Краевая научно-практическая конференция учебно-исследовательских работ учащихся 6-11 классов «Прикладные и фундаментальные вопросы математики»

Математическое моделирование

## Математическая модель идеального газа

Бобров Виктор Сергеевич, Сливницин Павел Александрович,

11 кл., МБОУ «Лицей №1», г. Пермь,Грибов Дмитрий Сергеевич,учитель информаткики.

Пермь. 2015.

# Оглавление

Введение	3
Глава 1. Концептуальная постановка задачи	5
Глава 2. Математическая постановка задачи моделирования	6
Заключение	21
Список литературы	22

#### Введение

При решении различных практических задач часто используют модель идеального газа, например, эту модель используют для моделирования изопроцессов или при моделировании различных газодинамических процессов, но эта модель способна описать далеко не все реальные ситуации. Границы применимости модели идеального газа зависят от рассматриваемой задачи. Так, например, если необходимо установить связь между давлением, объемом и температурой, то газ с хорошей точностью можно считать идеальным до давлений в несколько десятков атмосфер. Если же изучается фазовый переход типа испарения или конденсации, или рассматривается процесс установления равновесия в газе, то модель идеального газа нельзя применять даже при давлениях в несколько миллиметров ртутного столба [1]. Отсюда следует, в частности, что модель идеального газа нельзя применять в случае вакуума, или близкого к нему состояния.

Есть две точки зрения на определение вакуума – математический вакуум и физический вакуум. Математический вакуум представляет собой полное отсутствие веществ; физический вакуум, в свою очередь, представляет собой не полное отсутствие вещества, а такую его концентрацию, для которой невозможно рассчитывать микропараметры или для которой неприменимо понятие термодинамического равновесия.

Термодинамическое равновесие (ТДР) – состояние системы, при котором остаются неизменными по времени макроскопические величины этой системы (температура, давление, объём) в условиях изолированности от окружающей среды или неизменных внешних условий[2]. На практике эти величины не являются постоянными, они лишь колеблются возле некоторых средних значений. Отсюда можно говорить о том, что в реальности для состояния ТДР не происходит изменения средних макропараметров, измеренных на достаточно больших интервалах времени, которые называются временем релаксации.

Идеальный газ – это математическая модель вещества[2], которая предполагает, что:

1. потенциальной энергией взаимодействия молекул можно пренебречь по сравнению с их кинетической энергией,

2. суммарный объём молекул пренебрежимо мал,

3. силы притяжения или отталкивания пренебрежимо малы во все моменты времени, кроме времени непосредственного соударения,

4. соударения частиц между собой и со стенками сосуда абсолютно упруги,

5. время взаимодействия между молекулами пренебрежимо мало по сравнению со средним временем между столкновениями.

Сегодня создание вакуума требуется для разных производственных процессов, но создать идеальный вакуум невозможно, поэтому нужно знать границу концентрации вещества, при которой его состояние можно считать состоянием вакуума.

Чтобы описать газ, обратимся к молекулярно-кинетической теории (МКТ).

В МКТ принято выделять три основных положения [2]:

1. Любое вещество состоит из структурных частиц.

2. Структурные частицы вещества находятся в непрерывном неуничтожимом хаотическом движении.

3. Частицы вещества взаимодействуют друг с другом: притягиваются на небольших расстояниях и отталкиваются, когда эти расстояния уменьшаются.



Рис. 1. Визуальное представление идеального газа

Идеальный газ (рис. 1) в классическом понимании представляет собой среду, в которой структурными частицами являются материальные точки, которые не взаимодействуют между собой. Идеальный газ – газ, который в точности подчиняется газовым законам.

Созданная нами модель будет опираться на эти определения, и конечной целью будет определить, какую минимальную концентрацию частиц должен иметь моделируемый газ, чтобы в нем выполнялись газовые законы.

### Цель работы:

Определить границы применимости модели идеального газа.

#### Задача работы:

Разработать и реализовать математическую модель, позволяющую описать поведение идеального газа в закрытом сосуде при различных начальных условиях и при различных газовых процессах.

