УДК 377.5
DOI 10.23951/1609-624X-2017-4-89-95

СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ И НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ПРЕПОДАВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИКИ И СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

П. В. Пипич

Высший колледж информатики Новосибирского государственного университета, Новосибирск

Приведены примеры из статистической физики и термодинамики, представляющие самостоятельный интерес для студентов и преподавателей, в которых использованы возможности математического пакета Mathcad. Сплайн-интерполяция применена для решения уравнения теплового баланса с учетом зависимости теплоемкости от температуры. Дебаевская теория теплоемкости кристаллов использована для решения уравнения теплового баланса. Рассмотрено вычисление химического потенциала в распределении Ферми–Дирака.

Численно решены уравнения, в которых неизвестная входит под знак интеграла. Показано, как численно и графически решить уравнение, возникающее при выводе закона смещения Вина. С помощью формулы Планка определена температура звезд, имеющих максимальную долю излучения в видимом диапазоне. Приведены задачи, связанные с распределением Максвелла. Непосредственно вычислено давление изотермической атмосферы на заданной высоте без распределения Больцмана.

Ключевые слова: *системы компьютерной математики, сплайн-интерполяция, численное решение уравнений, статистические распределения.*

Большие преимущества в учебной работе предоставляет использование математических пакетов. Они оптимизированы для решения математических, физических и технических задач. Это обстоятельство позволяет избавиться от значительной части рутинной работы: написания программ для построения графиков, вычисления интегралов, решения дифференциальных уравнений и т. д. Системам компьютерной математики и различным аспектам их применения посвящена обширная литература с большим количеством примеров решения физических и математических задач [1–3]. Все пакеты: Maple, Mathematica, Mathlab и Mathcad могут быть использованы студентами, но наиболее эффективным, по мнению автора, в учебном процессе является Mathcad [4]. В статье приведены примеры, в которых, за исключением последнего, возможности математического пакета используются существенным образом, т. е. попытки решить приведенные задачи на каком-либо языке программирования не будут эффективными. Maple, Mathematica, Mathlab являются более мощными системами компьютерной математики, поэтому приведенные примеры, хотя и решены в Mathcad, могут быть реализованы в любом математическом пакете, а не являются привилегией Mathcad.

Для начала рассмотрим использование сплайн-интерполяции для решения элементарной с физической точки рения задачи на уравнение теплового баланса. Пусть имеются две пластины из золота и никеля, массы и начальные температуры которых mAu = 4 кг, mNi = 1 кг, Tau = 30 K, TNi = 350 K. Требуется найти температуру пластин Tf, которая установится после приведения пластин в соприкосновение. Вычислительная сложность задачи связана с зависимостью теплоемкости металлов от температуры. Причем зависимость теплоемкости от температуры известна для отдельных температур в виде таблиц [5]. В математических пакетах есть возможность интерполировать с помощью сплайнов табличные данные функциональной зависимости между величинами. Решение указанной задачи в пакете Mathcad приведено на рис. 1.

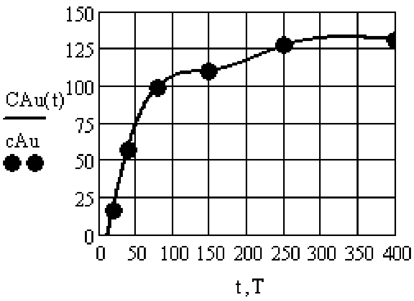
Рассмотрим задачу со сходным условием. Найти конечную температуру T алюминиевой и медной пластин после приведения их в соприкосновение. Начальные температуры медной пластины $T_{\mathrm{Cu}} = 100$ К, алюминиевой $T_{\mathrm{Al}} = 300$ К. В отличие от предыдущей задачи удельная теплоемкость задана в виде формулы, полученной на основе теории Дебая: $C(T) = 9\dfrac{R}{\mu}\left(\dfrac{T}{\theta}\right)^3 \displaystyle\int_0^{\frac{\theta}{T}} \dfrac{x^4 e^x dx}{(e^x-1)^2}$. Температуры Дебая для меди θCu = 309 K и алюминия θAl = 396 K [6]. Соответственно, количество теплоты, необходимое для нагревания, $-\ Q(T1,T2) = m\displaystyle\int_{T1}^{T2} C(T)dT$. Если требуется определить температуру Tf в результате теплообмена, то необходимо решить уравнение $m_{Cu}\displaystyle\int_{T1}^{Tf} C_{Cu}(T)dT = m_{Al}\int_{Tf}^{T2} C_{Al}(T)dT$. Ясно, что решение поставленной задачи без соответствующих вычислительных средств затруднительно (рис. 2).

