



”Проверка симуляции трёхмерного идеального газа измерением давления при разных условиях, симуляция химического синапса”

Вопрос по выбору
Физика Термодинамика 2 семестр
Студент 1 курса ФБМФ МФТИ
Миленин Тимофей
Группа Б06-002

Введение.

Моделирование реального или идеального газа, проверка модели и её изучение является одной из классических задач современной термодинамики и молекулярной физики. Построение таких моделей имеет большое значение в метеорологии, при конструировании паровых двигателей и двигателей внутреннего сгорания, а также в биоинженерии - при изучении различных биологических процессов и их имитации. Правда, в основном в биологических системах, например, в цитоплазме клетки, в синаптической щели нейронов, в кровеносных сосудах, всё происходит в жидкости, в растворе, и растворены там бывают отдельные атомы, такие как, например, ионы металлов, концентрация которых влияет на мембранный потенциал нервных клеток, а также крупные тяжёлые молекулы сложной формы (соли, углеводы, аминокислоты, белки) и даже органоиды, причём компонентов в растворе много - тысячи различных ионов, белков, органоидов, поэтому построение термодинамических и кинетических моделей биологических систем, очевидно, на порядки сложнее обычной симуляции газа.

В данной работе представлена модель одноатомного газа из круглых шариков, взаимодействующих со стенками и друг с другом, и эта модель проверяется на соответствие теории - уравнению состояния идеального газа.

Также есть "бонусная" симуляция подобия химического синапса нейронов мозга, где в качестве нейромедиатора выступает одноатомный газ, достаточное давление которого активирует постсинаптическую мембрану и тем самым проводит сигнал через синапс.

Вывод основных формул.

Вывод формулы давления идеального газа: запишем уравнение Менделеева-Клапейрона:

$$PV = \nu RT \quad (1)$$

Вычтем из объёма V величину, равную произведению объёма молекулы газа на количество таких молекул, эта величина является поправкой "b" в уравнении газа Ван-дер-Ваальса, учитывающей недоступный объём для молекулы газа из-за ненулевого объёма молекул и взаимодействия молекул друг с другом. Поправка "a" в этом же уравнении, учитывающая притяжение между молекулами газа, не учитывается, так как в этой модели молекулы не притягиваются друг к другу.

Представим число молей ν как отношение числа молекул газа к числу Авогадро, выразим давление через остальные величины и получим итоговую формулу:

$$P = \frac{NRT}{N_A(V - V_{mol}N)} \quad (2)$$

Здесь V_{mol} - объём одной молекулы газа, N - число молекул газа, N_A - число Авогадро. Эта формула берёт известные величины и подсчитывает давление газа автоматически, не взаимодействуя с симуляцией и не учитывая механические столкновения газа со стенками. Будем называть её первой основной формулой, или теоретической формулой.

Вывод формулы давления газа на дно резервуара по столкновениям в единицу времени: средний импульс каждой молекулы вычисляется как произведение массы молекулы на её среднюю скорость:

$$p = m_{mol}v \quad (3)$$

Пусть при столкновении о стенку компонента импульса молекулы, параллельная стенке, остаётся неизменной, а компонента, перпендикулярная стенке, изменяется на противоположную. Тогда суммарное изменение импульса газа за n столкновений со стенкой:

$$\Delta p = 2m_{mol}v \sin(\alpha)n \quad (4)$$

Где угол столкновения α - угол между стенкой и направлением скорости молекулы. Будем считать, что средний угол столкновения равен $\frac{\pi}{4}$, тогда $\sin \alpha = \frac{\sqrt{2}}{2}$, и тогда:

$$\Delta p = \sqrt{2}m_{mol}vn \quad (5)$$

По второму закону Ньютона $\Delta p = Ft$, $F = PS$, отсюда:

$$P = \frac{\Delta p}{St} = \frac{\sqrt{2}m_{mol}vn}{St} \quad (6)$$

Так как $m_{mol} = \frac{\mu}{N_A}$, а средняя скорость молекул $v = \sqrt{\frac{8RT}{\pi\mu}}$, то окончательно получаем:

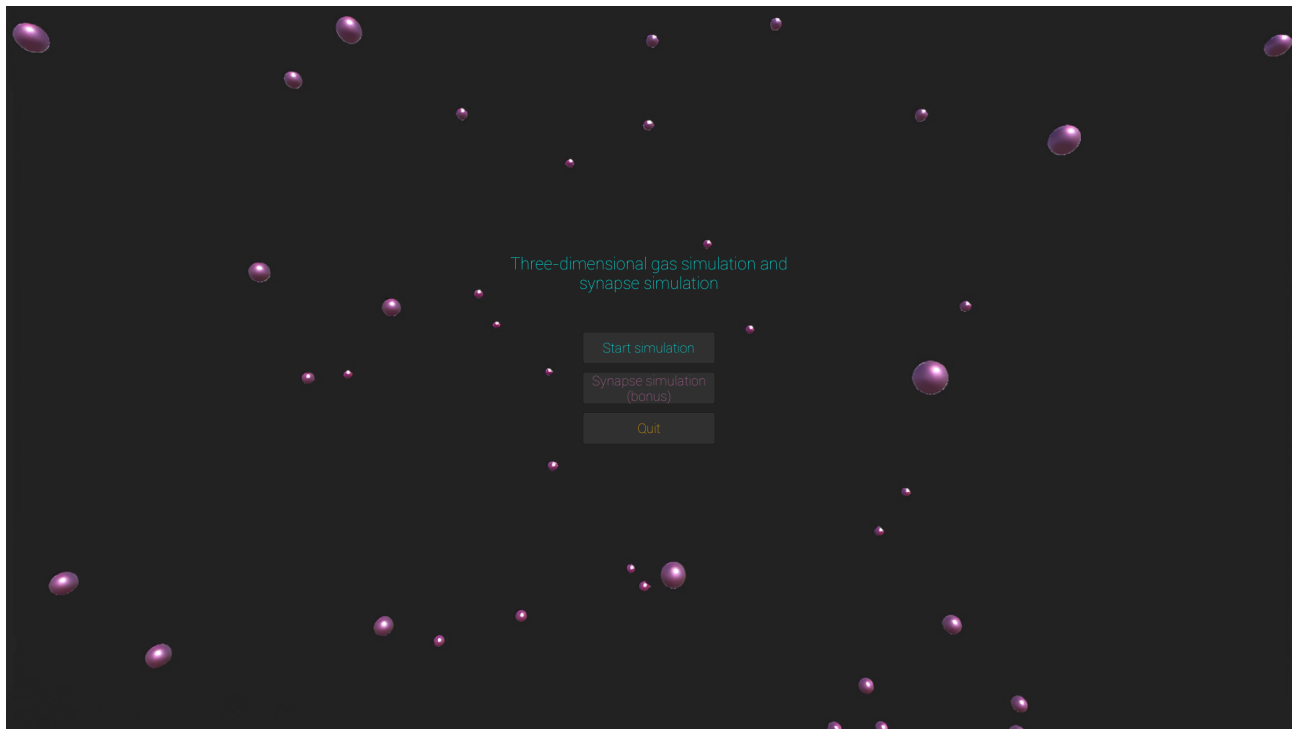
$$P = \sqrt{\frac{16\mu RT}{\pi}} \frac{n}{N_A St} \quad (7)$$

Здесь μ - молярная масса газа, S - площадь стенки, о которую ударяются молекулы, t - время, за которое производится измерение числа ударов об эту стенку. Будем называть эту формулу второй основной, или экспериментальной. Эта формула учитывает число столкновений молекул газа о стенку в единицу времени, то есть анализирует непосредственно поведение молекул газа для вычисления давления, в отличие от теоретической формулы.

Эти две основные формулы будем использовать для анализа модели газа - если при разных условиях в симуляции значения давлений, определённых по этим двум формулам, будут сходиться, то симуляция будет признана достоверной - соответствующей уравнению состояния идеального газа.

Описание симуляции.

