
Stevan Nad-Perge

Simulacija idealnog gasa u dve dimenzije

Urađena je računarska simulacija modela idealnog gasa u ravni. Simulacija je testirana pomoću dva numerička eksperimenta, čime je pokazana njena adekvatnost. Podaci dobijeni simulacijom upoređeni su sa teorijski očekivanim rezultatima. Slaganje ovih rezultata daje potvrdu primenljivosti ove simulacije u ispitivanju fizičkih pojava u realnom gasu.

Uvod

Prema molekulsco-kinetičkoj teoriji, model idealnog gasa predstavlja sistem od velikog broja molekula koji se kreću haotično. U modelu su molekuli zamišljeni kao kuglice zanemarljive zapremine, čija je međusobna interakcija, kao i interakcija sa zidom suda u kojem se nalaze, predstavljena apsolutno elastičanim sudarom. Zanemareno je vreme interakcije kao i dejstvo molekula na daljinu, odnosno potencijalna energija molekula, pa se ukupna unutrašnja energija ovog gasa svodi na zbir kinetičkih energija pojedinih čestica. Iako jednostavan, ovaj model veoma dobro opisuje makroskopske veličine koje karakterišu realan jednoatomski gas kao što su pritisak i temperatura.

Postoje izvesne specifičnosti vezane za dvodimenzionalnost simulacije. Naime, u dvodimenzionalnom svetu pojmovi zapremina i površina ekvivalentni su sa pojmovima površina i obim u realnom svetu odnosno, u slučaju pravougaonog suda dimezija a i b zapremina je ab , a obim $2(a + b)$. Broj stepena slobode jednoatomskog gasa u ravni je 2.

Opis simulacije

Simulacija je napisana u programskom jeziku Pascal. Pri startovanju programa iz ulazne datoteke učitavaju se podaci koji sadrže dimenzije suda kao i koordinate, brzine i efektivne poluprečnike svih molekula. Zatim se

*Stevan Nad-Perge
(1981), Kikinda,
Petrovačka 22, učenik
2. razreda Gimnazije
Dušan Vasiljev u
Kikindi*

ponavlja sledeći proces: Prvo se registruju molekuli koji su se sudarili međusobno ili sa zidom. Potom se menjaju njihove brzine (prema formuli koje važe za apsolutno elastičan sudar). Na kraju se vrši korekcija koordinata molekula, tako da sledeće stanje sistema bude za neki mali vremenski interval dt starije od prethodnog, tj. u slučaju molekula sa koordinatama x i y koji se u jednoj iteraciji nije sudario, u sledećoj njegove koordinate će iznositi:

$$x_n = x + v_x dt, \quad y_n = y + v_y dt$$

gde su: x_n i y_n – nove koordinate molekula, v_x i v_y – projekcije brzine molekula na x odnosno y osu.

Molekuli su se sudarili ako je ispunjena relacija:

$$r_1 + r_2 \leq \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$$

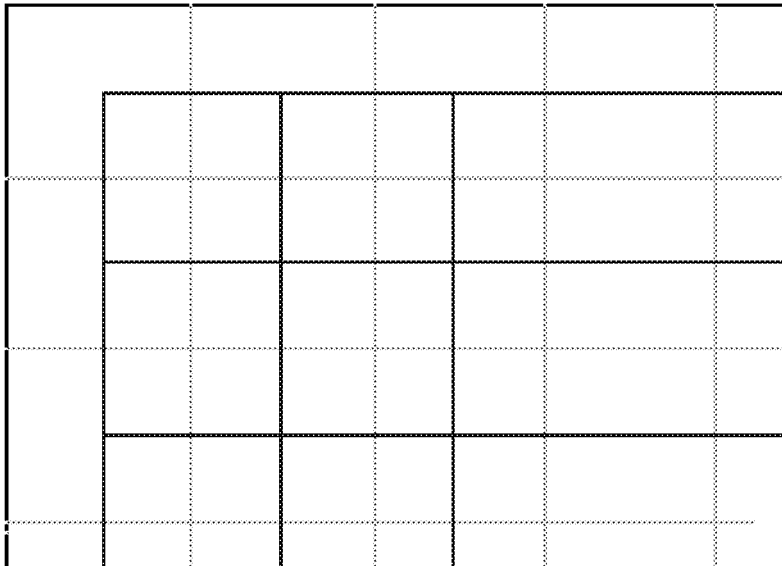
gde su: r_1, x_1, y_1 – poluprečnik i koordinate prvog molekula, a r_2, x_2, y_2 – poluprečnik i koordinate drugog molekula.

