

# УЧЕБНЫЕ КОМПЬЮТЕРНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ В МОДЕЛИ ТВЁРДЫХ ШАРОВ

А. М. Толстик

Томский государственный университет

e-mail: [tolstik@ido.tsu.ru](mailto:tolstik@ido.tsu.ru)

Компьютерное моделирование получило широкое распространение в образовании и явилось основой для создания учебного компьютерного эксперимента, выступающего в форме демонстрационных и лабораторных опытов. Компьютерный эксперимент может быть создан в разных разделах учебной физики, в частности в молекулярной физике.

При изучении молекулярных систем в науке широко применяются методы машинного моделирования: динамический, статический и Монте-Карло [1]. Динамический метод моделирования берёт своё начало с работы Олдера и Вайнрайта [2], в которой рассматривалась система твёрдых шаров. В результате сравнительно небольшого числа их соударений устанавливалось распределение Максвелла по скоростям, т.е. “виртуальная” система с течением времени приходила в состояние термодинамического равновесия.

В данной работе описываются созданные автором 5 учебных компьютерных экспериментов по молекулярной физике, в которых применяется эта модель взаимодействия.

В первом из них рассматривается система, состоящая из шаров одинакового размера и массы. В работе изучается изменение функции распределения и “скоростной” части энтропии со временем. Скоростная часть энтропии рассчитывается как логарифм статистического веса по формуле:

$$S = k \ln \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_m!},$$

где  $k$  – постоянная Больцмана,  $N$  - число частиц в системе,  $n_i$  - число частиц в  $i$  - м скоростном интервале,  $m$  - количество таких интервалов.

В результате выполнения данной работы студенты убеждаются в том, что энтропия модельной системы возрастает при её приближении к состоянию термодинамического равновесия и флуктуирует вблизи среднего значения в равновесном состоянии. Кроме того, студенты изучают гистограмму установившегося распределения частиц по скоростям и сравнивают её с кривой двумерного распределения Максвелла. Эта работа по своей физической сущности близка к [3], однако в последней соударения частиц имитировались посредством искусственно организованной при помощи неупругого соударения со стенками диффузии в пространстве скоростей.

В другой работе рассматривается система, состоящая из “молекул” 2 сортов, отличающихся размерами и массой. В результате соударений сначала на некоторое время должно устанавливаться состояние с частичным равновесием, в котором каждая из 2 подсистем почти равновесны, а между подсистемами равновесия нет, оно установится позднее, через некоторое время. К сожалению, в компьютерной модели с мало отличающимися массами этот эффект не удалось наблюдать, а систему с большим отличием масс трудно визуализировать из-за большой разницы скоростей частиц. Наша лабораторная работа заключается в изучении равновесного распределения по скоростям для обоих сортов частиц. Благодаря построению гистограмм распределения по скоростям эксперимент обладает демонстрационной наглядностью: во-первых, видно, что оба распределения максвелловские, а во-вторых, наблюдается сильное отличие наиболее вероятных скоростей для разных сортов молекул.

В рамках этой же модели “организован” опыт по броуновскому движению. Одна частица, имеющая много большие размеры и массу, чем остальные, играет роль броуновской.

Она движется хаотически из-за нерегулярности ударов об неё с разных сторон других, меньших, шариков. Демонстрационная модель легко превращается в лабораторную работу, в которой проверяется теория Эйнштейна - Смолуховского и осуществляется в компьютерной интерпретации один из знаменитых опытов Перрена 1908 – 1910 гг. Подобная работа, только созданная с применением другого метода моделирования - метода Монте-Карло - входит в сборник [4].

Четвёртый компьютерный эксперимент посвящён определению средней длины свободного пробега и изучению её зависимости от концентрации молекул – шариков, их размера и температуры системы. В этом эксперименте одна из “молекул” помечается другим цветом, а затем определяются расстояния, проходимые ей между двумя соседними столкновениями, после чего эти величины усредняются. Опыт выполняется при разном числе частиц системы и различной температуре. Отметим, что в модели твёрдых шаров длина свободного пробега от температуры не зависит, слабая зависимость появляется в модели с более реалистичным межмолекулярным взаимодействием. Несложно также исследовать зависимость средней длины свободного пробега от диаметра шаров, т.е. от сечения столкновения.

Наконец, пятая лабораторная работа посвящена изучению распределения Больцмана в поле силы тяжести. Распределение Больцмана применимо только для идеального газа, поэтому соударения шаров не только можно не учитывать, но даже и не следует учитывать. Однако в реально встречающихся в природе газах взаимодействие между молекулами осуществляется именно в виде сравнительно редких столкновений, и поэтому в демонстрационных целях в данном эксперименте были оставлены соударения между шарами. В данной лабораторной работе рассматривается равновесная система из двух сортов частиц разной массы. В ходе работы строится гистограмма распределения частиц каждого сорта по высоте, причём добавление частиц в столбцы гистограммы происходит через небольшие равные промежутки времени. По окончании построения гистограммы строится зависимость логарифма числа частиц в каждом столбике от номера этого столбика (или от высоты, соответствующей этому столбику). Эта зависимость является линейной, и по тангенсу угла наклона этой прямой определяется отношение массы частиц к температуре системы для каждого сорта частиц. Опыт можно повторить для другой температуры.

Все компьютерные эксперименты, описанные выше, созданы в рамках единой модели. Аналогичные натуральные эксперименты невозможны, поэтому данные виртуальные опыты расширяют круг изучаемых явлений, позволяя при помощи наглядной компьютерной модели лучше понять такие сложные для изучения вопросы, как 2-е начало термодинамики и смысл энтропии, распределение Максвелла по скоростям, процессы релаксации в молекулярных системах.

#### Литература

1. Гулд, Я. Тобочник Х. Компьютерное моделирование в физике. В 2-х частях. - М.: Мир. - 1990.
2. В. J. Alder, T. E. Wainwright. J. Chem. Phys. - 1954. - v. 22. - P. 881.
3. А. М. Толстик, О. А. Брусова. Известия вузов. Физика. - 2001. - № 8. - С. 94 (деп.).
4. А. М. Толстик. Виртуальная лаборатория по общей физике. Томск: ИДО ТГУ. - 1999.