

УДК 533.15:519.6:004.432.2

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОВОЙ ДИФФУЗИИ

Константинова Ю.С. студент

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь*

Савилова Ю.И. – канд. техн. наук, доцент

Аннотация. Работа посвящена исследованию диффузии газа методом молекулярной динамики. Автором разработана программа на языке С, моделирующая движение частиц через отверстие в реальном времени. В ходе эксперимента определено время наступления равновесия (440 с), зафиксированы статистические флуктуации и подтверждено постоянство температуры системы. Программа позволяет измерять давление и среднюю скорость частиц. Результаты могут применяться в учебных целях для визуализации законов термодинамики.

Ключевые слова. Молекулярная динамика, диффузия газа, язык С, компьютерное моделирование, термодинамическое равновесие, статистические флуктуации, вычислительная физика.

Введение. Современная физика немыслима без использования информационных технологий (ИТ). Многие задачи, которые невозможно решить аналитически, успешно решаются численными методами с помощью компьютеров. В этом контексте информационные технологии выступают не просто как вспомогательный инструмент, а как полноценный метод научного познания. Компьютерное моделирование, реализованное на языке программирования С, позволяет не только визуализировать процессы, но и проводить вычислительные эксперименты с точностью, недостижимой в аналитических моделях. Язык С благодаря своей производительности и близости к аппаратному обеспечению даёт возможность эффективно симулировать динамику большого числа частиц, что делает его идеальным инструментом для задач молекулярной динамики. Актуальность работы состоит в том, что компьютерное моделирование позволяет наглядно продемонстрировать процессы, скрытые от прямого наблюдения (например, движение молекул), и проверить фундаментальные законы физики. Так, процесс диффузии играет ключевую роль в природе и технике – от дыхания клеток до работы мембранных фильтров [1; 2].

Цель работы: исследовать процесс диффузии газа через отверстие в перегородке методом молекулярной динамики.

Основная часть. В данной работе язык С выступает как инструмент вычислительной физики, позволяющий провести детальное моделирование диффузионного процесса и получить количественные данные, недоступные в реальном эксперименте. В программе хаос имитируется с помощью генератора случайных чисел. В работе для всех экспериментов использовалось фиксированное зерно 12345, что позволяет при необходимости точно повторить полученные результаты. Данные записывались каждые 10 шагов, длительность шага – 0,05 с. Программа моделирует движение 150 частиц в двумерном ящике размером 80×40 условных единиц. В отличие от интерпретируемых языков (Python, MATLAB), компилируемый код на С выполняется на порядки быстрее, что позволяет проводить симуляции с большим числом частиц и на больших временных промежутках. Использование указателей и прямого управления памятью даёт возможность эффективно обрабатывать столкновения частиц без дополнительных расходов.

В коде использованы следующие физические принципы: движение частиц – прямая реализация закона равномерного движения; столкновения физически со стенками – при ударе скорость меняет знак (упругий удар); столкновения между частицами – реализован упругий удар для частиц одинаковой массы; измерение температуры – температура пропорциональна средней кинетической энергии частиц; измерение давления – давление в модели пропорционально количеству ударов частиц о стенки сосуда и измеряется в условных единицах. Для исследования диффузии в программу была добавлена виртуальная перегородка, разделяющая ящик на две равные половины. В перегородке имеется отверстие размером 5 условных единиц. В начальный момент все 150 частиц помещены в левую половину. Проведенное исследование наглядно демонстрирует, как информационные технологии расширяют границы возможностей физики. Классический физический эксперимент с реальным газом требует сложного оборудования (вакуумные камеры, датчики давления, системы регистрации частиц) и зачастую не позволяет наблюдать микроскопическую динамику процесса.

