Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Радиофизический факультет

Отчет по практическому заданию  
по курсу «Методы математического моделирования»

Выполнил студент:  
Вахулин А.А.  
Гр. 428

**Задание 7.** Создайте модель идеального газа из упругих шариков в сосуде заданного объема, рассчитайте давление и температуру газа. Поместите в сосуд броуновскую частицу (частицу произвольной формы, имеющую существенно большие размеры и массу, чем молекулы газа) и изучите ее движение. Постройте зависимости скорости и координаты частицы от времени, а также оцените точность интегрирования в зависимости от величины шага интегрирования.

**Модель и алгоритм**

Часть 1.

Т.к. по условию задачи газ идеальный, его давление можно найти из основного уравнения МКТ:

Где:

n=N/V – концентрация молекул в сосуде;

- масса 1й молекулы;

- среднеквадратичная скорость молекул;

Зная среднеквадратичную скорость молекул, можем выразить температуру газа:

Где - постоянная Больцмана;

В качестве исследуемого газа для простоты вычислений возьмём водород. Размеры сосуда установим таким образом, чтобы одно из измерений совпадало с размерами молекулы водорода. Таким образом, движение молекул в сосуде будет происходить в одной плоскости.

Размеры сосуда: 0,2нм \* 9нм \* 9нм, что на экране соответствует квадратной рамке с размерами 450\*450 единиц.  
Таким образом, объём сосуда

Масса молекулы водорода .

Скорости движения молекул приближены к 1000м/c. В модели скорости молекул колеблются в районе 1.

Часть 2.

Радиус броуновской частицы возьмём в 2 раза больше радиуса молекулы водорода.

Масса броуновской частицы будет в 5 раз больше массы молекулы водорода (т.е. ). Таким образом, формула для расчёта изменения скоростей молекул и броуновской частицы при соударениях (учитывая, что ) выглядит так:

Здесь - проекция скорости молекулы; - проекция скорости броуновской частицы.

Так как в задании не указано, зависимость какой координаты от времени нужно изучить, начертим графики x(t), y(t) и y(x)

Скорость частицы найдём как

Точность модели будем сверять по средней кинетической энергии. Для броуновской частицы её кинетическая энергия должна равняться средней энергии теплового движения молекул среды, т.е.:

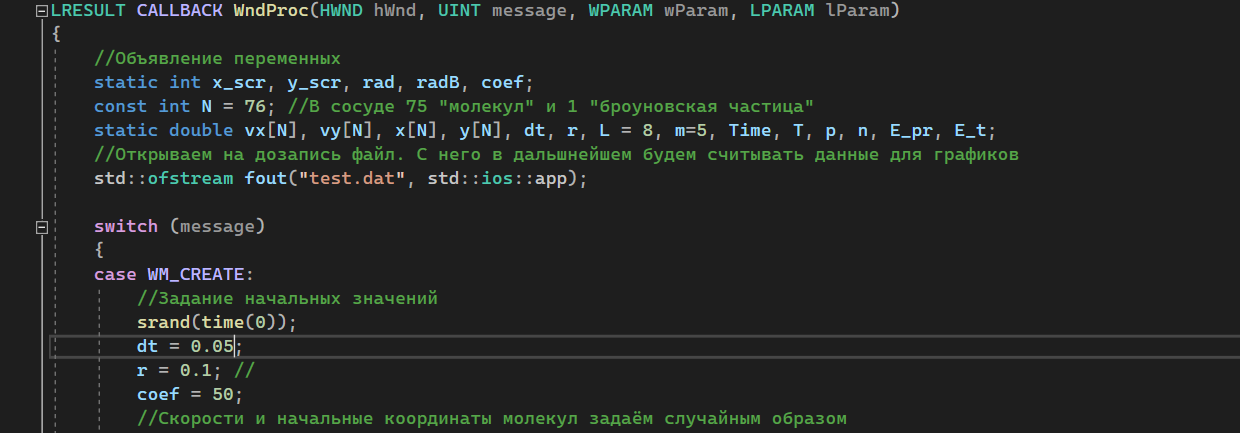
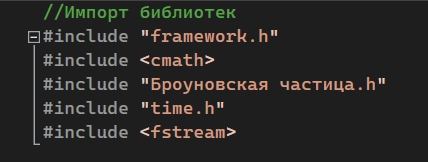
**Код на языке C++:**