#### Модель должна позволять:

- 1. Вычислять макро- и микропараметры, а также наблюдать за их изменением в моменты времени.
- 2. Проверить выполнение уравнения состояния идеального газа при различной концентрации частиц газа.
- 3. Проверить выполнение газовых законов: Бойля-Мариотта при изотермическом процессе, Шарля при изохорическом процессе.

## Глава 1. Концептуальная постановка задачи

**Объектом исследования** является газ, состоящий из фиксированного числа частиц *n*, представляющих собой идеальные шары и находящихся в сосуде объёма *V*.

Для упрощения процесса моделирования примем следующую совокупность гипотез:

- 1. Структурные частицы будут считаться абсолютно твердыми шарами массы *m* и радиусом *r*.
- 2. Движение частиц происходит в небольшом сосуде объема V (однако при этом размеры сосуда много больше размеров отдельных частиц газа).
- 3. Движение происходит вне действия поля силы тяжести.

Если сравнить потенциальную и кинетическую энергию частицы, можно заметить, что потенциальная энергия частицы газа mgh много меньше кинетической  $\frac{mv^2}{2}$ , из-за того, что движение частицы происходит с большой скоростью, а высота сравнительно небольшая (из-за небольших размеров сосуда относительно размера Земли). Так, например, можно оценить эти значения для частицы водорода. Масса молекулы равна примерно  $3,3*10^{-27}$  кг, а её средняя квадратичная скорость при температуре 27° С равна примерно 1930 м/с. При этом размеры сосуда сравнительно небольшие, не более сантиметра, если сопоставлять их с размерами частиц в модели. Отсюда можно заметить, что потенциальная энергия силы тяжести меньше кинетической более чем 10000 раз, масса частицы почти никак не влияет на эти значение, поэтому можно утверждать, что для частиц любого вещества потенциальная энергия силы тяжести будет пренебрежимо меньше кинетической.

- Столкновения со стенками сосуда и с другими структурными частицами будем считать абсолютно упругими (сохраняется кинетическая энергия данной системы и можно пренебречь деформацией структурных частиц). Из-за того, что размер частиц очень мал, и даже относительно самих частиц эта деформация очень мала из-за их большой плотности.
- 5. Движение структурных частиц происходит в трехмерном пространстве.
- 6. Силы сопротивления движению частиц отсутствуют.
- 7. Силами притяжения и отталкивания между структурными частицами можно пренебречь потому, что массы частиц очень малы, примерно $10^{-27}$  кг, а силы притяжения пропорциональны  $r^{-7}$ , силы отталкивания  $r^{-13}$ , где r расстояние между частицами, отсюда следует, что силы притяжения и отталкивания будут пренебрежимо малы.
- 8. Частицы в интервалы времени между соударениями движутся прямолинейно и равномерно. Из-за того, что во время свободного движения не учитывается воздействие внешних сил, следовательно, нет и ускорения (ни нормального, ни тангенциального).

### Глава 2. Математическая постановка задачи моделирования

У частиц в моделируемом газе существует три этапа движения: свободное движение, момент удара со стенкой, момент соударения шаров.

1. Во время свободного движения будем считать, что на частицу не действуют внешние силы. Отсюда следует, что во время этого этапа частица движется равномерно и прямолинейно:

$$v_{x}^{(i)}(t) = const,$$

$$v_{y}^{(i)}(t) = const,$$

$$v_{z}^{(i)}(t) = const,$$

$$x^{(i)}(t) = x_{0}^{(i)} + v_{x}^{(i)}t,$$

$$y^{(i)}(t) = y_{0}^{(i)} + v_{y}^{(i)}t,$$

$$z^{(i)}(t) = z_{0}^{(i)} + v_{z}^{(i)}t.$$
(1)

где *i* – номер частицы, *x*, *y*, *z* –координаты соответствующей частицы, *v* – проекция скорости на соответствующую ось.