Преимущества реализованного компьютерного моделирования: полная наблюдаемость (в отличие от реального эксперимента, где мы видим лишь интегральные параметры (давление, температуру), в модели можно отследить траекторию каждой отдельной частицы в любой момент времени); воспроизводимость (фиксация зерна генератора случайных чисел позволяет повторить эксперимент бесконечное число раз с абсолютно идентичными начальными условиями – в реальной физике это невозможно из-за квантовой и тепловой стохастичности); управляемость параметрами (размер отверстия, количество частиц, их начальная скорость – все эти параметры изменяются простым редактированием констант в коде; в реальном эксперименте замена перегородки или изменение



Рисунок 4 – Изменение температуры с течением времени

В начальный момент все 150 частиц находятся слева. По мере прохождения частиц через отверстие их количество слева убывает, а справа возрастает (см рисунок 2). К моменту 8800 шагов (440 секунд) устанавливается равновесие – частицы распределяются поровну (75 и 75). Вблизи равновесия (начиная с 6000 шагов) наблюдаются статистические флуктуации (отклонения до ± 3 частиц от среднего значения 75), что соответствует молекулярно-кинетической теории. Это происходит, так как при равновесии потоки частиц слева направо и справа налево уравниваются, но из-за конечного числа частиц есть случайные отклонения. Эксперимент наглядно демонстрирует процесс диффузии и подтверждает, что в равновесном состоянии концентрация частиц выравнивается. Наличие флуктуаций свидетельствует о корректности статистического подхода в модели.

Давление измерялось количеством ударов частиц о стенки сосуда (в условных единицах) (см рисунок 3). В начальный момент давление быстро растет, затем, после выхода системы на равновесный режим (около 440 с), флуктуирует вокруг среднего значения. Это соответствует статистическим флуктуациям, характерным для систем с конечным числом частиц.

Рисунок 4 демонстрирует изменение температуры (средней скорости частиц) с течением времени. Температура в модели пропорциональна средней кинетической энергии частиц и оценивается по средней скорости. Температура остается практически постоянной на протяжении всего эксперимента, что подтверждает сохранение энергии в модели и корректность численного метода.

Ограничения модели: дискретность времени (шаг $\Delta t = 0,05$ может пропускать некоторые столкновения, что вносит погрешность в траектории частиц); конечное число частиц – 150 против 10^{23} в реальном газе, что усиливает флуктуации; двумерность – реальный газ трёхмерен, что может влиять на количественные характеристики диффузии; условные единицы – давление и температура измеряются в относительных единицах, что позволяет исследовать только качественные зависимости.

Заключение.

Проведенное исследование подтверждает, что информационные технологии являются полноправным инструментом современной физики. Компьютерное моделирование на языке C позволило не только подтвердить теоретические законы диффузии, но и визуализировать процесс на микроуровне, что невозможно сделать в реальном лабораторном эксперименте. Производительность языка C дала возможность обработать миллионы событий (столкновений) и получить статистически значимые данные о флуктуациях вблизи равновесия. Практическая значимость исследования: разработанная программа может быть использована в учебных целях для демонстрации основных законов термодинамики и методов компьютерного моделирования в физике, а также как основа для дальнейших исследований (например, зависимости скорости диффузии от размера отверстия).

Список использованных источников:

1. Матвеев, А.Н. Молекулярная физика / А.Н. Матвеев. – М. : Лань, 2024. – 480 с.
2. Трофимова, Т.И. Курс физики / Т.И. Трофимова. – М. : КноРус, 2023. – 592 с.

UDC 533.15:519.6:004.432.2

COMPUTER SIMULATION OF GAS DIFFUSION

Konstantinova Yu.S., student

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

Savilova Yu.I. – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor

Annotation. The study investigates gas diffusion using the molecular dynamics method. The author developed a C-based program that simulates particle motion through an aperture in real-time. The experiment determined the equilibrium time (440 s), recorded statistical fluctuations, and confirmed constant system temperature. The software enables measuring pressure and average particle velocity. The results are applicable for educational purposes to visualize the fundamental laws of thermodynamics.

Keywords. Molecular dynamics, gas diffusion, C language, computer simulation, thermodynamic equilibrium, statistical fluctuations, computational physics.