Pošto se ova provera vrši samo na početku svake iteracije, može se desiti da se ponekad pojedini molekuli delimično preklape. Ovo se događa kada se molekuli nalaze na rastojanjima koja su manja od korekcije koordinata i pri tom se kreću jedan drugom u susret. Ako se uzme dovoljno mali vremenski interval dt , to preklapanje se može zanemariti, jer je tada korekcija koordinata (a samim tim i moguće preklapanje) mnogo manja od dimenzija molekula (u konkretnom slučaju dt ???). Da bi simulacija bila korektna, tj. da bi iz nje dobili rezultate koji se što bolje poklapaju sa teorijom, broj molekula u simulaciji treba da bude što veći, jer je to predviđeno molekulsko-kinetičkom teorijom. Međutim, pri velikom broju čestica javlja se problem brzine simulacije, odnosno ona postaje isuviše spora za vršenje ozbiljnijih numeričkih eksperimenata. Glavni razlog za to je što broj ponavljanja prethodno navedene nejednakosti u simulaciji raste sa kvadratom broja molekula. Naime, u prvoj verziji programa u svakoj iteraciji je vršena provera sudara za svaki par molekula. Broj provera u tom slučaju iznosi:

$$\frac{N(N-1)}{2},$$

gde je N – ukupan broj molekula.

Ova metoda se pokazala neefikasnom čak i pri manjem broju čestica (nekoliko stotina), pa je zato u programu korišćena aproksimacija kojom se ovaj problem donekle rešava. Naime, sud pravougaonog oblika u kome se nalazi gas je podeljen na kvadratne sektore, pa se provera sudara molekula izvršava samo ako se nalaze u istom sektoru. Međutim, da bi se registrovao sudar molekula koji se nalaze blizu granice sektora, sektori se moraju preklapati. Konačan izgled podeljenog suda dat je na slici 1.



Slika 1.
Izgled dela
podeljenog suda.

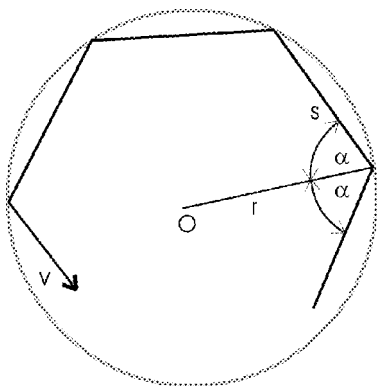
Figure 1.
View of the part of
divided reservoir.

Dužina sektora mora biti veća od $20 v_s dt + 2 r_m$ (v_s – srednja brzina molekula, r_m – poluprečnik najvećeg molekula) da ne bi došlo do sudara čestica iz različitih sektora (i u ovom slučaju može doći do takvog sudara ako se molekuli kreću direktno jedan prema drugom brzinama koje su veće od $10 v_s$, ali je verovatnoća tog događaja veoma mala). Pri korišćenju ove aproksimacije, brzina programa se značajno povećeva, jer se broj provera smanjuje više puta. Konkretno u ovom programu, pri radu sa 3000 čestica, u većini slučajeva je sud bio podeljen na 1000 sektora. Prosečan broj molekula po sektoru je bio 6, jer se svaki molekul istovremeno nalazio u 2 sektora. Broj provera po iteraciji pri tom rasporedu je iznosio 15000 što je oko 300 puta manje od broja provera koja bi bila vršena da sud nije podeljen na sektore. Da bi se proverila verodostojnost ove simulacije bilo je potrebno napraviti više numeričkih eksperimenata sa simulacijom i dobijene podatke uporediti sa rezultatima koje predviđa teorija.