2. Для того чтобы описать столкновение двух частиц, нужно решить следующую задачу:

Нужно определить направление и модуль скоростей после центрального удара двух шаров массами  $m_1$  и  $m_2$ , движущихся со скоростями  $v_1$  и  $v_2$  соответственно.



Рис. 2. Схема центрального удара между частицами

Проведём прямую, соединяющую центры шаров, это будет ось Х`, ось Y` будет перпендикулярна ей. Для начала нужно найти угол между Х и Х`, для этого найдём точку касания этих шаров:

$$x_{\kappa ac} = \frac{x_{O1} + x_{O2}}{2}$$

$$y_{\kappa ac} = \frac{y_{O1} + y_{O2}}{2}$$
(2)

где  $x_{\kappa ac}$ ,  $y_{\kappa ac}$  – координаты точки касания шаров;  $x_{O1}$ ,  $y_{O1}$  – координаты центра первого шара;  $x_{O2}$ ,  $y_{O2}$  – координаты центра второго шара.

Теперь найдём производную уравнения окружности в точке касания и воспользуемся геометрическим смыслом производной:

$$y = y_{0} + \sqrt{R^{2} - (x_{\kappa ac} - x_{OI})^{2}}$$
  

$$y' = \frac{x_{OI} - x_{\kappa ac}}{\sqrt{R^{2} - (x_{\kappa ac} - x_{OI})^{2}}}$$
  

$$tg\alpha = \frac{1}{y'(x_{\kappa ac})}$$
(3)

где  $\alpha$  – угол между X и X<sup>°</sup>.

Спроецируем составляющие скорости на новые оси Х` и Ү`:

$$v_{iy} = v_{iy} \cdot \sin(\alpha)$$

$$v_{ix} = v_{ix} \cdot \cos(\alpha)$$
(4)

Далее воспользуемся законом сохранения импульса и законом изменения полной механической энергии и найдём, как изменятся каждая проекция составляющей скорости на оси Х` и Y`.Получим системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{m_{1}v_{1y^{`}}^{2}}{2} + \frac{m_{2}v_{2y^{`}}^{2}}{2} = \frac{m_{1}v_{1y^{`}}^{2}}{2} + \frac{m_{2}v_{2y^{`}}^{2}}{2} \\ m_{1}v_{1y^{`}} + m_{2}v_{2y^{`}} = m_{1}v_{1y^{`}}^{2} + m_{2}v_{2y^{`}}^{2} \\ \end{cases} \\\begin{cases} \frac{m_{1}v_{1x^{`}}^{2}}{2} + \frac{m_{2}v_{2x^{`}}^{2}}{2} = \frac{m_{1}v_{1x^{`}}^{2}}{2} + \frac{m_{2}v_{2x^{`}}^{2}}{2} \\ m_{1}v_{1x^{`}} + m_{2}v_{2x^{`}} = m_{1}v_{1x^{`}}^{2} + m_{2}v_{2x^{`}}^{2} \end{cases}$$
(5)

Далее выражаем конечные проекции составляющих скорости:

$$v'_{1y'} = \frac{2m_2 v_{2y'} + (m_1 - m_2) v_{1y'}}{m_1 + m_2}$$

$$v'_{1x'} = \frac{2m_2 v_{2x'} + (m_1 - m_2) v_{1x'}}{m_1 + m_2}$$

$$v'_{2y'} = \frac{2m_1 v_{1y'} + (m_2 - m_1) v_{2y'}}{m_1 + m_2}$$

$$v'_{2x'} = \frac{2m_1 v_{1x'} + (m_2 - m_1) v_{2x'}}{m_1 + m_2}$$
(6)

Далее найдём уже конечные составляющие скорости с частиц в первоначальной системе координат Х, Y и найдём, как изменятся каждая проекция. Найдём обе конечные скорости, зная все их проекции:

$$v'_{1} = \sqrt{v'^{2}_{1x} + v'^{2}_{1y}}$$
  

$$v'_{2} = \sqrt{v'^{2}_{2x} + v'^{2}_{2y}}$$
(7)

3. Теперь рассмотрим момент, когда частица ударяется со стенкой.