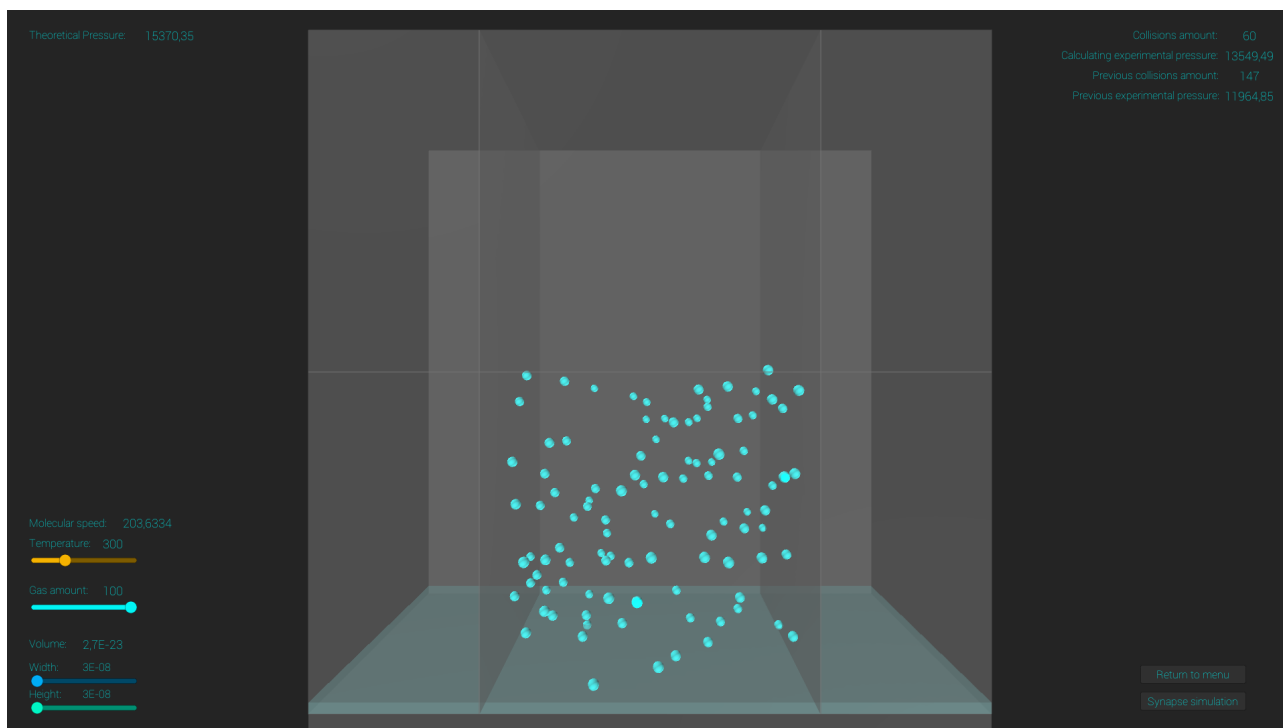
Модель газа выполнена на игровом движке Unity 3D с использованием языка программирования C#, также для молекул газа используется готовый модуль физики столкновений тел из Unity 3D, который был частично доработан для корректного взаимодействия молекул газа со стенками резервуара. Управление симуляцией полностью осуществляется мышкой.



Меню симуляции

Меню: В меню есть три кнопки:

- **"Start simulation"** - начать основную симуляцию газа в резервуаре.
- **"Synapse simulation"** - начать бонусную симуляцию подобия синаптической щели с газом в качестве нейромедиатора.
- **"Quit"** - выйти из программы.



Симуляция газа

Симуляция резервуара с газом представляет из себя резервуар, заполненный молекулами газа. Некоторые параметры этой системы являются константами, а некоторые можно менять ползунками.

Молекулы газа представляют собой **голубые** идеальные шарики диаметром $d = 1$ [нм], их молярная масса $\mu \approx 153$ [г/моль], они могут сталкиваться друг с другом и со стенками резервуара, столкновения молекул с дном резервуара, подсвеченным **голубым** цветом, высчитываются, и по их числу определяется давление газа. При столкновении дно мигает. Все частицы летят с одинаковой постоянной скоростью, вычисляемой по формуле средней скорости молекул газа $v = \sqrt{\frac{8RT}{\pi\mu}}$, например, при температуре $T=300$ [К] скорость молекул $v \approx 204$ [м/с], поэтому кинетическая энергия каждой молекулы остаётся постоянной при постоянной температуре, и при столкновениях происходит изменение направления движения молекул, но не происходит передача энергии и изменение их скорости. Поэтому, к сожалению, в этой симуляции не получится проверить статистические распределения, например, распределение Максвелла молекул по скоростям или распределение Больцмана по их энергии, однако можно легко проверить, соответствует ли эта симуляция теоретической модели идеального газа из шариков, способных отталкиваться друг от друга. Этим мы и будем заниматься.

Вот какие величины и параметры используются в этой модели:

Константы:

- Газовая постоянная $R \approx 8.31$ [Дж]/[моль*К];
- Число Авогадро $N_A \approx 6.02E23$ [молекул] ($E23$ - это 10 в 23 степени);
- Диаметр молекул газа $d = 1$ [нм];
- Молярная масса газа $\mu \approx 153$ [г/моль];
- Время подсчёта числа столкновений $t=10$ [с];

На самом деле эти константы записаны в программе немного точнее, но здесь они

не приводятся до этой точности.

Параметры системы, изменяемые ползунками:

- Температуру газа T можно менять от 1 до 1000 [K] с помощью **жёлтого** ползунка;
- Количество молекул газа в резервуаре можно менять от 0 до 100 [молекул] с помощью **голубого** ползунка;
- Резервуар имеет форму параллелепипеда с максимальной шириной и высотой $l = 60$ [нм], и постоянной глубиной $l = 30$ [нм]. Есть возможность менять ширину и высоту резервуара от 30 до 60 [нм] с помощью **синего** и **зелёного** ползунков соответственно, при этом программа постоянно пересчитывает объём резервуара и площадь его дна;

Вычисляемые величины:

· Число столкновений с дном резервуара n [раз], выводится в правом верхнем углу, подписано как **"Collisions Amount"** (выводится вычисляемое и предыдущее вычисленное n);

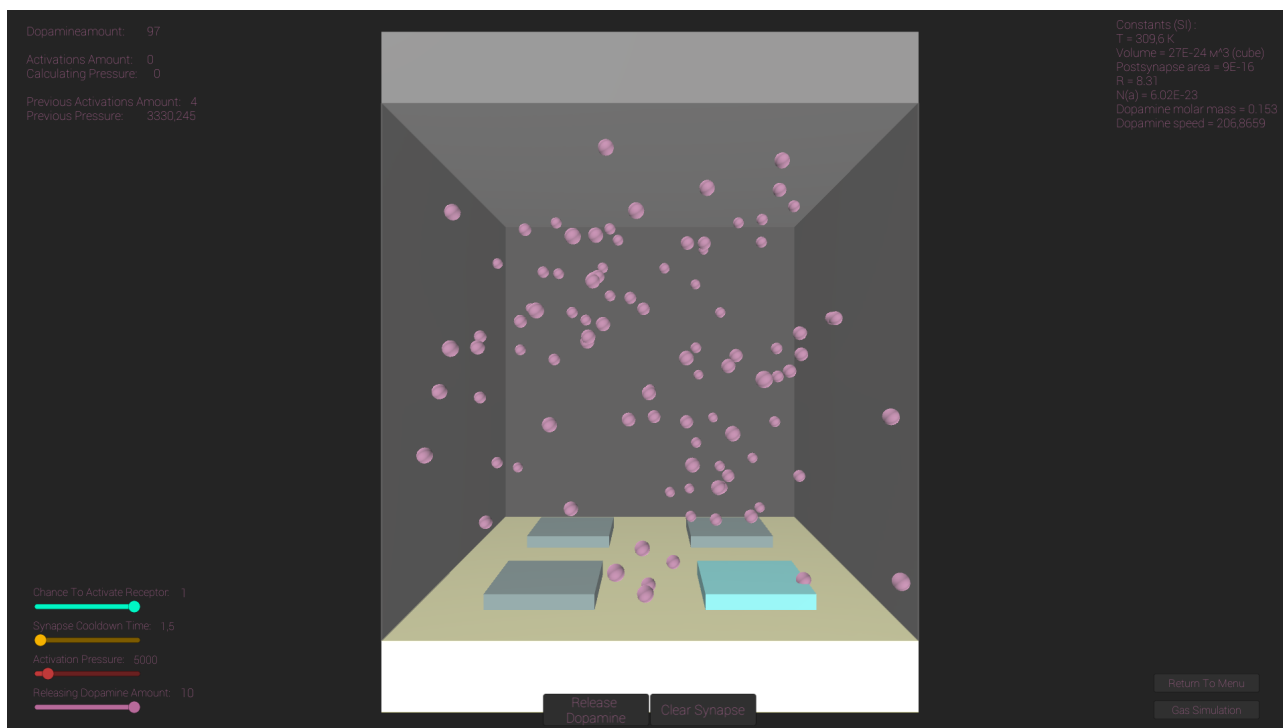
· Скорость молекул газа v [м/с], выводится слева над температурой и подписано как **"Molecular speed"**;