Svi numerički eksperimenti rađeni su sa indentičnim molekulima efektivnog prečnika 0.2 nm i mase $6.64 \cdot 10^{-27}$ kg (podaci odgovaraju masi i efektivnom prečniku atoma He; Čaluković i Kaldeburg 19**). Pošto je broj molekula u simulaciji ipak mali, u poređenju sa brojem molekula koji učestvuju u realnim eksperimentima ovog tipa, pritisak gasa veoma varira, pa je meren prosečan pritisak na svakih $1.5 \cdot 10^{-27}$ s (u drugom numeričkom eksperimentu sa pokretnim zidom ovo je bio najveći vremenski interval pri kojem se zapremina i površina suda nije značajno menjala). I ovako meren pritisak varira, ali mnogo manje.

Prvi numerički eksperiment:
merenje pritiska dvodimenzionalnog idealnog gasa

Analogno izvođenju formule za pritisak idealnog gasa u tri dimenzije, može se izvesti formula i za pritisak dvodimenzionalnog gasa. Uzmimo da se gas nalazi u sudu kružnog oblika poluprečnika r . Promena komponente impulsa jednog molekula, usled sudara sa zidom suda, iznosi $2mv \cos \alpha$ gde je α ugao pod kojim je molekul udario u zid. Iz III Njutnovog zakona sledi da je impuls kojim molekul deluje na zid $2mv \cos \alpha$.



Slika 2.
Deo trajektorije molekula:
 r – poluprečnik suda
 s – put koji molekul pređe između dva sudara sa zidom
 O – centar suda
 α – upadni ugao molekula
 v – brzina molekula.

Figure 2.
A part of molecule trajectory.

Sa slike se vidi da je put koji molekul pređe između dva sudara sa zidom $2r \cos \alpha$ pa je vreme Δt za koje molekul pređe taj put $\frac{2r \cos \alpha}{v}$.

Broj sudara za neko vreme t iznosi $\frac{t}{\Delta t} = \frac{vt}{2r \cos \alpha}$, a zbir intenziteta svih impulsa kojim je molekul delovao na zid za to vreme je:

$$2mv \cos \alpha \frac{vt}{2r \cos \alpha} = \frac{mvt^2}{r},$$

Dok je srednja sila delovanja jednog molekula na zid

$$F = \frac{P_{uk}}{t} = \frac{mvt^2}{rt} = \frac{mv^2}{r},$$

usrednjeno za sve molekule u sudu je:

$$F_{sr} = \frac{m}{r} \sum_{i=1}^N v_i^2 = N v_{sr}^2 \frac{m}{r},$$

gde je v_{sr} – srednja kvadratna brzina svih molekula.

Pritisak gasa na zidove suda je:

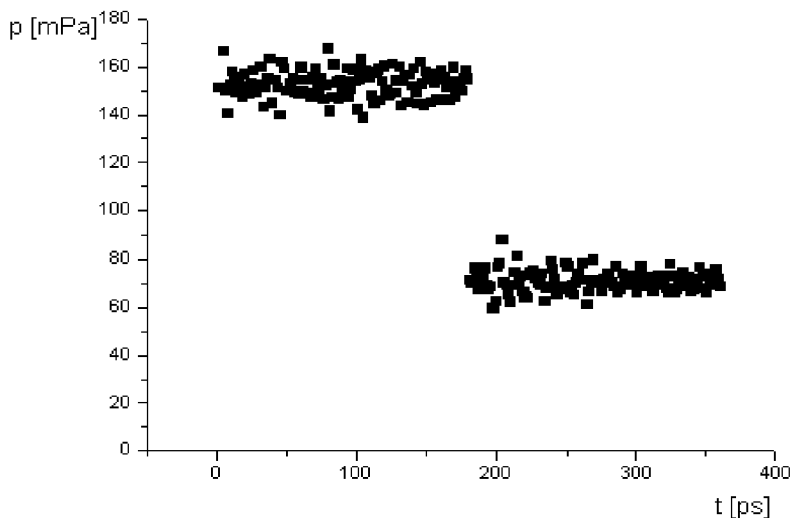
$$p = \frac{F_{sr}}{S} = N \frac{mv_{sr}^2}{2r^2 \pi} = \frac{1}{2} \frac{N}{r^2 \pi} mv_{sr}^2 = \frac{1}{2} \frac{N}{V} mv_{sr}^2,$$