Рассмотрим стандартную задачу:

Частица (шарик) ударяется о плоскую поверхность, требуется найти направление и модуль скорости частицы после удара.



Рис. 3. Схема удара частицы о стенку

Воспользуемся законом сохранения полной механической энергии и докажем, что модуль скорости частицы не изменится:

$$A_{\text{shew}} = \Delta E - A_{\text{shymp}\_\text{hekohc}}.$$
(8)

В данной ситуации механической системой являются шарик и стенка. В момент удара сила реакции не совершает никакой работы из-за того, что частица в этот момент никуда не перемещается. В данной механической системе полностью отсутствуют внутренние неконсервативные силы, поэтому их работа тоже отсутствует. Отсюда получаем, что после удара частица полностью сохранит свою кинетическую энергию, а, следовательно, и модуль скорости:

$$\Delta E = 0,$$

$$E_{\mu} = E_{\kappa},$$

$$\frac{m v_{\mu}^{2}}{2} = \frac{m v_{\kappa}^{2}}{2},$$

$$v_{\mu} = v_{\kappa}.$$
(9)

Теперь найдем, как изменится каждая проекция скорости в момент удара.

Сначала найдём, как изменится проекция скорости на оси параллельной плоскости стенки (ось X). Для этой оси справедлив закон сохранения импульса, так как на этой оси полностью отсутствуют внешние силы, действующие на частицу. Отсюда можно заметить, что проекция скорости на оси X не изменится:

$$F_{x} = \frac{\Delta p_{x}}{\Delta t} = 0,$$

$$\Delta p_{x} = 0,$$

$$(10)$$

$$v_{yx} = v_{xx}.$$

Теперь найдём, как изменится модуль проекции скорости на оси перпендикулярной плоскости стенки (ось Y) после удара. Модуль проекции скорости на данной оси не изменится, так как если бы он изменился, то изменился бы и модуль полной скорости частицы, а это невозможно:

$$\begin{aligned} v_{\mu} &= v_{\kappa}, \\ v_{\mu x} &= v_{\kappa x}, \\ v &= \sqrt{v_{x}^{2} + v_{y}^{2}}, \\ \left| v_{\mu y} \right| &= \left| v_{k y} \right|. \end{aligned}$$
(11)

Отсюда получаем, при ударе о стенку меняется одна из проекций скорости.

Теперь, когда движение частиц полностью описано, нужно с помощью известных микропараметров вычислить макропараметры.

Для начала найдем давление. Мы не можем рассчитать давление как таковое, поэтому воспользуемся некоторой аналогией. В качестве аналога давлению можно принять средний импульс, передаваемый совокупностью частиц стенкам за определенный промежуток времени:

$$P = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{2m|v_{iy}|}{\Delta t},$$
(12)

где $\Delta t$  – промежуток времени, в течение которого вычисляется давление.

Теперь нужно выразить температуру. Из-за того, что строго определить температуру в этой модели нельзя, можно воспользоваться аналогией со средней кинетической энергией частиц. Отсюда получается выражение для температуры.

Основное уравнение МКТ идеального газа:

$$P = \frac{2}{3}n < \varepsilon_k >, \tag{13}$$

где *P* – давление; *n* – кол-во частиц; <  $\varepsilon_k$  > – средняя кинетическая энергия.

Теперь через основное уравнение состояние газа выразим температуру: PV = vRT,

$$\frac{3}{2}kT = \langle \varepsilon_k \rangle,$$

$$T = \frac{2 \langle \varepsilon_k \rangle}{3k},$$
(14)

где *k* – постоянная Больцмана.

Теперь раскроем среднюю кинетическую энергию и получим через основное уравнение МКТ следующую формулу:

$$3kT = m < v^{2} >,$$
  

$$\sqrt{\langle V^{2} \rangle} = \sqrt{\frac{3RT}{\mu}},$$
  

$$T = \frac{m < v^{2} >}{3k},$$
(15)

где  $\sqrt{\langle V^2 \rangle}$  – средняя квадратичная скорость частиц.