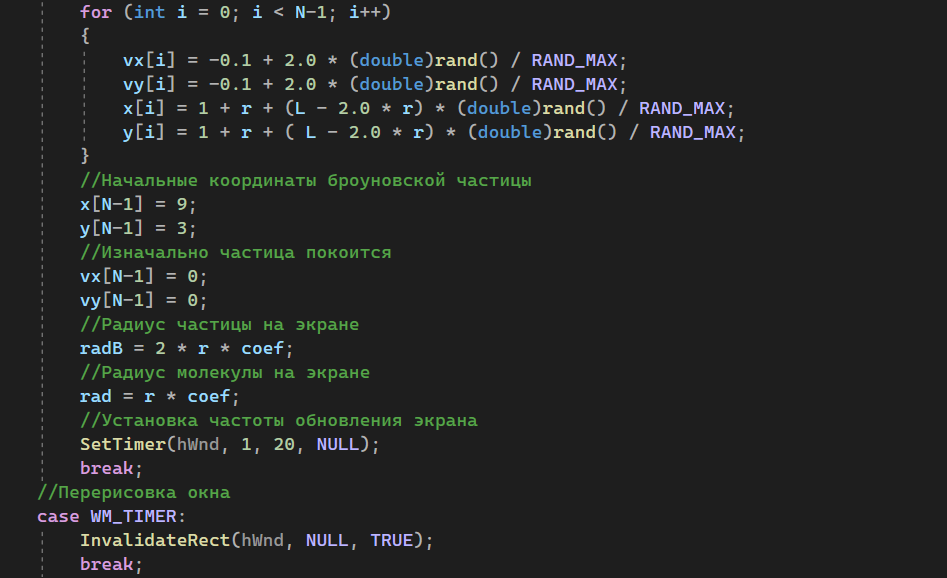
Будем использовать один и тот же код для обеих частей задания, т.к. наличие броуновской частицы даёт пренебрежимо малый вклад в хаотическое движение молекул газа.

