

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ВЫСШАЯ ШКОЛА ПРОГРАММНОЙ ИНЖЕНЕРИИ

## М7Б. Статистика идеального газа

*Численное моделирование установления равновесия  
в системе молекул идеального газа в гравитационном поле*

Выполнили студенты Б13-402:

Жердев Егор

Савельев Данил

Долгопрудный

27 ноября 2025 г.

## Содержание

<b>Введение</b>	<b>2</b>
<b>Физическая постановка задачи</b>	<b>2</b>
<b>Физические модели</b>	<b>3</b>
Динамика молекул идеального газа . . . . .	3
Распределение Максвелла по скоростям . . . . .	5
Барометрическая формула . . . . .	9
Распределение Максвелла-Больцмана . . . . .	12
<b>Численные методы решения</b>	<b>14</b>
Алгоритм интегрирования . . . . .	14
Обработка столкновений . . . . .	14
Сбор статистики . . . . .	15
<b>Заключение</b>	<b>17</b>

## Введение

**Задача.** Исследование процесса установления термодинамического равновесия в системе идеального газа, находящегося в вертикальном сосуде в поле тяжести. Рассмотрение неравновесного начального состояния, когда все молекулы сосредоточены вблизи дна сосуда и имеют одинаковую кинетическую энергию.

**Цель работы:**

1. Провести численное моделирование движения молекул идеального газа в замкнутом вертикальном сосуде с учётом упругих столкновений со стенками и между собой
2. Получить распределения молекул по скоростям и по высоте в равновесном состоянии
3. Сравнить полученные распределения с теоретическими: распределением Максвелла по скоростям и барометрической формулой для распределения по высоте

## Физическая постановка задачи

Рассматривается система из  $N$  одинаковых молекул идеального газа массой  $m$  каждая, находящихся в вертикальном цилиндрическом сосуде высотой  $H$  и площадью основания  $S$  в гравитационном поле с ускорением  $g$ .

**Модель идеального газа предполагает:**

1. Молекулы – материальные точки (размеры много меньше расстояний между ними)
2. Столкновения молекул между собой и со стенками абсолютно упругие
3. Взаимодействие молекул происходит только при столкновениях (потенциальная энергия взаимодействия пренебрежимо мала)
4. Стенки сосуда непроницаемы и гладкие

**Начальные условия:**

- Все молекулы находятся в тонком слое вблизи дна:  $0 < z < h_0 \ll H$
- Все молекулы имеют одинаковую по модулю скорость  $v_0$ , направленную случайным образом
- Начальная кинетическая энергия каждой молекулы:  $E_0 = \frac{mv_0^2}{2}$

**Рассматриваются два режима:**

1. **Изолированная система:** полная энергия  $E = const$ , стенки теплоизолированы
2. **Терmostат:** температура стенок  $T = const$ , энергия системы флукутирует

## Физические модели

### Динамика молекул идеального газа

#### Уравнения движения

Каждая молекула движется под действием силы тяжести согласно **второму закону Ньютона**:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{g}$$

В декартовых координатах ( $x, y$  – горизонтальные,  $z$  – вертикальная ось):

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = 0 \\ \frac{dv_y}{dt} = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} = -g \end{cases} \quad \text{и} \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = v_x \\ \frac{dy}{dt} = v_y \\ \frac{dz}{dt} = v_z \end{cases}$$

Горизонтальные компоненты скорости сохраняются между столкновениями, вертикальная изменяется под действием гравитации.

#### Границные условия

Упругое отражение от стенок сосуда:

- **Дно** ( $z = 0$ ): при  $z \leq 0$  компонента  $v_z \rightarrow -v_z$
- **Крышка** ( $z = H$ ): при  $z \geq H$  компонента  $v_z \rightarrow -v_z$
- **Боковые стенки** (цилиндр радиуса  $R$ ): при  $\sqrt{x^2 + y^2} \geq R$  нормальная компонента скорости меняет знак

Для моделирования термостата при столкновении со стенкой скорость молекулы пересчитывается по распределению Максвелла при заданной температуре стенки  $T$ .

