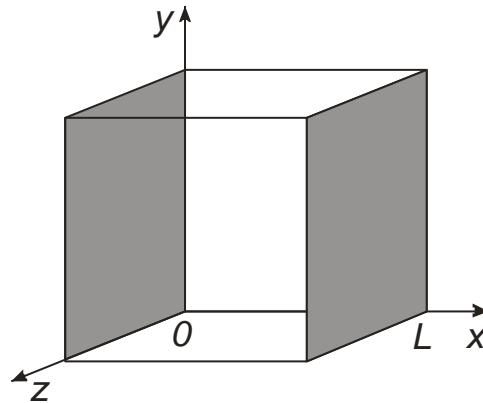


Модель ідеального газу

Завдання: побудувати просту модель, яка дозволяє перевірити в комп'ютерному експерименті газові закони.

Як відомо, наближення ідеального газу означає нехтування енергією взаємодії між молекулами. З іншого боку, взаємодія між молекулами, принаймні у вигляді зіткнень, є необхідною умовою встановлення рівноваги. Тому для „відкриття” газових законів пропонується наступна найпростіша модель.



Газ представляється як N матеріальних точок (молекул) масою m , які можуть рухатись всередині посудини у вигляді куба розміром $L \times L \times L$, що має об'єм $V = L^3$. Кожна молекула зазнає зіткнень через один і той же інтервал часу t_c (зіткнення англійською – “collision”). Фактично молекула зазнає зіткнення з іншою молекулою, але в даній моделі деталі зіткнення не розглядаються. Натомість вважається, що в результаті зіткнення молекула “втрачає пам'ять” про свій попередній рух і “починає життя спочатку”: її швидкість стає випадковою величиною, при цьому середній квадрат швидкості визначається теоремою про рівномірний розподіл енергії за ступенями вільності:

$$\overline{v^2} = \frac{3k_B T}{m} \quad (1)$$

де T – задана температура газу.

З цією випадковою швидкістю молекула летить по прямій до наступного зіткнення через час t_c . Якщо “по дорозі” молекула натикається на стінку, то вона відбивається за законами пружного відбивання і передає стінці імпульс. Наприклад, якщо молекула відбивається від стінок, що паралельні площині YOZ , тобто від площин $x=0$ або $x=L$, то відповідно знак проекції швидкості на вісь X змінюється на протилежний $v'_x = -v_x$, а стінці передається імпульс $2m \cdot |v_x|$. У нашій моделі ми слідкуємо саме за рухом молекул вздовж осі X (взаємодія зі стінками $x=0$, $x=L$) і не враховуємо зіткнення у двох інших напрямках (зі стінками $y=0$, $y=L$, $z=0$, $z=L$), оскільки при таких зіткненнях проекція швидкості на вісь X не змінюється. Відповідно, середній квадрат швидкості (1) для однієї осі визначатиметься як $\overline{v_x^2} = \frac{k_B T}{m}$.

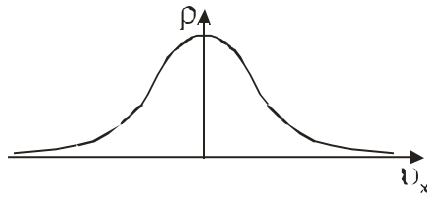
Для обчислення тиску використовується суматор імпульсів, переданих молекулами при попаданні на праву чи ліву стінки: $S(t) = \sum_{i=1}^M 2m |v_x^i|$, де M - загальна кількість ударів об стінки за час t . Накопичена сума ділиться на час t і на площу обох стінок $2L^2$, даючи тиск:

$$p = \frac{S(t)}{2L^2 t}. \quad (2)$$

Для запису алгоритму залишилось:

- 1) задати закон, за яким розігрується випадкова проекція швидкості після зіткнення;

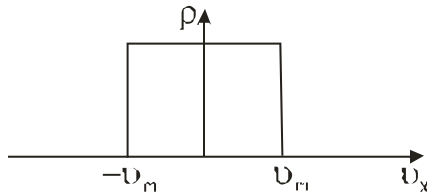
2) задати закон руху від зіткнення до зіткнення, враховуючи можливість відбивання від стінок.



1. Строго кажучи, проекцію швидкості після зіткнення потрібно генерувати відповідно до розподілу Максвелла для густини імовірності (Розділ 2):

$$\rho(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right). \quad (3)$$

Однак, як ми переконаємось нижче, для отримання правильних газових законів годиться будь-який розподіл, який забезпечує правильний середній квадрат для проекції на вісь X



($\overline{v_x^2} = \frac{kT}{m}$). Ми пропонуємо простий "шкільний" розподіл

$$\rho(v_x) = \begin{cases} \frac{1}{2v_m}, & |v_x| \leq v_m \\ 0, & |v_x| > v_m \end{cases}. \quad (4)$$

Величину v_m визначимо з умови (1)

$$\overline{v_x^2} = \frac{kT}{m} = \int v_x^2 \rho(v_x) dv_x = \frac{1}{2v_m} \int_{-v_m}^{v_m} v_x^2 dv_x = \frac{v_m^2}{3},$$

так що

$$v_m = \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (5)$$

Тоді величину v_x можна генерувати просто як

$$v_x = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \cdot (2 \cdot \text{random} - 1). \quad (6)$$

2. Зміна координат через час t_c очевидна, якщо молекула не потрапила протягом цього часу на стінку:

$$x_{new} = x_{old} + v_x t_c. \quad (7)$$

Якщо "по дорозі" молекула зіткнулась з лівою стінкою, то, очевидно, x_{new} , отримане із (7), знаходиться за межами посудини і його потрібно перевизначити:

$$x'_{new} = \begin{cases} x_{new}, & x = 0 \\ 2L - x_{new}, & x = L \end{cases}. \quad (8)$$

Тестовий приклад. Температура $T = 300K$, маса молекули $m = 10^{-25} \text{ кг}$, кількість молекул $N = 10000$, лінійний розмір посудини $L = 10^{-6} \text{ м}$, загальний час експерименту $t_{total} = 10^{-6} \text{ с}$, крок по часу $dt = 10^{-10} \text{ с}$.

Завдання. Змінюючи по черзі L, T і N , самостійно «відкрити» всі газові закони.

Застереження. Якщо розміри посудини задавати дуже малими, то газові закони почнуть порушуватись. Наприклад, якщо при температурі 300 K і кількості частинок $N = 10$ взяти розмір посудини менше 1 нм , то відхилення результату комп'ютерного експерименту від теорії перевищує 15%. Причина «парадоксу» - полягає в тому, що в останньому випадку розміри посудини виявляються меншими за довжину вільного пробігу, тобто газ є ультрарозрідженим.