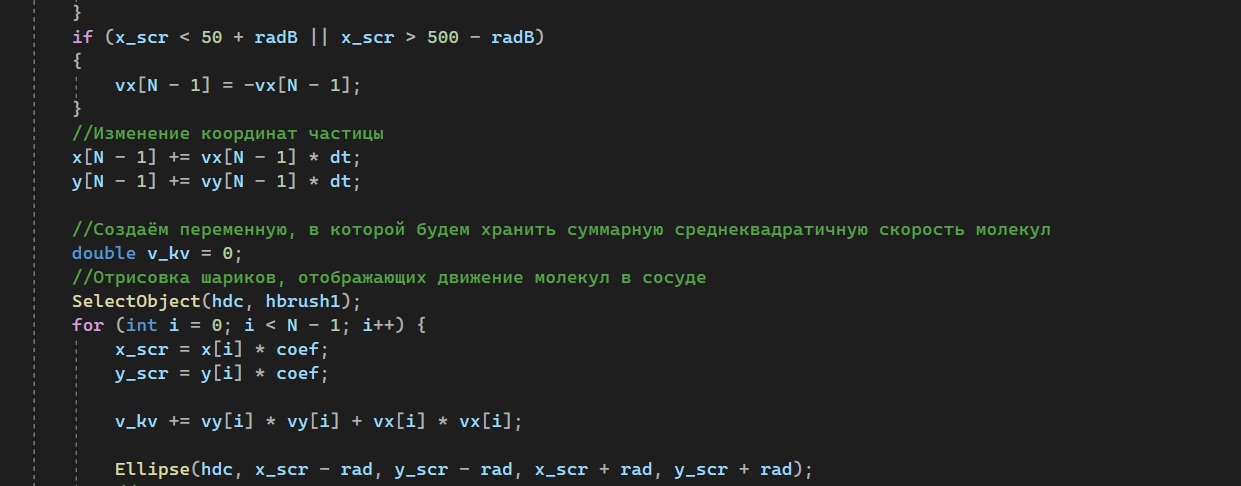
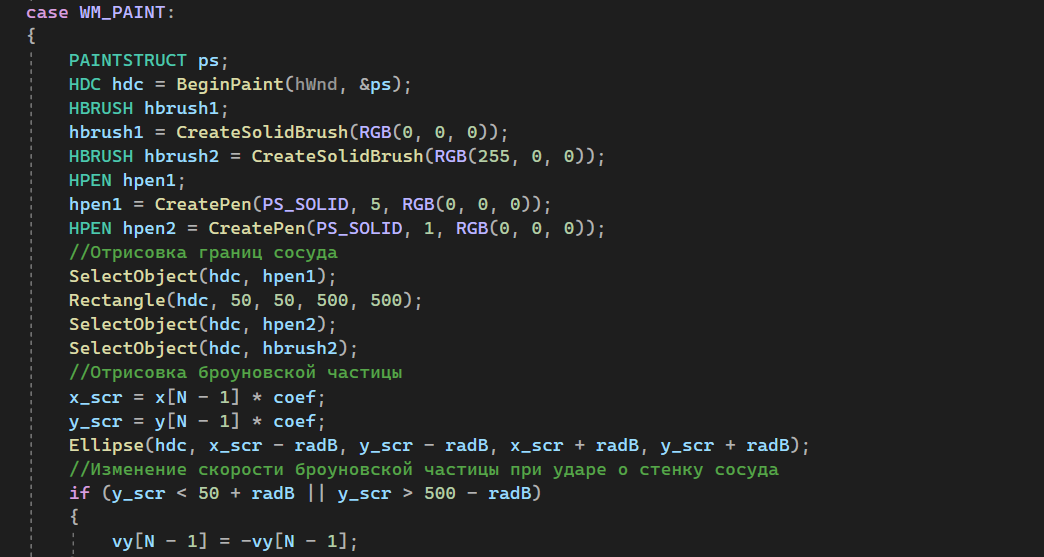
Графики будем строить с помощью программы Gnuplot.