#### Столкновения между молекулами

При столкновении двух молекул выполняются законы сохранения:

##### 1. Сохранение импульса:

$$m\vec{v}_1 + m\vec{v}_2 = m\vec{v}'_1 + m\vec{v}'_2$$

##### 2. Сохранение кинетической энергии:

$$\frac{mv_1^2}{2} + \frac{mv_2^2}{2} = \frac{mv'_1^2}{2} + \frac{mv'_2^2}{2}$$

где  $\vec{v}_1, \vec{v}_2$  – скорости до столкновения,  $\vec{v}'_1, \vec{v}'_2$  – после столкновения.

Столкновение происходит при сближении молекул на расстояние меньше эффективного диаметра  $d$ .

### Алгоритм расчёта скоростей после столкновения:

Переход в систему центра масс:

$$\vec{V}_{cm} = \frac{\vec{v}_1 + \vec{v}_2}{2}$$

Относительная скорость:

$$\vec{v}_{rel} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$$

Единичный вектор вдоль линии центров:

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Новые скорости после упругого столкновения:

$$\begin{cases} \vec{v}'_1 = \vec{V}_{cm} + \frac{1}{2} [\vec{v}_{rel} - 2(\vec{v}_{rel} \cdot \vec{n})\vec{n}] \\ \vec{v}'_2 = \vec{V}_{cm} - \frac{1}{2} [\vec{v}_{rel} - 2(\vec{v}_{rel} \cdot \vec{n})\vec{n}] \end{cases}$$

### Полная энергия системы

В изолированной системе полная энергия сохраняется:

$$E_{total} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{mv_i^2}{2} + mgz_i \right) = const$$

где первое слагаемое – кинетическая энергия, второе – потенциальная энергия в поле тяжести.

## Распределение Максвелла по скоростям

В состоянии термодинамического равновесия распределение молекул по скоростям описывается **распределением Максвелла**.

### Распределение по вектору скорости

Плотность вероятности обнаружить молекулу со скоростью в интервале  $(\vec{v}, \vec{v} + d\vec{v})$ :

$$f(\vec{v}) = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m(\vec{v})^2}{2k_B T} \right)$$

где:

- $m$  – масса молекулы
- $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$  Дж/К – постоянная Больцмана
- $T$  – абсолютная температура

Распределение факторизуется по компонентам:

$$f(\vec{v}) = f(v_x)f(v_y)f(v_z)$$

где каждая компонента имеет нормальное распределение:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp \left( -\frac{mv_i^2}{2k_B T} \right), \quad i = x, y, z$$

### Распределение по модулю скорости

Интегрируя по всем направлениям, получаем распределение по модулю скорости  $v = |\vec{v}|$ :

$$f(v) = 4\pi v^2 \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{mv^2}{2k_B T} \right)$$

Это распределение называется **распределением Максвелла**.

### Характерные скорости

#### 1. Наиболее вероятная скорость (максимум распределения):

Найдём максимум  $f(v)$ , приравняв производную к нулю:

$$\frac{df}{dv} = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \frac{d}{dv} \left[ v^2 e^{-mv^2/(2k_B T)} \right] = 0$$

Применяя правило произведения:

$$2ve^{-mv^2/(2k_B T)} + v^2 e^{-mv^2/(2k_B T)} \cdot \left( -\frac{mv}{k_B T} \right) = 0$$

Вынося общий множитель  $ve^{-mv^2/(2k_B T)}$ :

$$ve^{-mv^2/(2k_B T)} \left( 2 - \frac{mv^2}{k_B T} \right) = 0$$

Нетривиальное решение ( $v \neq 0$ ):

$$2 - \frac{mv^2}{k_B T} = 0 \quad \Rightarrow \quad v_{prob} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$$

## 2. Средняя скорость:

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v f(v) dv = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^3 e^{-mv^2/(2k_B T)} dv$$

Замена переменной:  $u = \frac{mv^2}{2k_B T}$ , откуда  $v = \sqrt{\frac{2k_B T u}{m}}$ ,  $dv = \sqrt{\frac{k_B T}{2mu}} du$

$$\int_0^\infty v^3 e^{-mv^2/(2k_B T)} dv = \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^2 \int_0^\infty ue^{-u} du = \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^2 \cdot 1! = \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^2$$