gde je S površina, a V zapremina dvodimenzionalnog suda (u ovom slučaju $S = 2r\pi$, a $V = r^2\pi$).

Iako je ovde formula izvedena u slučaju kada je sud kružnog oblika ona važi nezavisno od oblika suda. Iz izvedene formule sledi da je:

$$p = \frac{E_{ku}}{V}$$

gde je E_{ku} ukupna kinetička energija sistema. Cilj ovog eksperimenta je bio da se potvrdi ova formula. Gas unutrašnje energije 1030 eV se nalazio u sudu dimenzija 50×25 nm. Iz prethodne formule dobija se da je $p = 133$ mPa. Posle 180 ps zapremina se povećala dva puta, pa je vrednost pritiska iznosila 66.5 mPa. Eksperimentalno dobijena zavisnost pritiska u funkciji vremena data je na grafiku (slika 3).



Slika 3.
Eksperimentalno
dobijena zavisnost
pritiska od vremena.

Figure 3.
Pressure versus time –
experimental data.

Sa grafika se može proceniti da je pritisak u prvom slučaju (za prvih 180 ps) 155 ± 15 mPa, a drugom (posle povećanja zapremine) 75 ± 15 mPa. Vidi se da su sva merenja prvom slučaju bila veća od rezultata koji predviđa teorija i da je relativna greška srednje vrednosti pritiska 17% dok je u drugom slučaju iznosila 13%. Iz dobijenih rezultata može se zaključiti da simulacija zadovoljava navedenu formulu.

Drugi numerički eksperiment: eksperimentalno određivanje Poasonove konstante

Prvi zakon termodinamike može se predstaviti formulom:

$$Q = A + \Delta U$$

gde je:

Q – količina toplote dovedena sistemu,

A – rad protiv spoljnih sila,

ΔU – promena unutrašnje energije sistema (Raspopović et al. 19**)

Za adijabatski proces je $Q=0$ pa je $A=-\Delta U$. Pošto je $dA=p dV$ i $dU=n C_v dt$ (n – broj molova gasa, C_v – molarni toplotni kapacitet gasa pri stalnoj zapremini) sledi da je $p dV = -n C_v dT$. Iz formule $pV = E_{ku}$ iz prethodnog eksperimenta sledi $pV = nRT$ (R – univerzalna gasna konstanta, T – apsolutna temperatura) jer važi:

$$E_{ku} = \frac{i}{2} nRT$$

gde je i – broj stepena slobode gasa, u ovom slučaju 2. Pomoću ovih izraza može se izvesti Poasonova formula:

$$pV = nRT \Rightarrow p = \frac{nRT}{V} \Rightarrow p dV = -n C_v dT \Rightarrow \frac{dV}{V} = -\frac{C_v}{R} \frac{dT}{T}$$

Iz dobijene jednakosti sledi:

$$\int \frac{dV}{V} = -\frac{C_v}{R} \int \frac{dT}{T} \Rightarrow \ln V = -\frac{C_v}{R} \ln T + C$$

gde je C – konstanta koja zavisi od početnih uslova. Odavde se dobija da važi:

$$V = C_1 T^{-\frac{C_v}{R}} \Rightarrow p = \frac{nR}{C_1} T^{\frac{C_v+R}{R}} \Rightarrow pV^{\frac{C_v+R}{R}} = nR C_1^{\frac{R}{C_v}}$$

gde je $C_1 = e^C$.