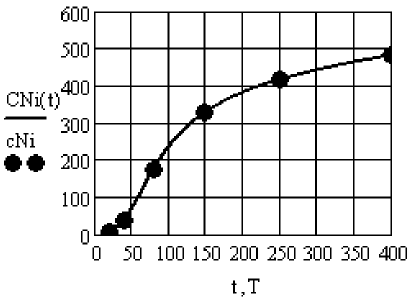
$T := (20\ \ 40\ \ 80\ \ 150\ \ 250\ \ 400)^T$ T в показателе степени означает транспонирование

$cAu := (15.9\ \ 57.2\ \ 99.2\ \ 110\ \ 127\ \ 131)^T$ $cNi := (5.8\ \ 38\ \ 173\ \ 328\ \ 416\ \ 482)^T$

На основании вышеприведенных табличных данных получаем интерполяционные выражения для теплоемкостей CAU(t), CNi(t), на основании которых строим соответствующие графики. Точки – табличные данные, сплошные линии – интерполяционные кривые.

$CAu(t) := interp(lspline(T, cAu), T, cAu, t)$ $CNi(t) := interp(lspline(T, cNi), T, cNi, t)$





Используя интерполяционные выражения для теплоемкостей CAU(t), CNi(t), находим конечную температуру Tf после приведения в контакт золотой пластины массой mAu = 4 кг, начальная температура TAu = 30 К и никелевой массой mNi = 1 кг, начальная температура TNi = 350 К.

$mAu := 4 \quad mNi := 1 \quad q := 5 \quad Tf(TAu, TNi) := \text{while } TAu \le TNi$

$$\begin{vmatrix} TAu \leftarrow TAu + \dfrac{q}{mAu \cdot CAu(TAu)} \\ TNi \leftarrow TNi - \dfrac{q}{mNi \cdot CNi(TNi)} \end{vmatrix}$$

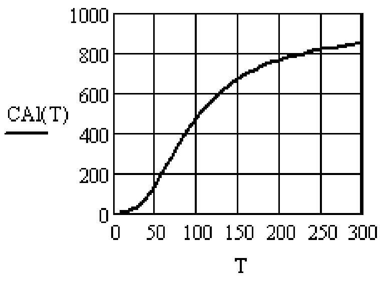
$Tf(30, 350) = 195.714$

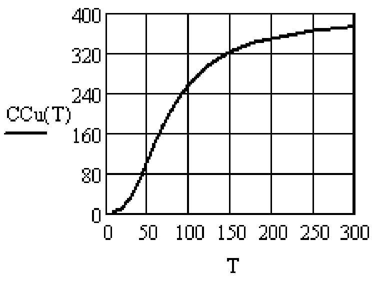
Рис. 1

$\mu Cu := 0.06354 \quad \mu Al := 0.027 \quad k := 1.38 \cdot 10^{-23} \quad R := 8.31 \quad \theta Cu := 309 \quad \theta Al := 396$

$$CCu(T) := 9 \cdot \frac{R}{\mu Cu} \cdot \left(\frac{T}{\theta Cu}\right)^3 \cdot \int_0^{\frac{\theta Cu}{T}} \frac{x^4 \cdot e^x}{\left(e^x - 1\right)^2}\, dx \qquad CAl(T) := 9 \cdot \frac{R}{\mu Al} \cdot \left(\frac{T}{\theta Al}\right)^3 \cdot \int_0^{\frac{\theta Al}{T}} \frac{x^4 \cdot e^x}{\left(e^x - 1\right)^2}\, dx$$