Подставляя обратно:

$$\langle v \rangle = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^2 = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$$

## 3. Среднеквадратичная скорость:

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty v^2 f(v) dv = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^4 e^{-mv^2/(2k_B T)} dv$$

Аналогично, используя табличный интеграл:

$$\int_0^\infty v^4 e^{-mv^2/(2k_B T)} dv = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{5/2}$$

Откуда:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{3k_B T}{m} \quad \Rightarrow \quad v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$$

Соотношение между ними:

$$v_{prob} : \langle v \rangle : v_{rms} = \sqrt{2} : \sqrt{\frac{8}{\pi}} : \sqrt{3} \approx 1.41 : 1.60 : 1.73$$

## График распределения Максвелла

Из графика видно:

- Максимум распределения при  $v = v_{prob} = \sqrt{2k_B T/m}$
- Средняя скорость  $\langle v \rangle$  и среднеквадратичная  $v_{rms}$  больше наиболее вероятной

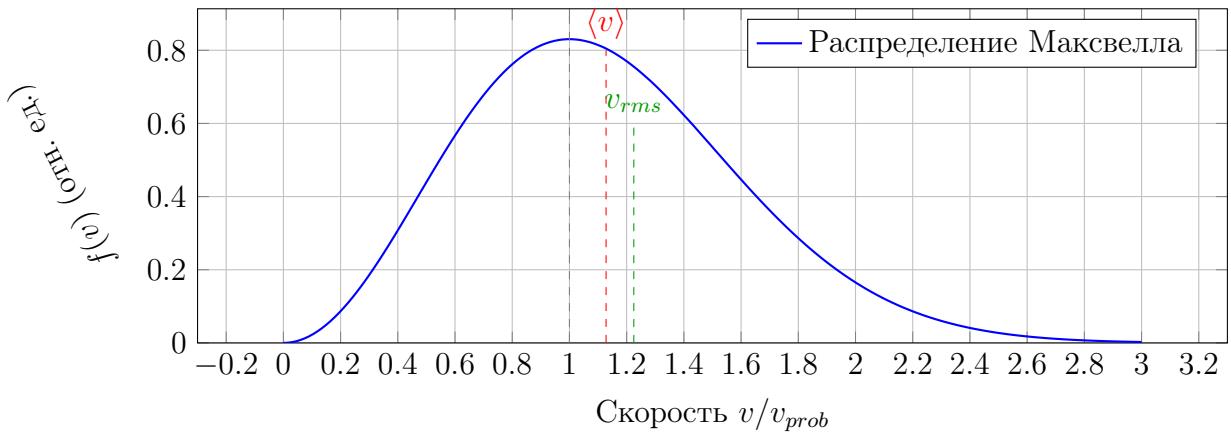


Рис. 1: Распределение Максвелла в безразмерных единицах ( $v/v_{prob}$ ). Показаны характерные скорости: наиболее вероятная  $v_{prob}$ , средняя  $\langle v \rangle \approx 1.128v_{prob}$  и среднеквадратичная  $v_{rms} \approx 1.225v_{prob}$

- Распределение асимметрично – имеет "хвост" в сторону больших скоростей

### Средняя кинетическая энергия

**Решение:** Вычислим среднее значение кинетической энергии:

$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{m}{2} \cdot \frac{3k_B T}{m} = \frac{3}{2} k_B T$$

Альтернативный вывод через интегрирование по компонентам:

$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \left\langle \frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2} \right\rangle = \frac{m}{2} (\langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle)$$

Для каждой компоненты (например,  $v_x$ ):

$$\langle v_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv_x^2/(2k_B T)} dv_x = \frac{k_B T}{m}$$

Используем табличный интеграл  $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$ .

Таким образом:

$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{m}{2} \cdot 3 \cdot \frac{k_B T}{m} = \frac{3}{2} k_B T$$

Это выражение связывает температуру со средней кинетической энергией поступательного движения молекул.

По теореме о равнораспределении энергии по степеням свободы:

$$\left\langle \frac{mv_i^2}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T, \quad i = x, y, z$$

На каждую поступательную степень свободы приходится энергия  $\frac{1}{2} k_B T$ .