Iz poslednje jednakosti se vidi da njena desna strana predstavlja konstantu nezavisnu od p , V i T pa je i izraz na njenoj levoj strani konstantan. Pošto iz Majerove relacije sledi da je $C_p = C_v + R$, gde je C_p molarni toplotni kapacitet pri stalnom pritisku (Mitrović 19**) i ako u gornju relaciju uvedemo zamenu $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ dobijamo da je $pV = \text{const}$, tj. Poasonovu formulu

(γ – Poasonova konstanta). Teorija predviđa da je $\gamma = \frac{i+2}{i}$, tj. u ovom slučaju je $\gamma = 2$. Iz ovog osnovnog oblika Poasonove formule sledi:

$$T V^{\gamma-1} = \text{const.} \text{ i } T^{\gamma} p^{\gamma-1} = \text{const.}$$

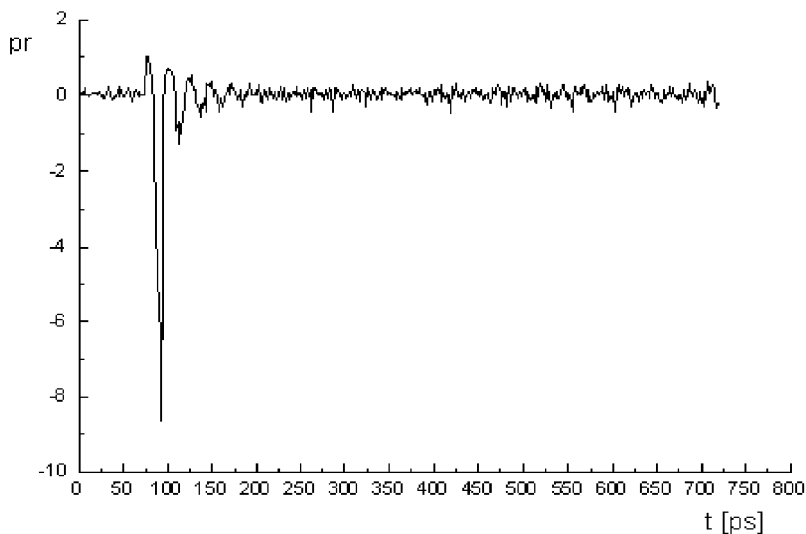
Da bi se eksperimentalno odredila ova konstanta, potrebno je pomerati jednu ivicu zida, tj. menjati zapreminu suda i pri tom meriti pritisak i temperaturu (unutrašnju energiju sistema). Međutim, da bi navedene relacije važile, proces menjanja zapremine mora biti kvazistatički (brzina zida mora biti dovoljno mala da bi molekuli u svakom trenutku bili homogeno raspoređeni). To znači da moramo proceniti maksimalnu brzinu

pokretnog zida. Da bi se to uradilo, izveden je jednostavan ogled. U sudu dimenzija 50×25 nm, posmatrana je relativna razlika pritisaka između zidova dužine 50 nm koja je računata po formuli:

$$p_r = \frac{p_n - p_p}{p_n}$$

gde je p_r – relativna razlika pritiska, p_n – pritisak na nepokretnom zidu, p_p – pritisak na pokretnom zidu.

Zatim je jedan od zidova naglo pomeren, posle čega su dimenzije suda bile 50×50 nm. Na osnovu izmerenog vremena potrebnog za relaksaciju sistema (sistem je relaksiran kada je relativna razlika pritisaka približno jednaka nuli) može se odrediti maksimalna brzina zida. Eksperimentalno dobijena zavisnost relativne razlike pritisaka u funkciji vremena data je na grafiku.



Slika 4.
Zavisnost relativne razlike pritiska od vremena.