$T := 10, 20 .. 300$





$$Q(T1, T2, \theta, \mu) := 9 \cdot \frac{R}{\mu} \cdot \int_{T1}^{T2} \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^4 \cdot e^x}{\left(e^x - 1\right)^2}\, dx\, dT \qquad T1 := 100 \qquad T2 := 300$$

Численное решение уравнения теплового баланса находим с помощью оператора root

$Tf := root(Q(T1, Tf, \theta Cu, \mu Cu) - Q(Tf, T2, \theta Al, \mu Al), Tf, T1, T2) \qquad Tf = 243.536$

Рис. 2

Еще один пример возможностей математических пакетов связан с распределением Ферми–Дирака. Распределение Ферми–Дирака дает возможность определить вероятность пребывания электронов в состоянии с энергией Е при температуре T. Эта вероятность описывается формулой

$f(E,T)=\dfrac{1}{\exp(\dfrac{E-\mu}{kT})+1}$. Простота этой формулы обманчива. Для вычисления необходимо знание химического потенциала $\mu=\mu(n,T)$, являющегося функцией концентрации n и температуры T. Эта зависимость выражается в неявном виде с помощью формулы

$$n=4\pi\frac{(2m)^{3/2}}{h^3}\int_0^{\infty}\frac{E^{1/2}dE}{\exp(\dfrac{E-\mu}{kT})+1}.$$

В свое время были составлены соответствующие таблицы для μ, которые можно найти в [7], в большинстве случаев данные не приводятся, вычисление не обсуждается [8, 9]. Однако если значения $\mu=\mu(n,T)$ должны быть частью какой-либо программы или указанный источник недоступен, то можно обойтись собственными вычислениями. Целесообразно ввести новые переменные $x=\dfrac{E}{kT}$, $z=\dfrac{\mu}{kT}$ и численно решить уравнение с неизвестной под знаком интеграла

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{1/2}dx}{e^{x-z}+1}=\frac{nh^3}{4\pi(2mkT)^{3/2}}$$

относительно z ($-4\le z\le 16$) для заданных n и T. Интеграл быстро сходится, поэтому верхний предел для удобства можно заменить на конечное число. Пример вычислений для T = 2000 К и $n=8\cdot10^{22}$ см$^{-3}$ и графика $f(E,T)$ в единицах kT приведен ниже (рис. 3).

В связи с формулой Планка можно поставить такую задачу: определить температуру звезд, которые при прочих равных условиях лучше всего видны на небе. Имеется в виду, при какой температуре максимальная доля излучения $P(T)$ приходится на видимый диапазон, 400–760 нм. Конечно, можно использовать закон смещения Вина, но более точный результат можно получить, интегрируя формулу Планка в указанном диапазоне для различных температур и построив график $P(T)$, находим температуру T_{max}, соответствующую максимуму P.

Вышеприведенный фрагмент (рис. 4) из окна Mathcad содержит полное решение задачи. Звездами, которые излучают максимально 44 % энергии в видимом диапазоне, являются Канопус, Процион, Альфа в Персее.

$h := 1.054\cdot10^{-27}$ $m := 9.1\cdot10^{-28}$ $k := 1.38\cdot10^{-16}$ $T := 2000$ $n := 8\cdot10^{22}$

$$\mathrm{const} := \frac{n}{4\cdot\pi}\cdot\left(\frac{h}{\sqrt{2\cdot\pi\cdot m\cdot k\cdot T}}\right)^3 \qquad \mathrm{const} = 1.189\times10^{-1}$$

Значение z термодинамического потенциала μ, выраженного в единицах kT, находим путем решения уравнения с неизвестной z под знаком интеграла с помощью оператора root

$$z := \mathrm{root}\left(\int_0^{50}\frac{\sqrt{x}}{e^{x-y}+1}\,dx-\mathrm{const},y,-5,15\right) \qquad z=-1.961\times10^{0} \qquad f(x,z) := \frac{1}{e^{x-z}+1}$$

Для $z=\mu/kT=-1.961$, соответствующего заданным значениям концентрации n и температуры T, зависимость f от $x=E/kT$ приведена на графике

