

РАЗРАБОТКА MATHCAD-АЛГОРИТМА ДЛЯ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ ВТОРОГО ВИРИАЛЬНОГО КОЭФФИЦИЕНТА

Чаплинский Е. Е., Кулинчик И. Н., Довгэль Т. В.

Гродненский государственный медицинский университет, Беларусь

Кафедра медицинской и биологической физики

Научный руководитель – к. физ.-м. н., доцент Клинецевич С.И.

Актуальность работы. Использование приближенного вириального уравнения состояния реальных газов требует знания второго вириального коэффициента (ВВК). Значение ВВК может быть получено экспериментально или расчетным путем.

Расчет ВВК базируется на известной из статистической физики формуле:

$$B_2 = 2\pi N_A \int_0^{\infty} r^2 \left(1 - e^{-\frac{U_p(r)}{kT}}\right) dr \quad (1)$$

где r – расстояние между молекулами, $U_p(r)$ – межмолекулярный потенциал, N_A – число Авогадро, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. Интеграл в формуле (1) не вычисляется аналитически и может быть рассчитан лишь приближенно. В настоящее время развитие численных методов и компьютерных технологий превращают задачу вычисления ВВК в учебную проблему, которая может быть решена студентами первых курсов, изучающих элементы интегрального исчисления.

Целями данной работы являются: 1) разработка численного алгоритма расчета ВВК с использованием технологии математического автоматизированного проектирования, реализованной в пакете MathCad корпорации Parametric Technology Corporation; 2) сравнение результатов численного интегрирования по разработанному алгоритму с результатами стохастического интегрирования по методу Монте-Карло (МК).

Задачи и методы исследования. Для достижения этих целей нами решались следующие задачи: а) выбор модели межмолекулярного потенциала взаимодействия и его аппроксимация; б) разработка алгоритма численного интегрирования выражения (1) по квадратурным формулам Симпсона и Гаусса; в) разработка алгоритма стохастического интегрирования (2) методом Монте-Карло (МК); г) адаптация разработанных алгоритмов к языку программирования пакета MathCad, создание рабочей MathCad-программы; д) отладка MathCad-программ на простейших подинтегральных функциях выражения (2), имеющих аналитическое решение; е) численные расчеты ВВК для гелия, водорода, аргона, криптона, ксенона и др.; з) сравнение результатов численных расчетов, полученных по квадратурным формулам интегрирования и методом МК.

Результаты и выводы.

Для численных расчетов по формуле (1) нами использовался в качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия модельный парный потенциал Леннарда-Джонса (ЛД).

Нами в среде пакета MathCad разработан алгоритм численного интегрирования по формуле (1), в которой в качестве $U_p(r)$ используется потенциал ЛД. Интегрирование осуществлялось по классическим квадратурным формулам и методом МК.

Так как межмолекулярный потенциал на расстояниях $2,5\sigma - 3\sigma$ и более практически равен нулю, то бесконечный верхний предел интегрирования в формуле (1) заменялся расстоянием $r=20\sigma$. Точность расчетов контролировалась с помощью разработанного критерия. Число точек интегрирования подбиралось экспериментальным путем и равнялось 100 000 для классического интегрирования и 1 000 000 точек для метода МК.

Сопоставление численных величин ВВК с известными литературными данными показало удовлетворительное совпадение. Методика расчетов, разработанный алгоритм и компьютерные программы могут быть использованы для вычисления ВВК с другими моделями межмолекулярного потенциала (Морзе, Сазерленда и др.), а также в учебном процессе для организации виртуального лабораторного практикума и в системе управляемой самостоятельной работы студентов.

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ОРГАНА СЛУХА И ЗРЕНИЕ У ЗДОРОВЫХ ИСПЫТУЕМЫХ

Чернявская Д.А.

Гродненский государственный медицинский университет, Беларусь

Кафедра нормальной физиологии

Научные руководители – канд. мед. наук Орехов С.Д., канд. мед. наук Дорохина Л.В.

Актуальность. Давно замечено, что слепые демонстрируют повышенные возможности слухового анализатора, а глухие – зрительного. Однако при детальном изучении больших выборок обнаруживается, что значительная доля слепых имеют проблемы со слухом, а глухих – со зрением. Причем это проявляется сильнее у детей, среди которых преобладают случаи врожденной нейродегенерации различного генеза [1]. У лиц с нарушениями интеллекта частота встречаемости расстройства слуха составляет 46%, зрения – 38,4% [2]. В Непале у детей школьного возраста, страдающих глухотой, общая частота заболеваний глаз составила 28%, частота нарушений рефракции – 16,48%, что существенно выше по сравнению со здоровыми детьми [3]. В группе глухих параолимпийцев острота зрения была выше, чем в контрольной группе [4]. С помощью внутримозговых электродов показано, что одновременное воздействие зрительных и слуховых речевых сигналов тормозит восприятие речи посредством конкуренции сигналов на уровне вторичных сенсорных полей с вовлечением множественных кросс-модальных механизмов [5]. В доступной литературе нами не обнаружено работ, в которых проводилось сравнение остроты слуха и зрения у условно здоровых молодых испытуемых.

Цель работы – анализ связей между остротой слуха и зрения у студентов медицинского университета. Для достижения поставленной цели были