



# Новые направления атомов после удара

Для того, чтобы верно рассчитывать новые скорости и направления движений атомов нам нужно переходить в с.о для 2 сталкивающихся атомов. Для этого мы должны использовать матричный способ преобразования

Матрица преобразования координат в систему столкновения (x через центры).

dx – расстояние между атомами по оси X.

dy – расстояние между атомами по оси Y.

Угол φ = atan(dx / dy).

Vx и Vy – скорость атома по осям X и Y.

Тогда при переходе в систему отсчета столкновения:

Ux = Vx \* cos(φ) + Vy \* (- sin(φ))

Uy = Vx \* sin(φ) + Vy \* cos(φ)

После расчета новых скоростей нужно перейти в “абсолютную” систему отсчета:

Ux = Vx \* cos(φ) + Vy \* sin(φ)

Uy = Vx \* (-sin(φ)) + Vy \* cos(φ)

(синусы в формулах меняют знак).

Таким образом программа определяет вектор скорости после столкновения.

Источник: <https://compgraphics.info/2D/matrix_rotate.php>

после решения задачек на движение, нужно рассчитать некоторые х-ки газа.

1. Давление.

Сначала рассчитаем давление на 1 стенку, чтобы было наглядно. Давление рассчитывается по формуле (сила на площадь). В качестве площади берем одну из стенок.

F = m\*a по 2 з.н, где . Нетрудно увидеть формулу импульса силы, который равен за определенное время.

Итого для 1 шара. Применив эту формулу для большего кол-ва атомов, она будет выглядеть так:

1. Температура газа.

(n - кол во атомов) Этот раздел программы должен проверять уравнение идеального газа при помощи ЗСЭ.

Т.к наши атомы обладают скоростью, и при движении поршня она будет расти, t это просто средняя () всей коробки ().

1. Столкновение атома с движущимся поршнем

Берем с.о , в которой V поршня = 0. Тогда шарик летит на стенку со скоростью (летят друг на друга). Удар абсолютно упругий. После столкновения атом не изменяет свою скорость по модулю, а лишь по направлению. Скорость поршня остается неизменна. Поэтому, скорость атома после удара равна . Поэтому

V + Vс

V - Vc

# Изменение температуры с движением поршня

Из-за столкновений со стеной изменяется его кинетическая энергия. Сказано ранее, что t равна средней по коробке. Из-за увеличения скорости средняя энергия газа будет расти, соответственно вырастет и температура