На самом деле, в симуляции скорость молекул газа на 10 порядков меньше, чем их реальная скорость, и составляет, например, 20,4 [нм/с] вместо 204 [м/с] при температуре 300 [K]. При этом каждое столкновение молекулы со стенкой засчитывается за $1E10$ столкновений для компенсации уменьшенной скорости. Это сделано для того, чтобы игровой движок корректно справился с симуляцией, а также для наглядности, чтобы можно было увидеть движение частиц газа с разумными скоростями;

· В верхнем левом углу выводится теоретическое давление, подписанное как **"Theoretical Pressure"**;

· В правом верхнем углу выводится значение давления, подсчитанное по экспериментальной формуле, подписанное как **"Experimental Pressure"** (выводится вычисляемое и предыдущее вычисленное давление).

Все величины в газовой симуляции и симуляции синапса выводятся в СИ.



Симуляция синапса

Симуляция синаптической щели (синапса): бонусная симуляция, которая носит скорее качественный характер и отличается от реальной синаптической щели тем, что нейромедиатор в ней является газом, а не раствором в жидкости. Также не соблюдены пропорции и размеры реальной синаптической щели, многие другие величины отличаются от реальных в силу сложности их оценки. В том числе тяжело оценить реальное пороговое давление нейромедиатора на постсинаптическую мембрану, необходимое для её активации, так как нейромедиатор, выпускаемый из пресинаптической мембраны, должен провзаимодействовать с белковыми рецепторами на постсинаптической мембране, после чего должны открыться каналы на мембране, пропускающие различные ионы, например, ионы натрия, и эти ионы должны повысить мембранный потенциал (разность электрических зарядов с двух сторон мембраны) примерно с -70 до -50 [мВ]. После этого возникнет потенциал действия - волна возбуждения в виде кратковременного изменения мембранного потенциала на положительный на постсинаптической мембране, передающаяся мембране дендрита, к телу следующего нейрона. После этого новый потенциал действия не может возникнуть некоторое время - это называется рефрактерным периодом. Поэтому синапс - это очень сложная система, и её точная модель, не говоря уже о создании искусственного синапса, требует огромных затрат времени и ресурсов, а также дальнейшего развития вычислительной техники.

Не случайно молярная масса молекул газа в газовой симуляции была равна 153 [г/моль], а их диаметр был равен 1 [нм], так как в точности такую молярную массу и похожий размер имеет молекула дофамина - одного из основных гормонов и нейромедиаторов у животных и человека, одна из функций которого - чувство предвосхищения результата. Дофамина явно много выработалось у многих студентов и у меня, как, однако, и многих других менее приятных гормонов и нейромедиаторов, при разработке этого вопроса по выбору в течение двух недель на протяжении всего семестра...

Синаптическая щель представляет собой резервуар кубической формы постоян-

ных размеров, длина ребра куба $l=30$ [нм], соответственно площадь постсинаптической мембраны равна $S=900$ [нм²].

Дофамин в симуляции представляет собой **сиреневый** шарик, почти полностью идентичный молекуле газа по характеристикам и поведению, только он выпускается не в случайном направлении, а вниз, к постсинаптической мембране.

В нашей модели есть пресинаптическая мембрана (потолок резервуара), из которой вылетают молекулы дофамина, при этом мембрана кратковременно подсвечивается **жёлтым** цветом. Всего можно выпустить до 100 молекул дофамина. Каждую секунду случайная молекула исчезает (как будто её расщепляет фермент, или она захватывается обратно в пресинаптическую мембрану). Можно выпускать от 1 до 10 молекул за один раз (как будто дофамин выпускается из везикул разного размера) или убрать сразу все молекулы дофамина кнопками в нижней центральной части экрана. Количество выпускаемых за один раз молекул регулируется **сиреневым** ползунком.

Столкновение с постсинаптической мембраной (дно резервуара) засчитывается, только если молекула дофамина попадёт на один из четырёх **серых** параллелепипедов на мембране размером 7 на 7 на 1 [нм], выполняющих роль белковых рецепторов, и этот рецептор активируется. Рецептор подсветится **голубым** на короткое время при его активации. Шанс активации рецептора при попадании на него молекулы дофамина регулируется **зелёным** ползунком. Если давление молекул дофамина на постсинаптическую мембрану превышает пороговое, то она кратковременно подсвечивается жёлтым - это означает, что на ней возник потенциал действия, и информационный сигнал прошёл через синапс к телу следующего нейрона. В данной модели не высчитывается реальное пороговое давление на постсинаптическую мембрану, поэтому можно самостоятельно установить его в диапазоне от 1 до 25000 [Па] с помощью **красного** ползунка.

После возникновения потенциала действия наступает рефрактерный период, в течение которого сигнал через синапс не сможет пройти ни при каком давлении дофамина, изменить рефрактерный период в диапазоне от 1,5 до 5 секунд можно с помощью **жёлтого** ползунка.

Справа сверху на экране записаны значения используемых констант, а слева сверху - количество молекул дофамина, а также количество активаций рецепторов и подсчитываемое давление, и их значение, подсчитанное за предыдущую секунду.

Формула подсчёта давления на постсинаптическую щель почти идентична экспериментальной формуле для подсчёта давления в газовой симуляции. Давление на постсинаптическую мембрану определяется количеством активаций рецепторов равно за время $t=1$ [с], при этом число столкновений дофамина с рецепторами только с установленной вероятностью приводит к его активации, поэтому вместо числа столкновений n в формуле будет стоять число активаций рецепторов a (не забываем, что a , так же как и n , домножается на $1E10$).

Несмотря на то, что доступная для взаимодействия дофамина с мембраной площадь - это площадь рецепторов, за S взята площадь постсинаптической мембраны $S=900$ [нм²]. Получается, что формула считает давление на мембрану, только удары засчитываются с заданной вероятностью и не по всей поверхности мембраны.

Также стоит сказать, что в модели синапса задана постоянная температура $T=309,6$ [K] или $T=36,6$ [°C], равная средней температуре тела человека.

Формула имеет вид:

$$P = \sqrt{\frac{16\mu RT}{\pi}} \frac{a}{N_A S t} \quad (8)$$

Давление заново пересчитывается каждую секунду, и, если оно выше порогового, а также прошёл рефрактерный период постсинаптической мембраны, то сигнал пройдёт через синапс.

Исследование газовой симуляции.

Цель исследования - проверить, что газовая модель соответствует теории, а именно теоретической формуле - уравнению состояния идеального газа с поправкой на объём молекул.