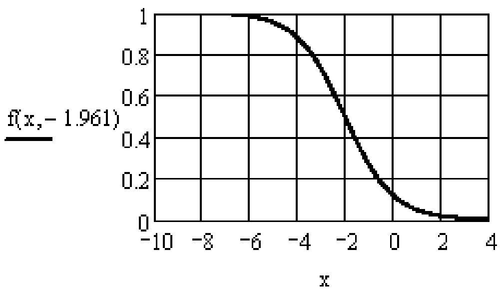


Рис. 3

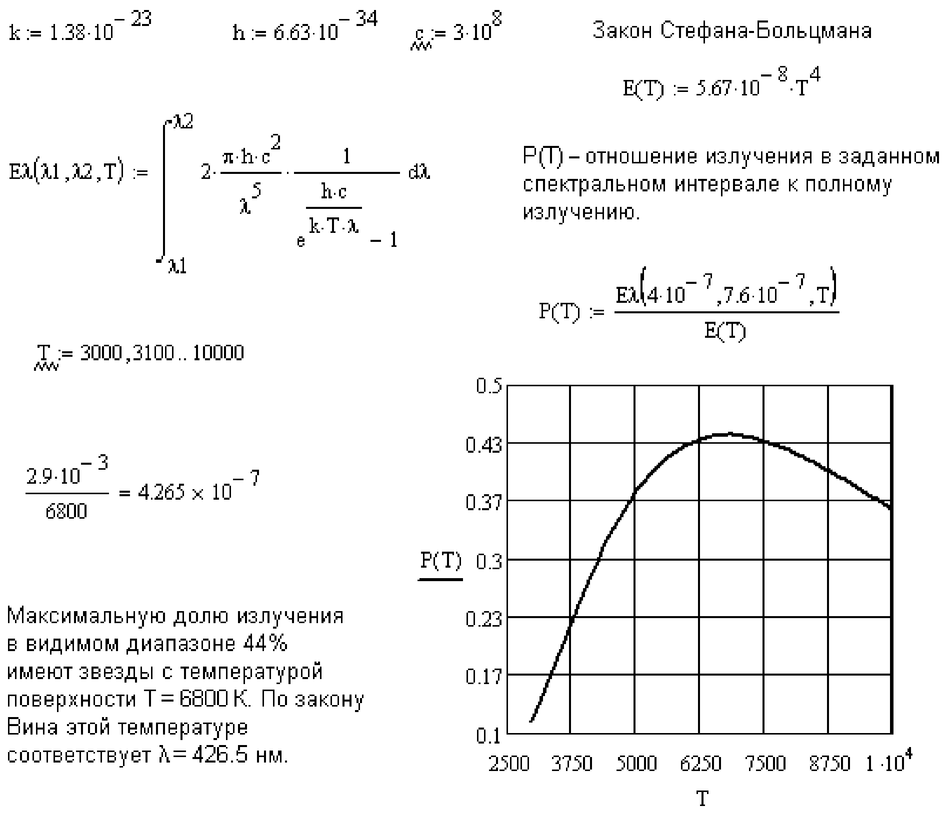


Рис.4

При выводе из формулы Планка закона смещения Вина возникает трансцендентное уравнение $x \cdot e^x - 5 \cdot (e^x - 1) = 0$ [10]. Корень этого уравнения можно найти графически и численно. Оба эти варианта отражены на рис. 5. Графики функций $x \cdot e^x$ и $5 \cdot (e^x - 1)$ почти совпадают, что усложняет процесс нахождения корня графическим методом, да и численным тоже, если делать «вручную». Но возможности Маткада и других математических пакетов позволят справиться с этой проблемой.

Одной из важных тем является распределение Максвелла. Считается, что полноценному усвоению материала способствует достаточное количество решенных задач. В случае с распределением Максвелла и формулой Планка основным препятствием являются неберущиеся интегралы. Если воспользоваться численным интегрированием, то по этим темам можно предложить студентам достаточное количество задач.

Пример.

1. Какова доля молекул азота при $T = 300$ К, скорости которых не превышают 500 м/с.

2. Каково отношение числа молекул CO_2 при $T = 300$ К, скорости которых лежат в диапазоне $400 \le v \le 500$ м/с, к числу молекул, скорости которых $500 \le v \le 600$ м/с.