## Проверка нормировки

**Решение:** Проверим, что распределение нормировано:

$$\int_0^\infty f(v)dv = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \int_0^\infty v^2 e^{-mv^2/(2k_B T)} dv$$

Используем табличный интеграл (гауссов интеграл):

$$\int_0^\infty v^2 e^{-av^2} dv = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

Где  $a = \frac{m}{2k_B T}$ :

$$\int_0^\infty v^2 e^{-mv^2/(2k_B T)} dv = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{(m/(2k_B T))^3}} = \frac{1}{4} \sqrt{\pi} \left(\frac{2k_B T}{m}\right)^{3/2}$$

Подставляем:

$$\int_0^\infty f(v)dv = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \cdot \frac{1}{4} \sqrt{\pi} \left(\frac{2k_B T}{m}\right)^{3/2} = \sqrt{\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} = 1$$

Это означает, что вероятность найти молекулу с любой скоростью равна единице.

## Барометрическая формула

В состоянии термодинамического равновесия газ в гравитационном поле имеет неоднородное распределение плотности по высоте.

### Вывод барометрической формулы

Рассмотрим элемент газа между высотами  $z$  и  $z + dz$ . Условие механического равновесия:

$$p(z + dz) \cdot S = p(z) \cdot S + \rho(z)gSdz$$

где  $p(z)$  – давление на высоте  $z$ ,  $\rho(z)$  – плотность массы.

Дифференцируя:

$$\frac{dp}{dz} = -\rho(z)g$$

Используем уравнение состояния идеального газа:

$$p = \frac{\rho}{m}k_B T = n(z)k_B T$$

где  $n(z) = \frac{\rho(z)}{m}$  – концентрация молекул (число молекул на единицу объёма).

Подставляем в условие равновесия:

$$\frac{d(nk_B T)}{dz} = -n(z)mg$$

Для изотермической атмосферы ( $T = const$ ):

$$\frac{dn}{dz} = -\frac{mg}{k_B T}n(z)$$

**Решение:** Разделяем переменные и интегрируем:

$$\frac{dn}{n} = -\frac{mg}{k_B T}dz$$

$$\ln n(z) - \ln n(0) = -\frac{mgz}{k_B T}$$

Получаем **барометрическую формулу**:

$$n(z) = n(0) \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right)$$

или в терминах давления:

$$p(z) = p(0) \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right)$$

### Характерная высота атмосферы

Введём масштаб высоты:

$$H_0 = \frac{k_B T}{mg}$$

Тогда барометрическая формула принимает вид:

$$n(z) = n(0)e^{-z/H_0}$$

### Распределение молекул по высоте

Вероятность найти молекулу на высоте между  $z$  и  $z + dz$  пропорциональна концентрации:

$$f(z) = \frac{1}{H_0} \exp\left(-\frac{z}{H_0}\right)$$

где нормировка:

$$\int_0^\infty f(z)dz = \int_0^\infty \frac{1}{H_0} e^{-z/H_0} dz = 1$$

**Решение:** Проверим нормировку:

$$\int_0^\infty \frac{1}{H_0} e^{-z/H_0} dz = \frac{1}{H_0} \int_0^\infty e^{-z/H_0} dz$$

Замена переменной:  $u = \frac{z}{H_0}$ ,  $dz = H_0 du$ :

$$\frac{1}{H_0} \int_0^\infty e^{-z/H_0} dz = \frac{1}{H_0} \cdot H_0 \int_0^\infty e^{-u} du = [-e^{-u}]_0^\infty = 0 - (-1) = 1$$

### Средняя высота молекулы

**Решение:** Вычислим среднюю высоту:

$$\langle z \rangle = \int_0^\infty z f(z) dz = \int_0^\infty \frac{z}{H_0} e^{-z/H_0} dz$$

Замена переменной:  $u = \frac{z}{H_0}$ ,  $z = H_0 u$ ,  $dz = H_0 du$ :

$$\langle z \rangle = \int_0^\infty \frac{H_0 u}{H_0} e^{-u} H_0 du = H_0 \int_0^\infty u e^{-u} du$$