Погрешности газовой модели: основная погрешность в ходе экспериментов - случайные разбросы измеренного давления и числа столкновений в ходе снятия показаний. Эти разбросы вычислены как случайные погрешности. Также вычислены угловые коэффициенты графиков и их погрешности (вычисления приводятся ниже).

Время $t=10$ [с] высчитывается с небольшой погрешностью, так как используемая для его вычисления Функция Update каждый раз срабатывает с немного разной скоростью, поэтому при одном и том же числе столкновений о стенку значение давления высчитывается с разбросом примерно в 0,1 - 1 [Па], разброс пропорционален величине давления, он не является очень значительным при давлениях в симуляции порядка нескольких тысяч [Па].

Значения всех констант записаны с точностью до определённого знака, компьютер производит вычисления тоже с точностью до определённого знака после запятой. Кроме того, компьютер выполняет операции не мгновенно, а за некоторое время, которое каждый раз может быть разным для одной и той же операции, порядок выполнения операций также может меняться. Из-за всего этого все результаты вычислений компьютера немного искажаются, и вносится дополнительная погрешность.

Измеренное по экспериментальной формуле давление почти всегда примерно на 10-20% ниже соответствующего теоретического давления. Это может быть связано с тем, что компьютер не всегда засчитывает столкновения молекул с дном резервуара. Ещё одна возможная причина - молекулы могут не мгновенно оттолкнуться от стенок или случайно не оттолкнуться от стенок и вылететь за них (особенно при высоких температурах), тогда на молекула принудительно будет помещена внутрь резервуара, однако это означает, что потенциально доступный для молекул объём немного больше объёма резервуара, и это может занижить показания давления. Возможно, имеет место несовершенство теории и выведенных формул - средний угол столкновения о стенку, возможно, отличается от 45 градусов, из-за чего в экспериментальной формуле может поменяться численный коэффициент. Возможно, теоретическое уравнение также неидеально описывает эту модель газа.

Эксперименты: проведём четыре эксперимента в газовой симуляции, в каждом эксперименте будем проверять сходжение теоретического и экспериментального давлений, а также зависимости давления и числа столкновений от различных параметров системы:

·(п.1-3) Измерение зависимости давления P и числа столкновений о стенку n от температуры T при постоянных объёме V и количестве молекул N . Для большей показательности результатов эксперимента и исследования большего числа комбинаций

параметров проведём измерения при трёх различных количествах молекул. Согласно теоретической формуле, зависимость P от T - пропорциональная, а в экспериментальной формуле стоит \sqrt{T} , поэтому можно проверить предположение, что существует пропорциональная зависимость n от \sqrt{T} .

·(п.4-6) Измерение зависимости давления P от количества молекул N при постоянных температуре T и объёме V . По теоретической формуле эта зависимость - пропорциональная. Проверим также, что число столкновений о стенку n пропорционально зависит от N . Проведём измерения при трёх различных температурах.

·(п.7-9) Измерение зависимости давления P и числа столкновений о стенку n от ширины резервуара W , или площади дна S , или объёма резервуара V (что принципиально то же самое, так как $W \sim S \sim V$ - пропорциональны в нашей модели) при постоянной температуре T , постоянном числе молекул N и постоянной высоте резервуара H . Теоретически, при изменении площади S должно обратнопропорционально изменяться давление (если не учитывать небольшую поправку в теоретической формуле - вычитание из общего объёма объёма молекул $V_{mol}N$). Если сопоставить две основные формулы, то можно предположить, что число ударов о дно не зависит от его площади в доступном в симуляции диапазоне площади, так как обратная пропорциональность P и V в теоретической формуле соответствует обратной пропорциональности P и S в экспериментальной формуле. Логически это можно объяснить тем, что изменение площади в доступном в симуляции диапазоне почти не влияет на вертикальную координату и движение по ней молекул. Влияние будет при очень малых площадях из-за увеличения в теоретической формуле роли поправочного слагаемого при малом объёме, в таком случае теоретическое давление должно устремиться к бесконечности. Проверим обратную пропорциональность P и S , а также независимость n от S . Будем проводить измерения при трёх различных температурах.

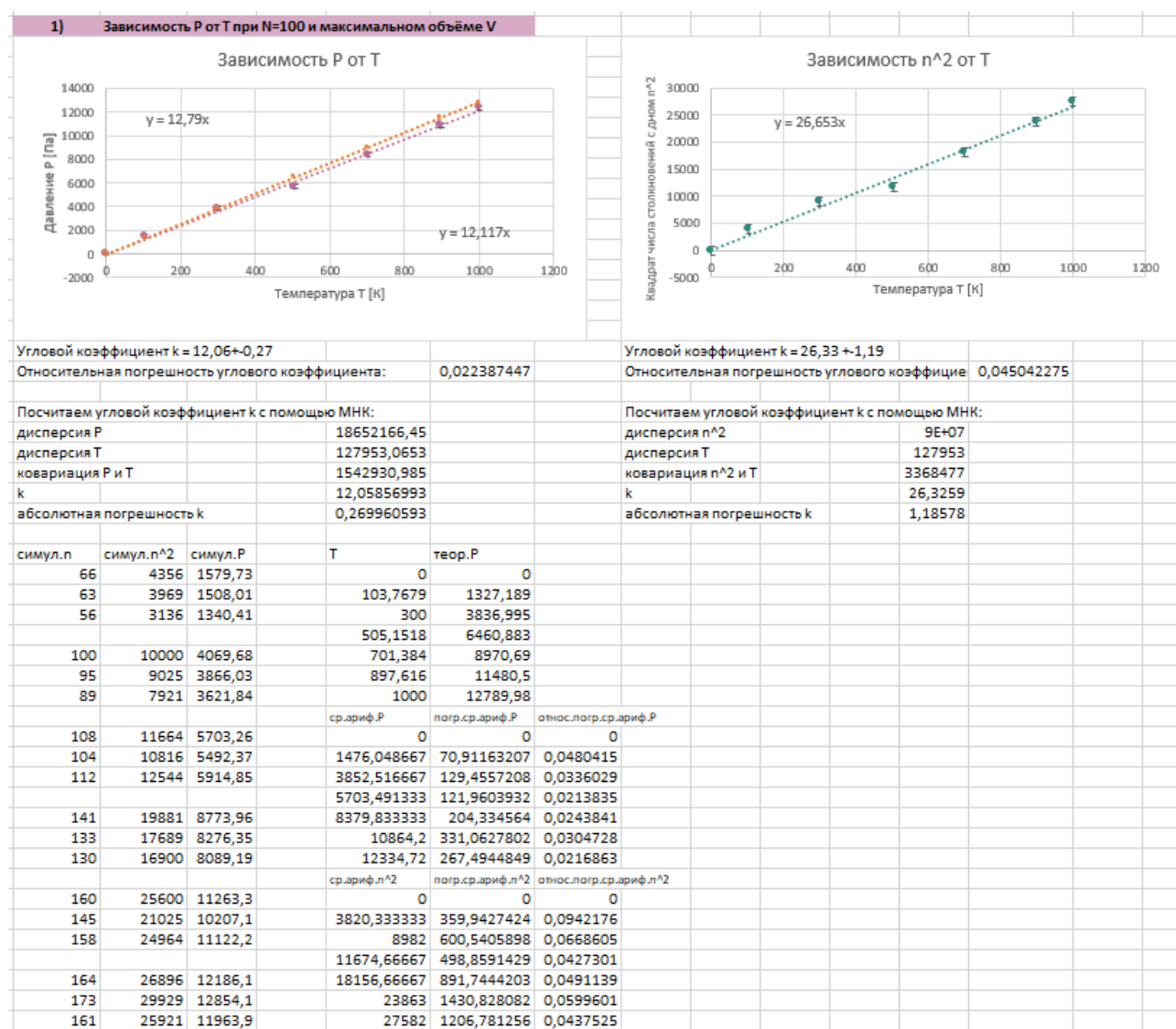
·(п.10) Измерение зависимости давления P и числа столкновений о стенку n от высоты резервуара H при постоянной площади дна S , постоянной температуре T и постоянном числе молекул N . По формулам предполагается обратная пропорциональность P и H , а также обратная пропорциональность n и H . Проверим эти предположения.