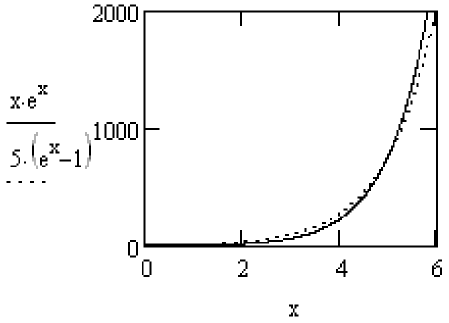
3. При какой температуре число молекул в указанных диапазонах будет равным.

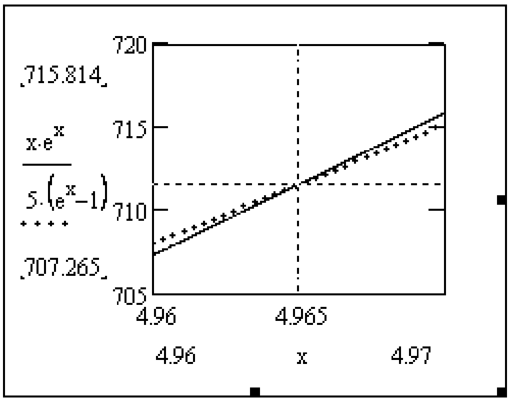
На Маткаде решение поставленных задач выглядит, как представлено на рис. 6.

В заключение рассмотрим пример другого рода. Требуется найти давление изотермической атмосферы на высоте $H = 5000$ м. Температура воздуха $T = 273$ К, давление на уровне моря $p(0) = 101325$ Па. Предположим, что учащиеся по тем или иным причинам не знают распределения Больцмана, но писать простые программы умеют. Представим атмосферный столб площадью основания $S = 1$ м^2 и высотой $H = 5000$ м. Мысленно разобьем столб на параллелепипеды высотой dh и объем соответственно $V = S \cdot dh$. Поскольку давление обусловлено весом воздуха, то давление $p(h)$ на высоте h меньше давления $p(0)$ на высоте $h = 0$ на величину веса параллелепипеда, нижнее основание которого на высоте $h = 0$. Вес параллелепипеда определяется с помощью уравнения состояния и равен $P(0) = p(0) \cdot \mu \cdot g \cdot S \cdot dh/(R \cdot T)$. Аналогичным образом вес параллелепипеда на высоте h равен $P(h) = p(h) \cdot \mu \cdot g \cdot S \cdot dh\ /\ (R \cdot T)$. Отсюда следует, что давление $p(h + dh) = p(h) - p(h) \cdot \mu \cdot g \cdot dh\ /\ (R \cdot T)$. Пользуясь приведенными рассуждениями, можно получить решение задачи, которое представлено на рис. 7. При необходимости можно учесть шарообразность Земли.

Последний пример, несмотря на элементарный характер, иллюстрирует тот факт, что системы

Решение уравнения можно найти графически, используя разные масштабы, и более точно с помощью трассировки





Для численного решения уравнения применяется оператор root

$$\mathrm{root}\left[x \cdot e^x - 5 \cdot \left(e^x - 1\right), x, 4, 6\right] = 4.965$$

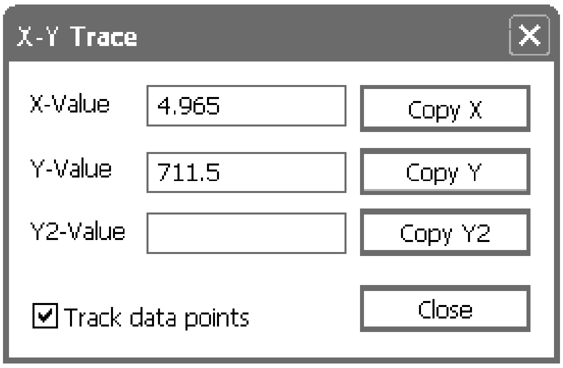


Рис. 5

Доля молекул P(m,T,V1,V2) массой m, скорости которых при температуре T лежат в диапазоне [V1,V2], определяется формулой:

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \qquad P(m,T,V1,V2) := 4 \cdot \pi \cdot \left(\frac{m}{2 \cdot \pi \cdot k \cdot T}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \int_{V1}^{V2} e^{\frac{-m \cdot v^2}{2 \cdot k \cdot T}} \cdot v^2 \, dv$$

1.Доля молекул азота P(300,0,500), скорости которых при температуре T = 300 K не превышают V = 500 м/с:

$$m := 28 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \qquad P(m,300,0,500) = 0.578$$

2.Отношение числа молекул CO_2, скорости которых лежат в диапазоне 400 < v <500 м/с, к числу молекул, скорости которых 500 < v< 600 м/с при T = 300 K:

$$m := 44 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \qquad \frac{P(m,300,400,500)}{P(m,300,500,600)} = 1.599$$

3.Температура T, при которой число молекул CO_2, скорости которых лежат в диапазоне 400<v<500м/с, к числу молекул, скорости которых 500<v<600 м/с равны, определяется путем численного решения уравнения P(T,400,500) = P(T,500,600) с помощью оператора root.

$$\mathrm{root}(P(m,T,400,500) - P(m,T,500,600), T, 100, 1000) = 657.202$$

Рис.6

$R := 8.31 \quad T := 273 \quad g := 9.81 \quad p0 := 101325 \quad \mu := 0.029 \quad S := 1$

$$p(H) := \left| \begin{array}{l} dh \leftarrow 0.1 \\ h \leftarrow 0 \\ ph \leftarrow p0 \\ \text{while } h \le H \\ \quad \left| \begin{array}{l} h \leftarrow h + dh \\ \rho \leftarrow \dfrac{ph \cdot \mu}{R \cdot T} \\ ph \leftarrow ph - \rho \cdot dh \cdot g \end{array} \right. \end{array} \right. \qquad p(5000) = 5.413 \times 10^{4}$$

Давление, полученное непосредственным расчетом (выше) и по формуле Больцмана (ниже), как и следовало ожидать, совпадает.

$$p0 \cdot e^{\frac{-\mu \cdot 5000 \cdot g}{R \cdot T}} = 5.413 \times 10^{4}$$

Рис. 7

компьютерной математики позволяют обойти математические трудности, очень часто возникающие при изучении физики.

Рассмотренные примеры использовались в процессе преподавания физики в Высшем колледже информатики Новосибирского государственного университета. Физику изучают студенты, обучающиеся на базе 9-х классов, на базе 11-х классов и студенты прикладного бакалавриата. Семинарские занятия проводятся в компьютерном классе. Задания для семинаров предварительно размещаются на сайте колледжа. Все задачи решаются в классе на компьютере. Имеются в виду не элементарные вычисления, а то, что для семинаров составлены специальные задачи, требующие умения программировать и знания математических пакетов. В этом смысле физика является частью профессионального образования. Представленный материал использовался в той или иной степени со всеми студентами, а в полной мере с теми, кто изучает физику после 11 классов (обучающиеся на базе 9-х классов распределение Ферми–Дирака, дебаевскую теорию теплоемкости не проходят).

1. Системы компьютерной математики дают возможность более глубоко изучить раздел курса физики «Термодинамика и статистическая физика» школьниками, учащимися колледжей и студентами вузов.

2. Математические пакеты позволяют сделать теоретические знания мощным инструментом практической деятельности.

3. Рассмотренные примеры представляют самостоятельный интерес и могут использоваться студентами и преподавателями колледжей и студентами вузов с продвинутой программой по физике и информатике.

4. Студенты колледжа информатики имеют дополнительный стимул к изучению физики, так как находят практическое применение полученным знаниям будущей профессии и успешно справляются с поставленными задачами.

Список литературы

1. Von zur Gathen J., Gerhard J. Modern computer algebra. Cambridge, University Press, 2013. 808 p.
2. Таранчук В. Б. Основные функции систем компьютерной алгебры. Минск: Изд-во БГУ, 2013. 59 с.
3. Дьяконов В. В. Энциклопедия компьютерной алгебры. М.: ДМК Пресс, 2009. 1264 с.
4. Гурский Д. А. Вычисления в Mathcad. Минск: Новое знание, 2003. 814 с.
5. Физические величины / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
6. Савельев И. В. Курс общей физики. Т. 3. М.: Наука, 1979. 304 с.
7. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977. 336 с.
8. Greiner W., Neise L., Stocker H. Thermodynamics and statistical mechanics. New York Springer Verlag, 1995. 464 p.
9. Tipler P. A., Mosca G. Physics for scientists and engineers. New York, W. H. Freeman and company, 2008. 1412 p.
10. Demtroeder W. Atoms, molecules and photons. Berlin Springer 2006. 572 p.