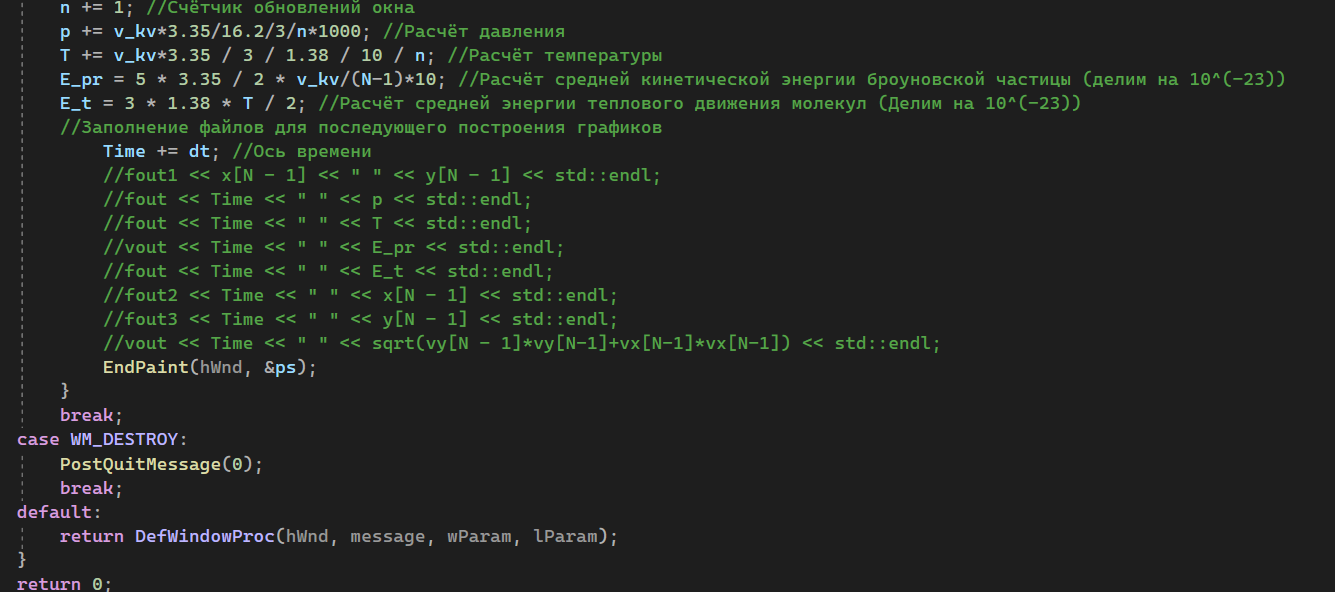
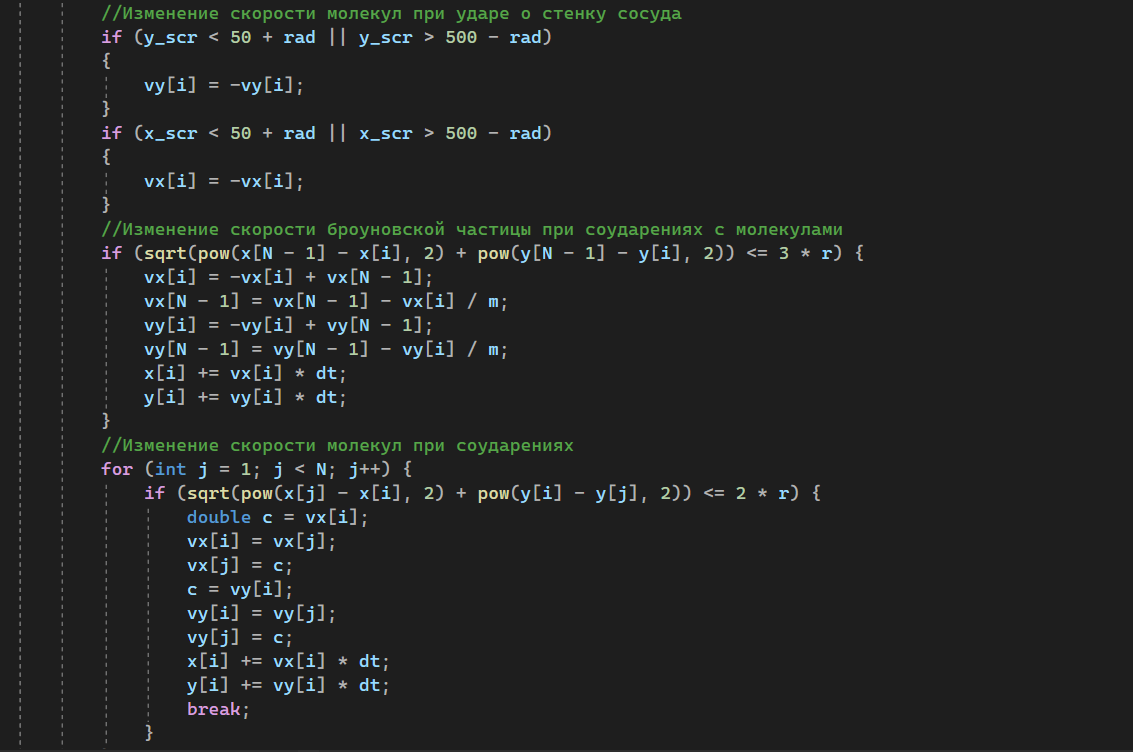
Основа программы — шаблон «Стандартное приложение Windows», поэтому в данном отчёте будут отражены только те части кода, которые непосредственно были изменены относительно исходного шаблона.