За единицу объема будет считаться некоторое количество пикселей(100х100х100 пикселей) для простоты восприятия.

Теперь, когда были полностью описаны способы вычисления всех макропараметров, а также получена возможность отлеживать их поведение с течением времени, осталось узнать концентрацию, при которой будет происходить моделирование газа. Концентрация будет вычисляться по следующей формуле:

$$D=\frac{n}{V},(16)$$

где D – концентрация; n – количество частиц; V – объем сосуда.

После проверки условного сохранения ТДР в нашей математической модели идеального газа удостоверимся в выполнении некоторых газовых законов с помощью моделирования газа в изопроцессах.

1. Изохорический процесс (V=const)

Чтобы смоделировать данный процесс с помощью нашей модели, изменим скорость частиц. Тем самым, будет изменяться температура и давление, а размер сосуда останется постоянным. Мы будем отслеживать изменение давления и температуры, и проверять выполнение закона Шарля:

$$\frac{p}{T} = const. \tag{17}$$

2. Изотермический процесс (T=const):

В модели этого процесса будет изменяться объём сосуда, так как никак не изменяется скорость частиц, то температура будет оставаться постоянной. Здесь нужно отслеживать изменение давления и объема, так же проверять условное выполнение закона Бойля-Мариотта:

$$pV = const.$$
 (18)

В предыдущей главе было полностью описано движение частиц, а также показан способ определения макропараметров (давление, температура, объем).



Рис. 4. Визуальное представление созданной модели

Для начала исследуем, как будет соблюдаться состояние ТДР в данной модели (рис.4). Можно заметить, что в отличие от давления температура не меняется на протяжении всего времени отслеживания (рис.5). Это можно объяснить тем, что в данной модели при соударениях между частицами не меняется общая кинетическая энергия системы, с которой непосредственно и связана температура. Давление же при данных условиях не находится в состоянии ТДР, но, если обратить внимание на график (рис.6) можно заметить, что примерно через каждые 100 шагов по времени давление устанавливается на отметке 19,5единиц. Вдобавок, видно, что это значение при данных условиях устанавливается чаще всего. В данной модели 100 шагов равны временному отрезку 0,1 сек. исходя из этого можно допустить, что давление тоже находится в состоянии ТДР.



Рис. 5. График зависимости температуры от времени. По горизонтали отмечены моменты времени, по вертикали значения температуры



Рис. 6. График зависимости давления от времени. По горизонтали отмечены моменты времени, по вертикали значения давления

После того, как мы проверили возможность получения состояния ТДР в данной модели, нужно найти границы, при которых состояния ТДР не будет. Если взять основное уравнение МКТ (19) и выразить концентрацию *n*, то

можно заметить что она будет прямо пропорциональна соотношению P/T.Из этого можно сделать вывод, что в данной модели газа должно выполняться это условие (18), и оно тоже будет условием проверки состояния ТДР в данной математической модели газа. Теперь попробуем экспериментально найти границы ТДР для данной модели. Для этого будем постепенно уменьшать концентрацию до момента, когда отношение P/T перестанет иметь линейную зависимость:

$$P = nkT,$$
  

$$n = p / (kT),$$
  

$$n \sim P / T.$$
(19)

Для того чтобы отследить выполнение данной зависимости смоделируем следующий процесс. В данной модели нужно постепенно уменьшать концентрацию, за счёт увеличения объема, и отслеживать установившееся соотношение P/T.

Если обратить внимание на графикк зависимости P/T от концетрации можно заметить(рис.7), что в определённый моментP/Tперестаёт линейно зависеть от концентрации. Данное нарушение происходит, когда концентрация примерно равна 50единиц, после этого график преобретает вид ветви параболы, а отношение P/Tпродолжает убывать, но уже с меньшей скоростью.



Рис. 7. График зависимости *P/T* от концентрации. По горизонтали отмечены значения *P/T*, по вертикали значения концентрации.