Интегрирование по частям или используя табличный интеграл:

$$\int_0^\infty u e^{-u} du = \Gamma(2) = 1! = 1$$

Таким образом:

$$\langle z \rangle = H_0 \cdot 1 = H_0 = \frac{k_B T}{mg}$$

### Потенциальная энергия в среднем

$$\langle U \rangle = \langle mgz \rangle = mg \langle z \rangle = mg \cdot \frac{k_B T}{mg} = k_B T$$

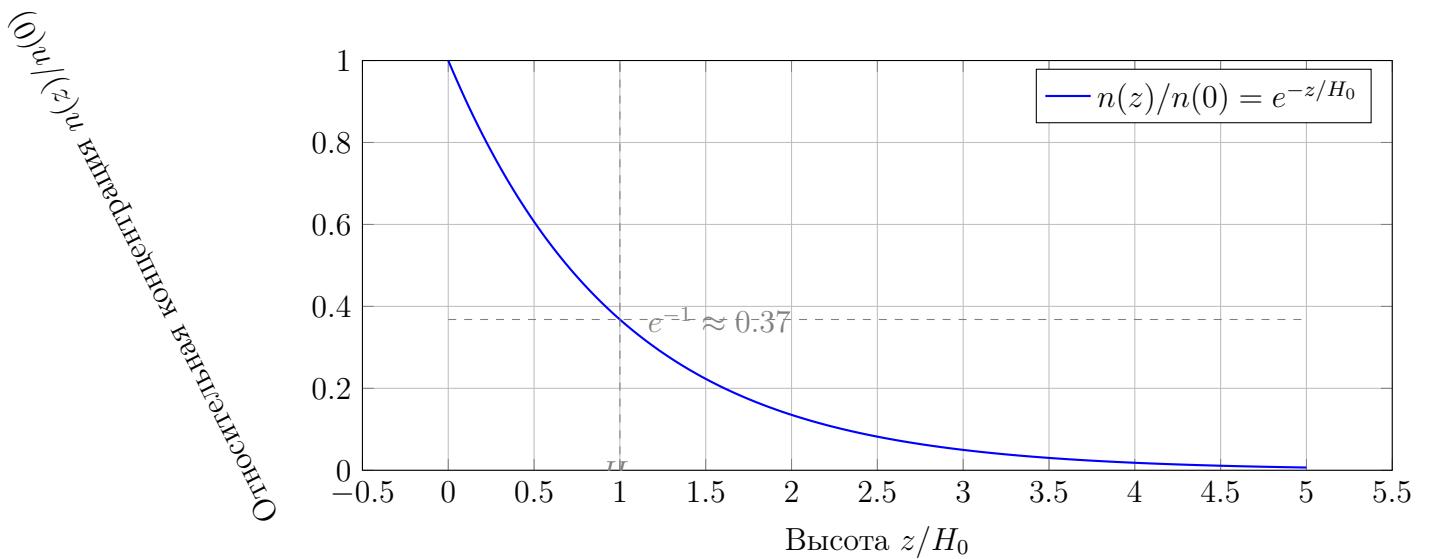


Рис. 2: Барометрическое распределение в безразмерных единицах. На высоте  $z = H_0$  концентрация уменьшается в  $e$  раз. Для воздуха при комнатной температуре  $H_0 \approx 8.5$  км

Это согласуется с теоремой о равнораспределении: на каждую "квадратичную" координату приходится энергия  $\frac{1}{2}k_B T$ , но в гравитационном поле потенциальная энергия линейна по высоте, и среднее значение равно  $k_B T$ .

### График барометрического распределения

Физический смысл:

- Экспоненциальное убывание концентрации с высотой
- Характерная высота атмосферы  $H_0 = k_B T / (mg)$  зависит от температуры и массы молекул
- Для воздуха при комнатной температуре  $H_0 \approx 8.5$  км
- Более лёгкие газы (водород, гелий) имеют большую высоту шкалы

## Распределение Максвелла-Больцмана

Полное распределение молекул в фазовом пространстве координат и импульсов описывается **распределением Максвелла-Больцмана**.

### Каноническое распределение Гиббса

Вероятность найти систему в состоянии с энергией  $E$  при температуре  $T$ :

$$P(E) \propto \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

Это называется **фактором Больцмана**.