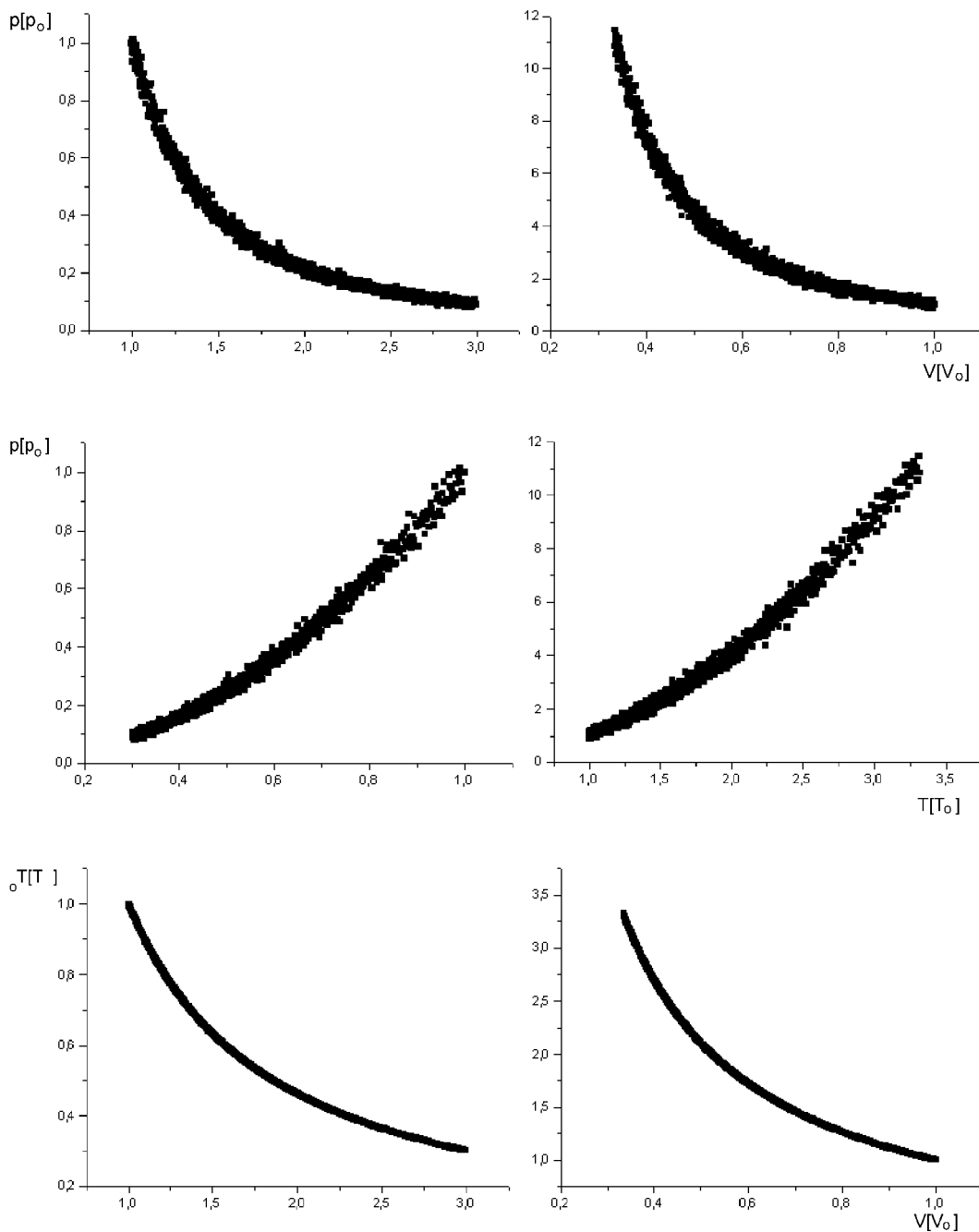
Figure 4.
Relative difference of pressure as a function of time – experimental data.

Sa grafika se može proceniti da vreme relaksacije iznosi 150 ps (u 75 ps zid je pomeren, a do 225 ps uspostavljeno je stacionarno stanje), pa se maksimalna brzina zida može izračunati po formuli:

$$v_z = \frac{s}{t},$$

gde je v_z – maksimalna brzina zida, s – pomeraj zida u našem slučaju $s = 25$ nm, t – vreme potrebno za relaksaciju sistema.