Если дополнительно проанализировать данный эксперимент, можно заметить, что сейчас был смоделирован изотермический процесс. Для подтверждения этого вывода, проанализируем графики зависимости *P* от *T* 

(рис.9), V от T (рис.10), P от V (рис.8). Если графики зависимости P от V и V от T по своему характеру полностью совпадают с общепринятыми графиками данного изопроцесса, то график зависимости PотVтолько отдалённо напоминает параболу, но определённая зависимость всё же прослеживается.



Рис.8. График зависимости Р от V при изотермическом процессе. По горизонтали отмечены значения объема, по вертикали значения давления.



Теперь смоделируем изохорический процесс, для этого постепенно будем увеличивать скорость частиц и ждать до тех пор, пока в модели не установится состояние ТДР. Скорость частиц будет увеличиваться линейно. При моделировании изохорического процесса, никаких серьезных отклонений на графиках данной модели от общепринятых зависимостей обнаружено не было (рис. 11,12,13).



гис. 11. 1 рафик зависимости Р от 1 при изохорическом процессе. По горизонтали отмечены значения температуры, по вертикали значения давления.



Теперь смоделируем поведение смеси газов. Для этого изменим у некоторых шариков размер и массу, после проведём теже экспереметы что были описанны ранее.Сначала рассмотрим ситуацию, когда объем температура не будут изменяться (рис.14).



Рис. 14. Визуальное представление созданной модели. Разными цветами обозначены частицы разных газов.

Как и в первом эксперименте, проверим наличие ТДР в данной модели газа. В случае с температурой (рис.15) можно заметить, что характер графика никак не изменился и температура также не меняется с течением времени. Если обратить внимание на график давления (рис.16), то можно заметить, что он более интенсивно изменяться в пределах диапазона 5 единиц. Это можно объяснить тем, что в модели появились частицы с большей массой, которые сильнее влияют на изменение давления, также немного изменился характер удара между частицами – они стали менять модуль скорости движения, что также сказалось на передаваемый ими импульс стенкам. Осталось только добавить, что, несмотря на немного изменившийся характер графика давления, можно до сих пор утверждать, что данная систем находится в состоянии ТДР, так как на длительных промежутках времени значение давления также, как и ранее, остаётся неизменным.



Рис. 15. График зависимости температуры от времени. По горизонтали отмечены моменты времени, по вертикали значения температуры.





Теперь проверим, как изменится значение критической сильно концентрации для данной будем моделировать модели, же TOT изотермический процесс, что и раннее.

Анализируя полученные графики (рис.17) можно заметить, что, как и в предыдущем похожем эксперименте, при концентрации равной примерно 50 единиц снова пропадает линейная зависимость P/T от концентрации. Отсюда можно сделать вывод, что пороговое значение концентрации, после



преодоления, которого престают выполняться фундаментальные газовые законы, не зависит от состава газа.

Рис. 18. График зависимости Р/Т от времени при уменьшении концентрации. По горизонтали отмечены моменты времени, по вертикали значения Р/Т.

#### Заключение

В ходе выполнения работы была создана математическая модель, которая позволила описать поведение газа при различных начальных условиях. Исходя из полученных результатов, можно утверждать, что данная модель достаточно сильно приближенна к модели идеального газа и с её помощью можно решать различные физические задачи, связанные с газодинамическими процессами. В ходе исследования был найден уровень концентрации после преодоления, которого в газе перестают выполняться газовые законы и можно говорить о том, что в сосуде наступает состояние физического вакуума, где модель идеального газа перестаёт работать.

## Список литературы

- Любитов Ю. Н. Идеальный газ // Физическая энциклопедия / Гл. ред. А. М. Прохоров. — М.: Советская энциклопедия, 1990. — Т. 2. — С. 98. — 704 с. — 100 000 экз.
- Мякишев Г. Я., Синяков А. З. Физика. Молекулярная физика. Термодинамика. 10 кл. Профильный уровень: учеб. для общеобразовательных учреждений. — 12-е издание. — М.: Дрофа, 2010