### Распределение одной молекулы

Для одной молекулы в гравитационном поле полная энергия:

$$E(\vec{r}, \vec{v}) = \frac{mv^2}{2} + mgz$$

Плотность вероятности в фазовом пространстве:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = C \exp\left(-\frac{E(\vec{r}, \vec{v})}{k_B T}\right) = C \exp\left(-\frac{mv^2/2 + mgz}{k_B T}\right)$$

где  $C$  – константа нормировки.

**Решение:** Найдём константу нормировки  $C$  из условия:

$$\int_V d^3r \int_{-\infty}^{\infty} d^3v f(\vec{r}, \vec{v}) = 1$$

Разделяя экспоненты:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = C \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right)$$

Интегрируем по скоростям и координатам отдельно, получая:

$$C = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \cdot \frac{mg}{Sk_B T}$$

где  $S$  – площадь основания сосуда.

Это распределение факторизуется:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = f(\vec{v}) \cdot f(z)$$

где:

- $f(\vec{v})$  – распределение Максвелла по скоростям
- $f(z)$  – барометрическое распределение по высоте

## Распределение по энергии

Полная энергия молекулы  $E = \frac{mv^2}{2} + mgz$  может принимать значения от 0 до  $\infty$ .

Распределение по полной энергии в термодинамическом равновесии:

$$f(E) \propto \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

Множитель  $\sqrt{E}$  появляется из-за статистического веса – числа способов реализовать данную энергию.

## Средняя энергия молекулы

В трёхмерном пространстве для молекулы в гравитационном поле:

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle + \langle mgz \rangle$$

Из распределения Максвелла:  $\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{3}{2}k_B T$

Из барометрической формулы:  $\langle mgz \rangle = k_B T$

Итого:

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{3}{2}k_B T + k_B T = \frac{5}{2}k_B T}$$

## Связь с термодинамикой

Для системы из  $N$  молекул идеального газа:

- Внутренняя энергия (без учёта гравитации):  $U = N \cdot \frac{3}{2}k_B T = \frac{3}{2}NkT = \frac{3}{2}\nu RT$
- Теплоёмкость при постоянном объёме:  $C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3}{2}\nu R$
- Теплоёмкость при постоянном давлении:  $C_P = C_V + \nu R = \frac{5}{2}\nu R$
- Показатель адиабаты:  $\gamma = \frac{C_P}{C_V} = \frac{5/2}{3/2} = \frac{5}{3} \approx 1.67$

где  $\nu$  – число молей,  $R = N_A k_B$  – универсальная газовая постоянная.

## Численные методы решения

Численное моделирование системы молекул идеального газа основано на методе **молекулярной динамики** – пошаговом интегрировании уравнений движения всех частиц с учётом столкновений.

### Алгоритм интегрирования

Для интегрирования уравнений движения используется **метод Верле** (Verlet algorithm), который хорошо сохраняет энергию системы при длительном моделировании.

#### Базовый алгоритм Верле:

Положение частицы на следующем шаге вычисляется по формуле:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2$$

где  $\vec{a}(t) = \frac{\vec{F}(t)}{m}$  – ускорение.

#### Скоростная форма Верле (Velocity Verlet):

Более удобная модификация, которая явно вычисляет скорости:

$$\begin{cases} \vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 \\ \vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}[\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)]\Delta t \end{cases}$$

Для нашей задачи  $\vec{a} = \vec{g} = (0, 0, -g) = const$ , поэтому:

$$\begin{cases} \vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{g}\Delta t^2 \\ \vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{g}\Delta t \end{cases}$$

**Порядок точности:** метод имеет второй порядок точности по времени,  $O(\Delta t^2)$ .

### Обработка столкновений

#### Столкновения со стенками

На каждом временном шаге проверяются граничные условия:

- **Дно и крышка:** если  $z < 0$  или  $z > H$ , то:

$$v_z \rightarrow -v_z, \quad z \rightarrow \max(0, \min(z, H))$$

- **Боковая поверхность:** если  $\sqrt{x^2 + y^2} > R$ , то компонента скорости вдоль радиуса меняет знак:

$$\vec{v}_r \rightarrow -\vec{v}_r$$

Для режима термостата при столкновении со стенкой скорость пересчитывается по распределению Максвелла:

$$v_i \sim \mathcal{N} \left( 0, \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \right), \quad i = x, y, z$$