Ako se ovako postupi, dobija se da maksimalna brzina zida iznosi 166.67 m/s. U eksperimentu brzina zida iznosila je 1% početne srednje brzine molekula, odnosno 35 m/s. Sud dimenzija 50×25 nm povećavao je zapreminu navedenom brzinom do dimenzija 50×75 nm. Pri tome je



Slika 5.
Dobijeni dijagrami.

Figure 5.
Obtained diagrams.

merena relativna promena pritiska i kinetičke energije sistema (koja je srazmerna temperaturi), u odnosu na početne uslove. Zatim je promenjen smer brzine i ponovo su vršena merenja do povratka suda u početno stanje. Izgled dobijenih pV-dijagrama prikazan je na graficima (V_0 , T_0 , p_0 su početni zapremina, temperatura i pritisak).

Sa dobijenih grafika lako se može odrediti γ . Ako Poasonovu formulu $pV^\gamma = C$ (C – konstanta, nezavisna od p, V i T) logaritmujemo, dobija se:

$$\ln p + \ln V = \ln C \Rightarrow \ln p = -\ln V + \ln C.$$

Navedena jednačina ukazuje na linearnu zavisnost logaritma pritiska i logaritma zapremine. Koeficijent pravca zavisnosti je $-\gamma$. Da bi se odredila ova konstanta, odgovarajuće ose grafika treba logaritmovati, kroz dobijeni grafik provući pravu i odrediti joj koeficijent pravca. Ako se taj postupak primeni na oba grafika, u oba slučajeva se dobija da je $\gamma = 2.170 \pm 0.007$. Na sličan način se određuje γ sa pT, odnosno sa TV dijagrama, samo što je u prvom slučaju koeficijent pravca prave koja se dobija logaritmovanjem koordinatnih osa $\frac{\gamma}{\gamma-1}$, dok je u drugom $-\gamma+1$. Dobi-
jeni pT i TV dijagrami prikazani su na graficima.

Sa pV dijagrama dobijena vrednost Poasonove konstante iznosi 2.01 ± 0.01 , dok je za TV dijagrame $\gamma = 2.090 \pm 0.005$. Pošto navedene vrednosti odstupaju za manje od 10% od predviđenog rezultata, sledi da se ovom simulacijom može verno simulirati adijabatski proces.

Zaključak

Izvršeni eksperimenti su pokazali dobro slaganje podataka dobijenih simulacijom i rezultata koji su teorijski predviđeni. Uprkos maloj brzini simulacije, ona se može upotrebiti u nekim slučajevima koji se ne mogu rešiti teorijski (na primer za određivanje zavisnosti pritiska u funkciji zapremine kada pomeranje zida nije kvazistatički proces).

Literatura

Raspopović, M., Božin, S., Danilović, E. 19***. *Fizika za II razred gimnazije*. Beograd:

Mitrović, M. M. 199*. *Zbirka zadataka vezanih za takmičenja iz fizike (1990-1996) 2. razred*. Beograd:

Čaluković, N. Kaldeburg, N. *Fizika II (zbirka zadataka za 2. razred gimnazija i tehničkih škola)*. Beograd:

Žižić, B. 19***. Kurs opšte fizike (molekularna fizika, termodinamika, mehanički talasi)*. Beograd:

Stevan Nađ-Perge

Simulation of Ideal Gas in Two Dimensions

Computer simulation of ideal gas in two dimensions is done. Model is tested by two well known numerical experiments: determination of pressure value in 2D model and obtaining of Poisson constant for the same gas. Data obtained with numerical experiment are compared with theretically predicted results. Results matching indicate that simulation can be used to model processes in real gas too. In spite of great time requirements, this simulation can be applied in cases that can not be solved analitically, e.g. determination of pressure dependency on volume in quasistatic process.