Как проводятся измерения: устанавливаются нужные параметры, потом выжидается время - около 10-20 сек, за которое состояние газа в резервуаре должно стабилизироваться, после отслеживается момент, когда счётчик столкновений обнулится, после чего в течение 10 секунд проводится измерение. Записываются показания прошедшего измерения - полученное давление и число столкновений (показания доступны 10 секунд, после чего сразу же заменяются показаниями нового измерения), после чего желательно повторить измерение при этих же параметрах несколько раз для большей точности эксперимента - в этой работе измерения проводились по 3 раза при каждой комбинации параметров, и находилось среднее арифметическое этих параметров, значения P и n на графиках - это именно средние арифметические 3 полученных значений при одних и тех же условиях. После нескольких измерений при одних условиях параметры меняются, и аналогичные измерения проводятся уже при других параметрах.

На графиках **сиреневым** цветом показана полученная измерениями экспериментальная зависимость P от какого - либо параметра системы, **зелёным** цветом - экспериментальная зависимость n от какого - либо параметра системы, **оранжевым** цветом показана теоретическая зависимость P от этого же параметра.

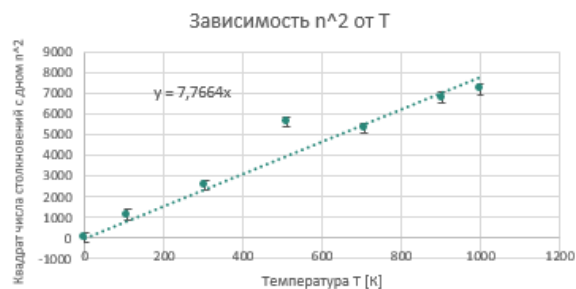
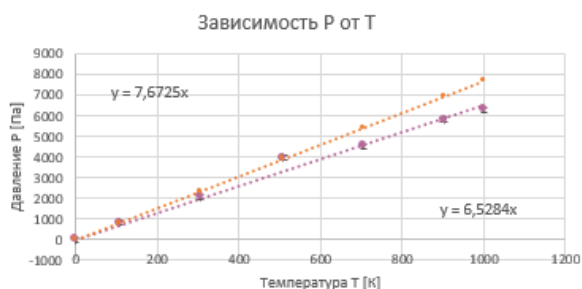
Все графики линейные. Под графиками вычисляется угловой коэффициент и его погрешность (в случае зависимости n от S вычисляется разброс значений n). Небольшое различие значений угловых коэффициентов на графике и под ним из-за того, что на графике - значение, посчитанное Excel автоматически, а под графиком - значение, посчитанное самостоятельно с помощью формул МНК.

Ещё ниже, слева, приводятся значения давления и количества столкновений, полученные в ходе эксперимента, а справа эти значения обрабатываются для того, чтобы быть представленными на графиках. Записывается среднее арифметическое трёх полученных при одних условиях значений, вычисляется его среднеквадратичная погрешность, а также относительная погрешность. Кроме того, справа записывается параметр, зависимость P и n от которого будет изображена на графиках. Также записывается теоретическое давление, соответствующее каждому значению этого параметра.



Как и предполагалось, существует пропорциональная зависимость между давлением и температурой, а также пропорциональная зависимость между квадратом числа столкновений n^2 и T .

2) Зависимость Р от Т при N=60 и максимальном объеме V



Угловой коэффициент $k = 6,28 \pm 0,30$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,047977787

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия P 5112583,308

дисперсия T 127959,5587

ковариация P и T 804213,9777

k 6,2849074

абсолютная погрешность k 0,301535946

Угловой коэффициент $k = 7,16 \pm 0,77$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,108101905

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия p^2 6934708

дисперсия T 127960

ковариация p^2 и T 915629

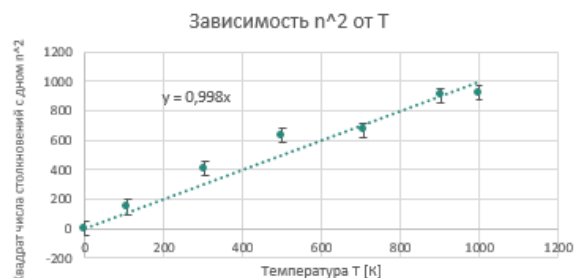
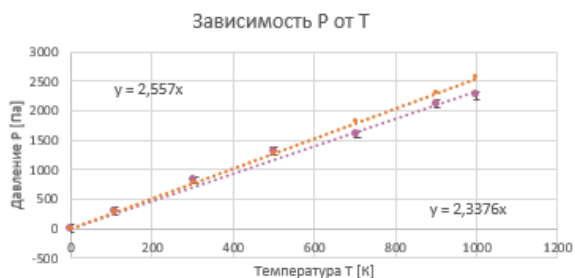
k 7,15561

абсолютная погрешность k 0,77354

симул. n	симул. p^2	симул. P	T	теор. P
33	1089	805,952	0	0
32	1024	781,512	108,0357	828,9042
35	1225	854,798	304,2679	2334,496
			509,4197	3908,524
51	2601	2090,15	705,6518	5414,115
52	2704	2131,14	901,884	6919,707
48	2304	1967,39	1000	7672,502
			ср. ариф. P	погр. ср. ариф. P
74	5476	3924,32	0	0
79	6241	4189,41	814,0873	21,54335163
71	5041	3765,16	2062,892333	49,19590036
			3959,629667	123,7344067
75	5625	4681,14	4535,579333	75,01564095
71	5041	4431,33	5810,021	169,9024816
72	5184	4494,27	6290,954	220,1927543
			ср. ариф. p^2	погр. ср. ариф. p^2
79	6241	5574,56	0	0
87	7569	6139,93	1112,666667	59,2180528
81	6561	5715,58	2536,333333	119,9115415
			5586	350,7491981
79	6241	5869,79	5283,333333	175,7501383
86	7396	6390,09	6790,333333	400,1421969
89	7921	6612,98	7186	496,2106408
				относ. погр. ср. ариф. P
				0,0264632
				0,023848
				0,031249
				0,0165394
				0,029243
				0,0350015
				относ. погр. ср. ариф. p^2
				0
				0,0532217
				0,0472775
				0,0627908
				0,033265
				0,0589282
				0,0690524

При меньшем числе молекул эти зависимости также выполняются.

3) Зависимость Р от Т при N=20 и максимальном объеме V



Угловой коэффициент $k = 2,24 \pm 0,08$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,037228651

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия Р 647556,1688

дисперсия Т 127955,9473

ковариация Р и Т 286859,5747

k 2,241861991

абсолютная погрешность k 0,083461497

Угловой коэффициент $k = 0,908 \pm 0,08$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,083413167

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия n^2 109315

дисперсия Т 127956

ковариация n^2 и Т 116264

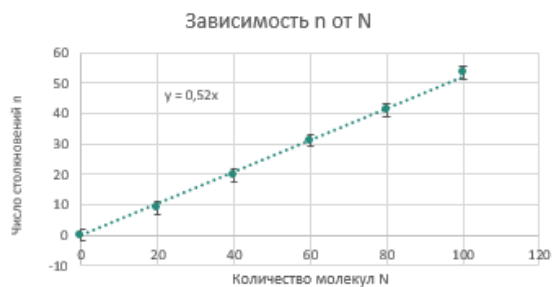
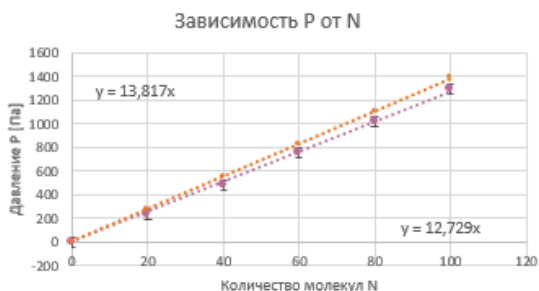
k 0,90862