Пипич Петр Васильевич, преподаватель, Высший колледж информатики Новосибирского государственного университета (ул. Русская, 35, Новосибирск, Россия, 630058). E-mail pipich@ngs.ru

Материал поступил в редакцию 29.11.2016.

DOI 10.23951/1609-624X-2017-4-89-95

SYSTEMS OF COMPUTER MATHEMATICS AND SOME QUESTIONS OF TEACHING THERMODYNAMICS AND STATISTICAL PHYSICS

P. V. Pipich

Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation

Computer algebra systems are now ubiquitous in all areas of science and engineering. Mathcad is one of the most successeful and widely used mathematical package. The capabilities of the mathematical package Mathcad are used to compute approximate solutions of different kinds of equations from statistical physics and thermodynamics. Solved numerically the equations in which the unknown enters under the integral sign. The presented examples are of independent interest to the students and teachers that use numerical methods. The equation of heat balance is difficult to solve when the specific heat depends on temperature and this dependence is given in the form of a table. Spline interpolation is applied to solve the heat balance equation in such a case. Debay's theory of heat capacity of crystals well describes the temperature dependence of specific heat capacities of some substances. The Debay's theory is used to numerically solve the heat balance equation for aluminium and copper. Distribution Fermi–Dirac can be used for calculations if the chemical potential is known. The chemical potential implicitly depends on the concentration and temperature. It is shown how to numerically calculate the chemical potential.

Shows how to solve numerically and graphically an equation arising in the derivation of the Wien's shift law. With the help of Planck's formula determines the temperature of the stars having a maximum proportion of radiation in the visible range. Provides the problems associated with the Maxwell distribution. Without the Boltzmann distribution the pressure of the isothermal atmosphere at a specified altitude is calculated.

Key words: *computer mathematics systems, spline interpolation, numerical solution of equations, statistical distribution.*

References

1. Von zur Gathen J., Gerhard J. *Modern computer algebra*. Cambridge, University Press, 2013. p. 808.
2. Taranchuk V. B. *Osnovnye funktsii sistem komp'yuternoy algebry* [The basic functions of computer algebra systems]. Minsk, BSU Publ., 2013. 59 p. (in Russian).
3. Dyakonov V. V. *Entsiklopediya komp'yuternoy algebry* [Encyclopedia of computer algebra]. Moscow, DMK Press Publ., 2009. 1264 p. (in Russian).
4. Gurskiy D. A. *Vychisleniya v Mathcad* [Calculation in Mathcad]. Minsk, Novoye znaniye Publ., 2003. 814 p. (in Russian).
5. *Fizicheskiye velichiny. Spravochnik* [Physical data. Reference]. Ed. by I. S. Grigor'ev, E. Z. Meylikhov. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 1232 p. (in Russian).
6. Savel'ev I. V. *Kurs obshchey fiziki* [General physics]. Vol. 3. Moscow, Nauka Publ., 1979, 304 p. (in Russian).
7. Kittel Ch. Thermal Physics New York, Wiley, 1969. 418p. (Russ. Ed.: Kittel' Ch. *Statisticheskaya termodinamika*. Moscow, Nauka Publ., 1977. 336 p.)
8. Greiner W., Neise L., Stocker H. *Thermodynamics and statistical mechanics*. New York Springer Verlag, 1995. 464 p.
9. Tipler P. A., Mosca G. *Physics for scientists and engineers* New York, W. H. Freeman and company, 2008. 1412 p.
10. Demtroeder W. *Atoms, molecules and photons*. Berlin, Springer, 2006. 572 p.

Pipich P. V., Novosibirsk State University (ul. Russian, 35, Novosibirsk, Russian Federation, 630058). E-mail pipich@ngs.ru