Ссылка на полный код: <https://github.com/AlexSol4R/-.git>



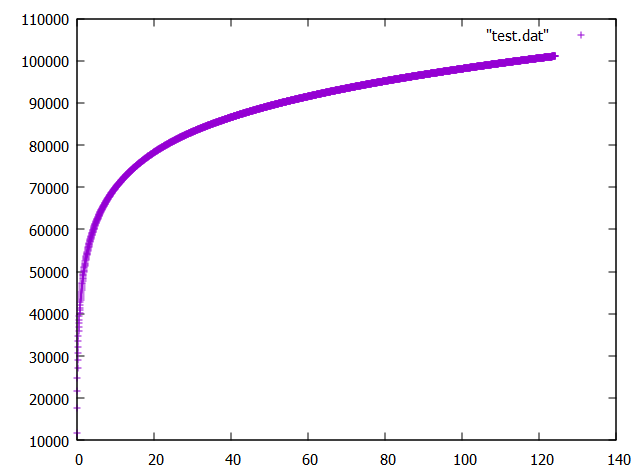


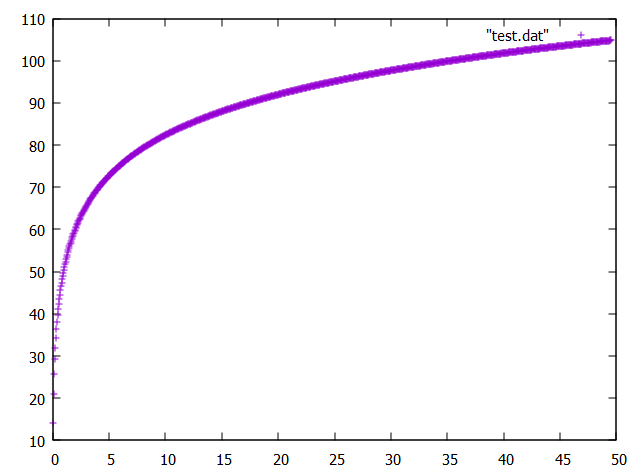


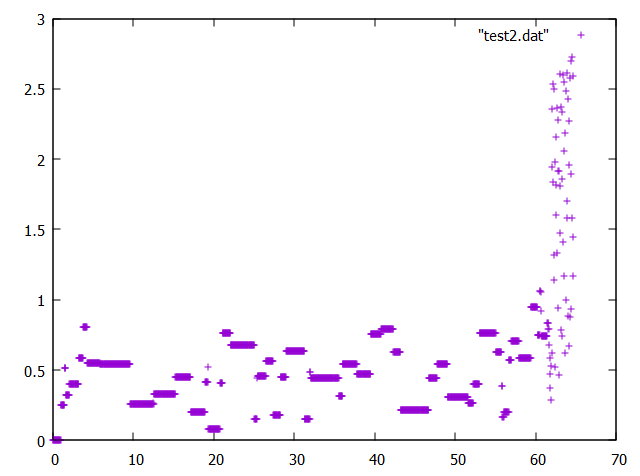
****

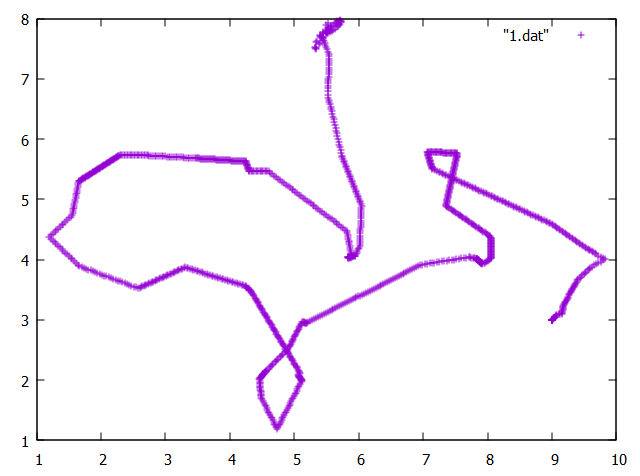
**Результат:**

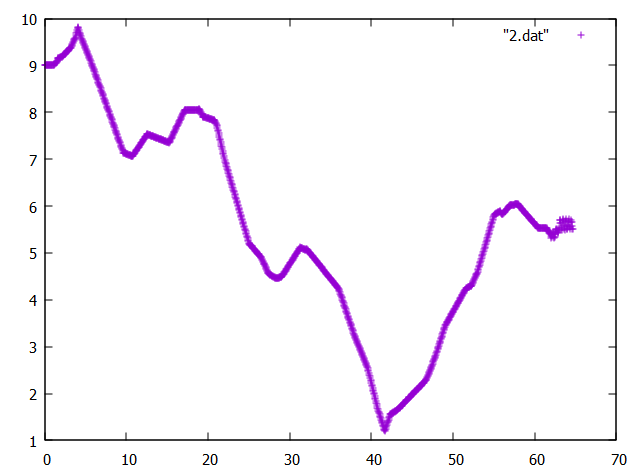
Графики зависимости среднего значения давления и температуры газа от времени.

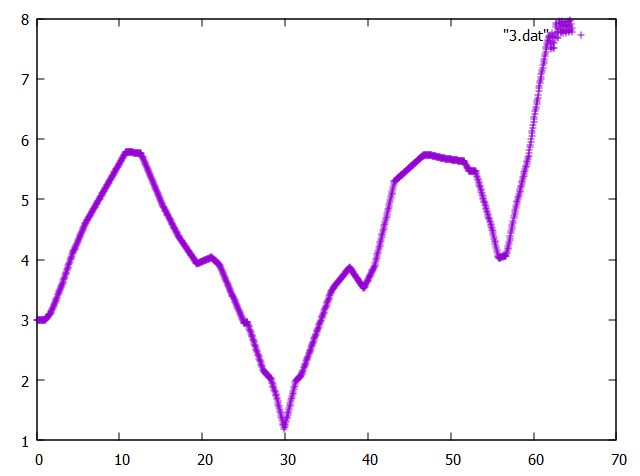
Давление газа при заданных параметрах:

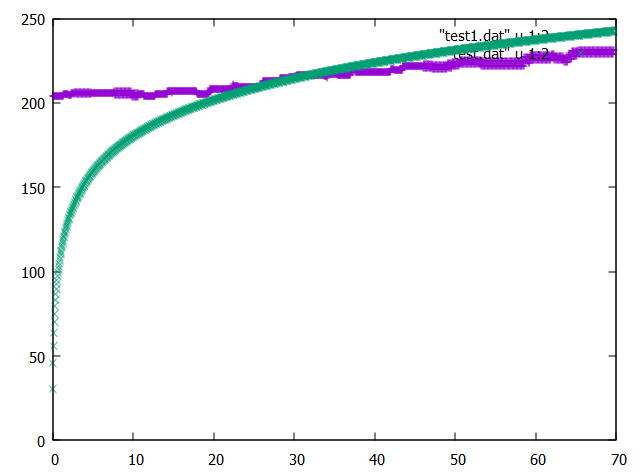