абсолютная погрешность k 0,07579

симул.п	симул. n^2	симул.Р	Т	теор.Р
11	121	268,638	0	0
11	121	268,648	108,0357	276,2478
14	196	341,893	304,2679	778,0143
			500,5	1279,781
22	484	901,463	705,6518	1804,355
17	289	696,763	901,884	2306,122
21	441	860,731	1000	2557,005
			ср.ариф.Р	погр.ср.ариф.Р
28	784	1471,87	0	0
22	484	1156,47	293,0595	24,41655019
25	625	1314,17	819,6521667	62,55953553
			1314,168	91,0481375
22	484	1373,15	1601,972667	115,8232985
27	729	1685,17	2116,882667	107,8341181
28	784	1747,6	2253,754	24,77450372
			ср.ариф. n^2	погр.ср.ариф. n^2
28	784	1975,66	0	0
33	1089	2328,66	146	25
29	841	2046,33	404,6666667	59,15046727
			631	86,65448632
30	900	2229	665,6666667	92,21050796
30	900	2228,96	904,6666667	93,6239523
31	961	2303,3	920,3333333	20,33333333
				0,0220934

При ещё меньшем числе молекул эти зависимости также выполняются.

4) Зависимость Р от N при T=108,0357 К и максимальном объеме V



Угловой коэффициент $k = 13,03 \pm 0,20$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,01555

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия Р 198129,3569

дисперсия N 1166,666667

ковариация Р и N 15196,29878

k 13,02539895

абсолютная погрешность k 0,202574172

Угловой коэффициент $k = 0,53 \pm 0,01$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,0204

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия n 333,593

дисперсия N 1166,67

ковариация N и n 623,333

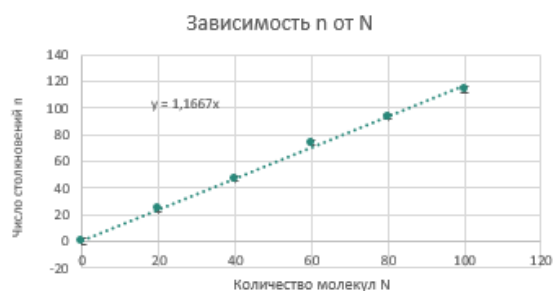
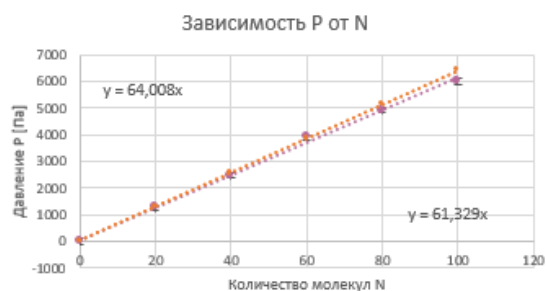
k 0,53429

абсолютная погрешность k 0,0109

симул. n	симул. Р	N	теор. Р
10	268,6536	0	0
6	146,5285	20	276,2478
11	268,635	40	552,54
		60	828,9042
18	439,5957	80	1105,313
20	488,4255	100	1381,775
21	512,891	ср. ариф. Р	погр. ср. ариф. Р
		0	0
31	757,0914	227,939	40,70526702
28	683,7916	480,304	21,54467073
34	830,3283	757,07	42,30150289
		1017,63	43,07339999
39	952,52	1294,39	88,02218573
43	1099,034	ср. ариф. л	погр. ср. ариф. л
41	1001,321	0	0
		9	1,527525232
51	1245,592	19,6667	0,881917104
61	1465,275	31	1,732050808
48	1172,306	41	1,154700538
		53,3333	3,929942041

Как и предполагалось, существует пропорциональная зависимость между давлением и числом молекул газа N, а также пропорциональная зависимость между числом ударов о стенку n и N.

5) Зависимость Р от N при T=500,5 К и максимальном объеме V



Угловой коэффициент $k = 60,44 \pm 1,43$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,0237

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия Р 4271245,167

дисперсия N 1166,666667

ковариация Р и N 70512,01722

k 60,4388719

абсолютная погрешность k 1,432659112

Угловой коэффициент $k = 1,15 \pm 0,03$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,02371

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия n 1546,39

дисперсия N 1166,67

ковариация N и n 1341,67

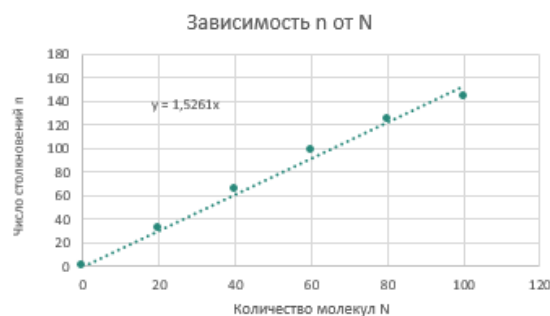
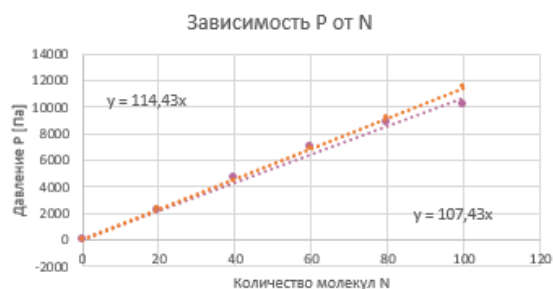
k 1,15

абсолютная погрешность k 0,02727

симул. n	симул. Р	N	теор. Р
24	1269,551	0	0
23	1209,013	20	1279,781
25	1314,117	40	2559,81
		60	3840,087
44	2312,849	80	5120,613
47	2470,711	100	6401,387
50	2628,385		
		ср. ариф. Р	погр. ср. ариф. Р
		0	0
73	3837,469	1264,23	30,45746453
72	3784,797	2470,65	91,08740266
77	4047,37	3889,88	80,20021811
		4906,13	227,7903563
89	4678,158	5992,46	160,6450279
102	5361,706		
		ср. ариф. л	погр. ср. ариф. л
		0	0
89	4678,512	24	0,577350269
		47	1,732050808
108	5676,958	74	1,527525232
116	6097,616	93,3333	4,333333333
118	6202,797		
		114	3,055050463
			0,0268

При большей температуре эти зависимости также выполняются.

6) Зависимость Р от N при T=897,616 К и максимальном объёме V



Угловой коэффициент $k = 104,15 \pm 4,60$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,0442

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия Р 12754286,41

дисперсия N 1166,666667

ковариация Р и N 121509,7789

k 104,151239

абсолютная погрешность k 4,603392699

Угловой коэффициент $k = 1,48 \pm 0,07$

Относительная погрешность углового коэффициента: 0,04417

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия n 2573,76

дисперсия N 1166,67

ковариация N и n 1726,11

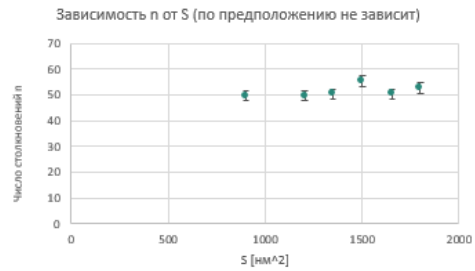
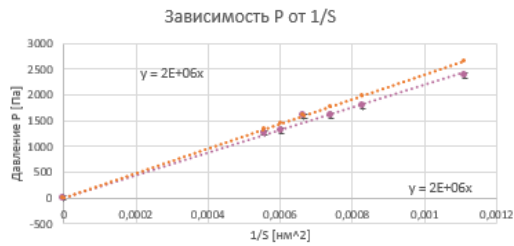
k 1,47952

абсолютная погрешность k 0,06536

симул. n	симул. Р	N	теор. Р
33	2322,939	0	0
31	2182,355	20	2295,208
30	2111,782	40	4390,862
		60	6886,961
63	4435,088	80	9183,505
66	4646,083	100	11480,5
67	4716,322	ср. ариф. Р	погр. ср. ариф. Р
		0	0
95	6687,635	2205,69	62,06255269
104	7321,279	4599,16	84,50672883
96	6759,309	6922,74	200,3402886
		8799,44	281,4247067
129	9080,608	10160,2	288,2809918
129	9081,128	ср. ариф. л	погр. ср. ариф. л
117	8236,594	0	0
		31,3333	0,881917104
152	10699,65	65,3333	1,201850425
138	9714,222	98,3333	2,848001248
143	10066,75	125	4
		144,333	4,096068576

При ещё большей температуре эти зависимости также выполняются.