### Столкновения между молекулами

Используется метод жёстких сфер (hard sphere model):

1. На каждом шаге проверяются расстояния между всеми парами молекул
2. Если  $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| < d$  (эффективный диаметр), происходит столкновение
3. Скорости пересчитываются по формулам упругого столкновения (см. раздел 3.1)
4. Для избежания повторных столкновений частицы слегка разводятся:

$$\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i + \epsilon \vec{n}, \quad \vec{r}_j \rightarrow \vec{r}_j - \epsilon \vec{n}$$

где  $\vec{n}$  – единичный вектор вдоль линии центров,  $\epsilon$  – малая величина

### Оптимизация вычислений

Для ускорения проверки столкновений используется метод ячеек (cell lists):

- Пространство разбивается на кубические ячейки размером  $\geq d$
- Каждая молекула приписывается к ячейке по своим координатам
- Проверка столкновений производится только с молекулами из той же и соседних ячеек
- Сложность алгоритма снижается с  $O(N^2)$  до  $O(N)$

### Сбор статистики

После достижения равновесия (время релаксации  $t_{relax}$ ) начинается сбор статистических данных:

#### Распределение по скоростям

Строится гистограмма модулей скоростей  $v = |\vec{v}|$ :

$$n_v(v) = \text{число молекул со скоростями в интервале } [v, v + \Delta v]$$

Нормированная плотность вероятности:

$$f_{num}(v) = \frac{n_v(v)}{N \cdot \Delta v}$$

Сравнивается с теоретическим распределением Максвелла.

#### Распределение по высоте

Строится гистограмма положений по оси  $z$ :

$$n_z(z) = \text{число молекул на высотах в интервале } [z, z + \Delta z]$$

Нормированная плотность вероятности:

$$f_{num}(z) = \frac{n_z(z)}{N \cdot \Delta z}$$

Сравнивается с барометрической формулой.

### Критерии равновесия

Система считается достигшей равновесия, когда:

1. Средняя кинетическая энергия флюктуирует около постоянного значения
2. Распределения по скоростям и высоте не изменяются со временем
3. Выполняется теорема вириала:  $\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} N k_B T$

### Определение температуры

Температура системы определяется из средней кинетической энергии:

$$T = \frac{2\langle E_k \rangle}{3Nk_B} = \frac{2}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2}$$

Для проверки можно также использовать распределение по компонентам скорости:

$$T_i = \frac{\langle mv_i^2 \rangle}{k_B}, \quad i = x, y, z$$

В равновесии  $T_x = T_y = T_z = T$ .

## Заключение

В работе проведено комплексное исследование процесса установления термодинамического равновесия в системе идеального газа, находящегося в вертикальном сосуде в гравитационном поле.

### Основные достижения:

#### 1. Численное моделирование динамики молекул

- Реализована корректная обработка упругих столкновений молекул между собой и со стенками сосуда
- Использована оптимизация методом ячеек для ускорения вычислений

#### 2. Исследование процесса релаксации

- Изучен переход системы из неравновесного начального состояния (все молекулы у дна с одинаковой энергией) к термодинамическому равновесию
- Определено характерное время релаксации и его зависимость от параметров системы
- Проверено сохранение полной энергии системы в изолированном режиме

#### 3. Получение равновесных распределений

- Построено распределение молекул по модулям скоростей и проведено сравнение с распределением Максвелла
- Построено распределение молекул по высоте и проведено сравнение с барометрической формулой
- Проверена факторизация распределений по различным компонентам скорости

#### 4. Статистический анализ

- Вычислены характерные скорости: наиболее вероятная, средняя и среднеквадратичная
- Определена температура системы из распределения кинетических энергий
- Проверено выполнение теоремы о равнораспределении энергии по степеням свободы

### Выводы

- Численное моделирование методом молекулярной динамики подтверждает основные положения статистической механики
- Система молекул идеального газа самопроизвольно переходит из упорядоченного неравновесного состояния в равновесное состояние с максимальной энтропией
- В равновесии наблюдается полное согласие с распределением Максвелла-Больцмана, несмотря на детерминированный характер классической механики