Температура газа при заданных параметрах:

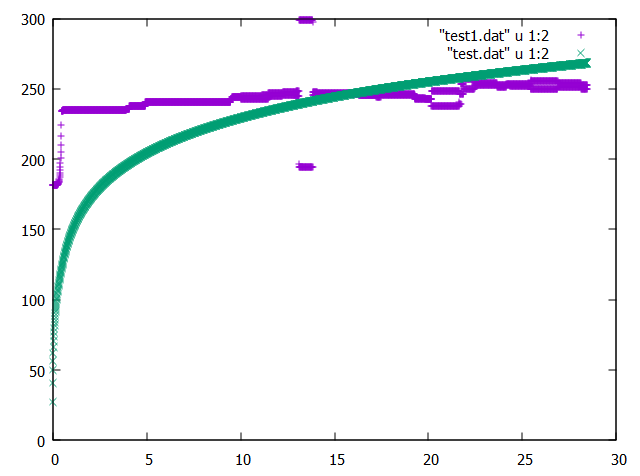
График зависимости полной скорости от времени (точки в конце графика — результат бага)

Траектория движения броуновской частицы

График зависимости Х-координаты от времени

График зависимости У-координаты от времени

График зависимости средней кинетической энергии от времени   
(зелёный — теория, тепловое движение; синий — практика, кинетическая энергия)

Аналогичный график, но с меньшим шагом интегрирования