7) Зависимость Р от площади дна S (меняем ширину W, глубина постоянна и равна 30 нм) при N=100, и максимальной высоте H, и T = 103,7679 К



Угловой коэффициент $k = 2137673 \pm 79432$
Относительная погрешность углового коэффициента: 0,03716

Разброс значений $k = \pm 1,84$
Отношение разброса к среднему значению: 0,0358

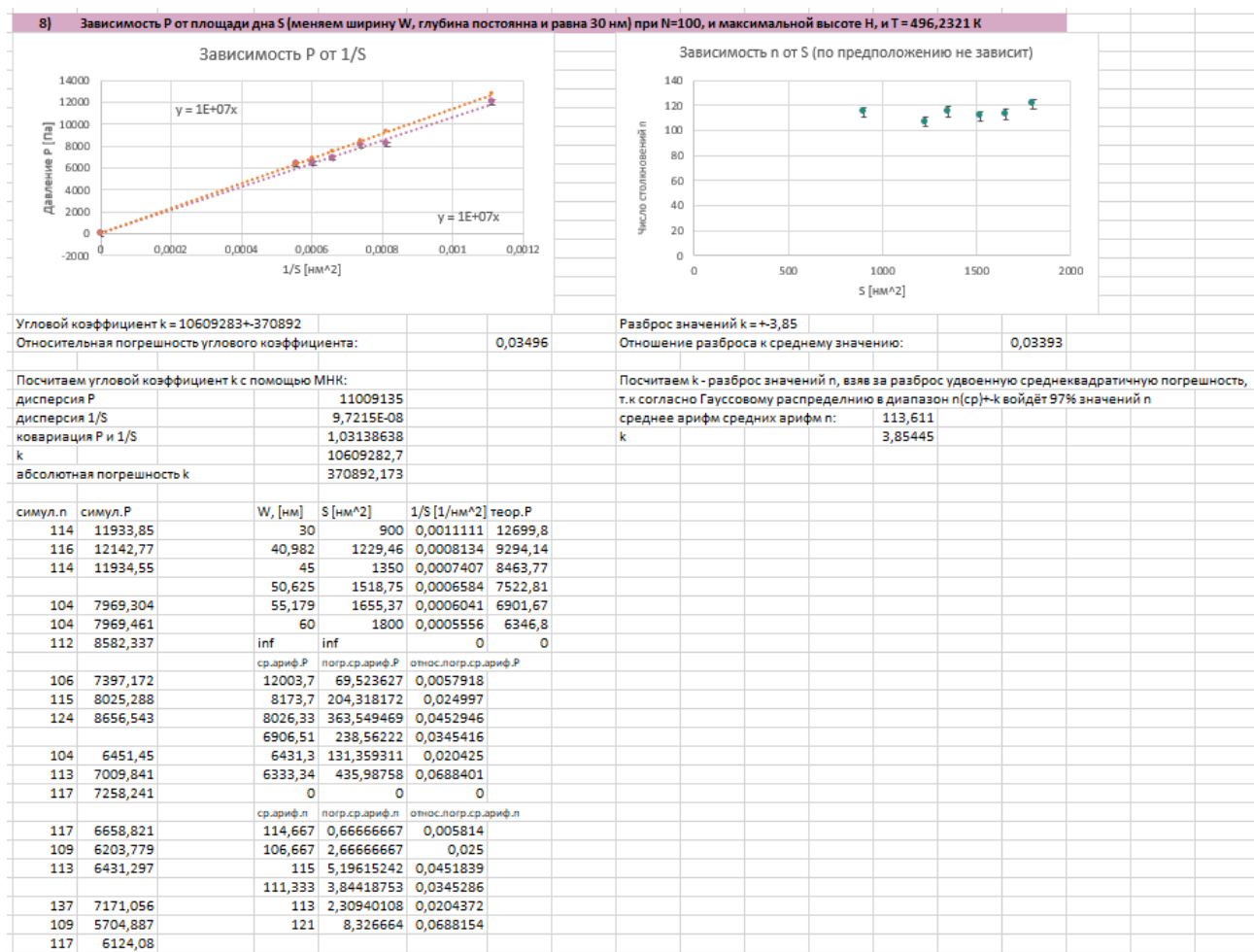
Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:

дисперсия Р 451323,364
дисперсия 1/S 9,8088E-08
ковариация Р и 1/S 0,20968085
k 2137672,52
абсолютная погрешность k 79431,5018

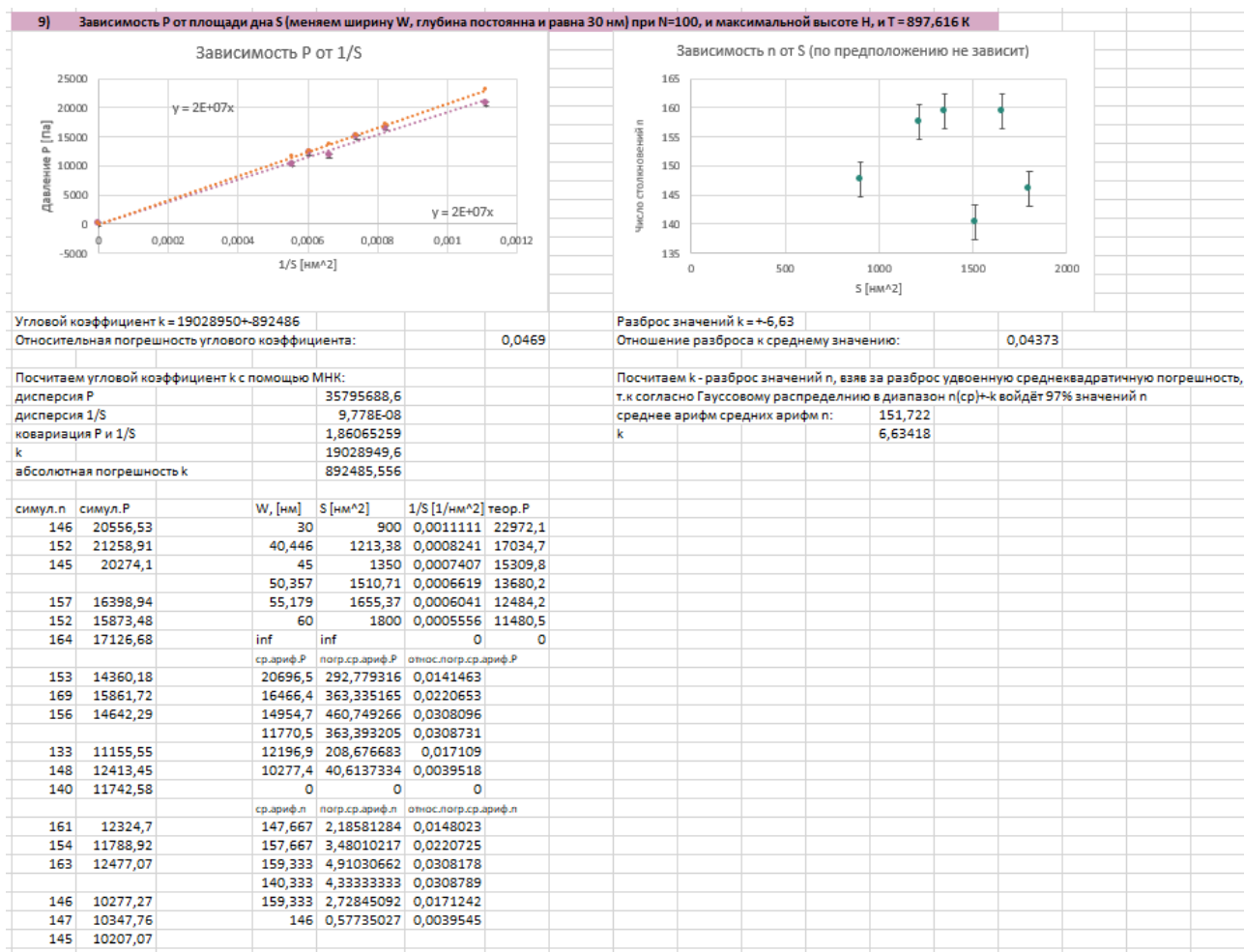
Посчитаем k - разброс значений n, взяв за разброс удвоенную среднеквадратичную погрешность, т.к. согласно Гауссовому распределению в диапазон $n(\text{ср}) \pm k$ войдет 97% значений n
среднее арифм средних арифм n: 51,3333
k 1,83787

симул. n	симул. Р	W, [нм]	S [нм ²]	1/S [1/нм ²]	теор. Р
52	2489,162	30	900	0,0011111	2655,67
46	2202,114	40,179	1205,37	0,0008296	1982,41
51	2441,238	45	1350	0,0007407	1769,87
		50,089	1502,67	0,0006655	1589,94
54	1930,167	55,179	1655,37	0,0006041	1443,22
45	1608,488	60	1800	0,0005556	1327,19
50	1787,062	inf	inf	0	0
		ср.ариф. Р	погр.ср.ариф. Р	атнос.погр.ср.ариф. Р	
51	1627,533	2377,5	88,7798624	0,0373416	
48	1531,931	1775,24	93,048701	0,0524147	
52	1659,471	1606,31	38,3161047	0,0238535	
		1586,45	107,657508	0,0678608	
55	1576,889	1309,99	22,9676549	0,0175327	
49	1404,94	1260,58	21,1328348	0,0167644	
62	1777,509	0	0	0	
		ср.ариф. n	погр.ср.ариф. n	атнос.погр.ср.ариф. n	
49	1275,23	49,6667	1,85592145	0,0373675	
52	1353,375	49,6667	2,60341656	0,0524178	
50	1301,355	50,3333	1,20185043	0,0238778	
		55,3333	3,75647589	0,0678881	
54	1292,485	50,3333	0,8819171	0,0175215	
53	1268,623	52,6667	0,8819171	0,0167453	
51	1220,618				

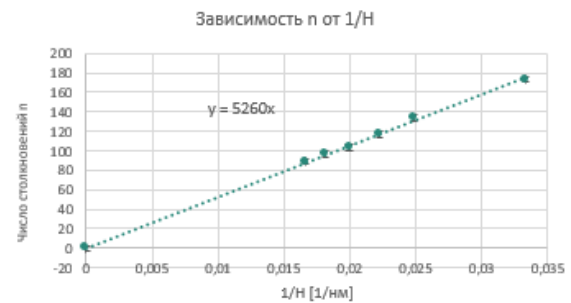
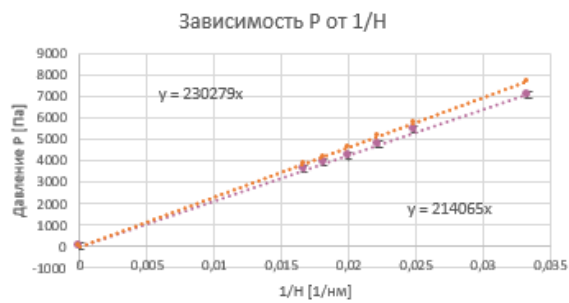
Как и предполагалось, существует обратнопропорциональная зависимость между давлением и площадью дна резервуара, а число ударов о стенку n не зависит от площади дна.



При большей температуре эти зависимости также выполняются.



10) Зависимость P от высоты резервуара H при N=100, и максимальной ширине W, и T = 300 K



Угловой коэффициент $k = 212554 \pm 3073$
Относительная погрешность углового коэффициента: 0,01446

Угловой коэффициент $k = 5223 \pm 75$
Относительная погрешность углового коэффициента: 0,01445

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:
дисперсия P 3992574,9
дисперсия 1/H 8,828E-05
ковариация P и 1/H 18,7641868
k 212554,18
абсолютная погрешность k 3073,11115

Посчитаем угловой коэффициент k с помощью МНК:
дисперсия n 2410,75
дисперсия 1/H 8,8E-05
ковариация n и 1/H 0,46108
k 5223
абсолютная погрешность k 75,469

симул. n	симул. P	H [nm]	1/H [1/nm]	теор. P
162	6592,58	30	0,03333333	7677,72
182	7406,927	40,179	0,02488862	5731,29
175	7121,58	45	0,02222222	5116,82
		50,089	0,01996446	4596,63
134	5453,321	55,179	0,01812284	4172,44
131	5331,237	60	0,01666667	3837
136	5534,596	inf	0	0
ср. ариф. P	погр. ср. ариф. P	относ. погр. ср. ариф. P		
110	4476,678	7040,36	238,563403	0,03389
124	5046,285	5439,72	59,0973827	0,01086
117	4761,827	4761,6	164,431418	0,03453
		4205,23	152,85642	0,03635
103	4191,812	3920,5	71,7837581	0,01831
110	4476,437	3622,07	62,128712	0,01715
97	3947,437	0	0	0
ср. ариф. n	погр. ср. ариф. n	относ. погр. ср. ариф. n		
99	4029,138	173	5,85946528	0,03387
93	3784,896	133,667	1,45296631	0,01087
97	3947,459	117	4,04145188	0,03454
		103,333	3,75647589	0,03635
91	3703,377	96,3333	1,76383421	0,01831
90	3662,794	89	1,52752523	0,01716
86	3500,043	0	0	0

Как и предполагалось, существует обратнопропорциональная зависимость между давлением и высотой резервуара, число ударов о стенку n также обратнопропорционально высоте резервуара.

На графиках видно, что экспериментальное давление обычно получается несколько ниже теоретического. Возможные причины этого обсуждались выше при анализе погрешностей газовой модели.

Вы можете включить симуляцию и убедиться самостоятельно в выполнении этих зависимостей.

Также можно посмотреть, как забываются начальные условия - стенками резко толкнуть газ и пронаблюдать, как более - менее упорядоченное движение молекул снова станет хаотическим. После этого нельзя проводить измерения, пока не установится равновесие!

Выводы:

При любых исследованных комбинациях параметров теоретические и экспериментальные зависимости параметров газовой модели хорошо совпадали, значит, симуляция достаточно точно описывает поведение трёхмерного одноатомного идеального газа из маленьких сталкивающихся между собой шариков.

Также сделана попытка качественно смоделировать подобие химического синапса и его работу, такая модель может пригодиться, например, для создания логического элемента микроэлектронных схем, срабатывающего только при определённой пороговой силе тока / напряжении / другом параметре, или для создания в будущем искусственного или даже настоящего синапса.

Так как биологические системы являются одними из самых сложных известных систем, в том числе и в физическом смысле, точная модель химического синапса - крайне сложная задача, нереализованная и по сей день, в том числе и в данной симуляции.

Источники:

·Д.В.Сивухин. Общий курс физики.Термодинамика и молекулярная физика.

·Гладун А.Д. и др. Лабораторный практикум по общей физике. Том 1. Термодинамика и молекулярная физика.

·Я. Кольман, К.Г. Рём. Наглядная биохимия.

·Вячеслав Дубынин - Химия мозга. Видеокурс, 12 лекций.