

정보융합설계 프로젝트 보고서
-Thermodynamics Simulator-

17003 고동현

2018.6.21

차 례

제 1 장	개요	2
제 2 장	이론적 배경	3
제 1 절	열역학적 법칙	3
1.1	이상기체	3
1.2	보일의 법칙	3
1.3	샤를의 법칙	4
1.4	아보가드로의 법칙	4
1.5	이상기체 상태방정식	4
1.6	기체의 평균 운동에너지와 속력	4
제 2 절	기체 분자	5
2.1	기체 분자의 물리량	5
2.2	기체 반응	5
제 3 장	프로그램의 구현	6
제 1 절	프로그램의 기능	6
제 2 절	프로그램의 구현	8
2.1	OOP	8
2.2	라이브러리	8
2.3	기체 반응	9
제 4 장	결과	10
제 5 장	기대효과 및 활용방안	12
제 6 장	참고문헌	13

제 1 장

개요

이 프로젝트는 이제까지 수식적으로만 증명했던 열역학 법칙들이 과연 실제로 성립하는지, 이상기체의 조건들이 어떻게 해서 탄생하게 되었는지 등을 보여주고 이를 시각화 해 이해를 돕는데에 목적을 두고 있다. 또한 이론과의 오차가 발생한다면 얼마나 발생하는지, 이를 줄이기 위해서 어떻게 해야하는 지 등 많은 생각을 할 수 있게 해준다. 또한 실제로 실험하는 것보다 시뮬레이션을 함으로써, 원하는 기체의 양을 조절할 수 있고, 이상적인 계산이 가능하고, 변수를 보다 쉽게 통제할 수 있어, 오차를 줄이고 훨씬 간편히 원하는 결론을 얻어낼 수 있다. 무엇보다 보이지 않는 기체를 보이게 한다는 의미가 가장 크다. 또 프로그래밍 면에서는 이를 구현하는 과정에서 프로그램을 객체지향적(OOP)으로 설계하면서 객체지향프로그래밍의 장점, 기법을 공부할 수 있다. 그리고 외부 라이브러리를 사용해 이미 구현되어있는 것들을 많이 이용해 수고를 덜고, 코드의 효율성, 신뢰성을 높이는 방법또한 공부할 수 있다.

제 2 장

이론적 배경

제 1 절 열역학적 법칙

1.1 이상기체

이 프로젝트에서 사용하는 기체는 모두 고전적 이상기체로 가정한다. 이론적으로 이상기체는 다음과 같은 성질을 만족한다.

1. 기체 분자는 질량은 존재하지만, 부피는 존재하지 않는다.
2. 기체 분자는 서로간에 힘을 주고받지 않는다.
3. 기체 분자가 일으키는 모든 충돌은 완전 탄성 충돌이다.
4. 기체는 어떤 온도나 압력에도 절대로 액화 또는 승화되지 않는다.
5. 기체 분자의 평균 분자 운동 에너지는 절대 온도에만 비례하며, 분자의 크기, 모양 및 종류에는 영향을 받지 않는다.

1.2 보일의 법칙

온도와 분자수가 일정할 때 부피와 압력의 곱은 일정하다는 법칙이다. 이 프로젝트에서는 이 법칙을 확인할 수 없는데, 그 이유는 피스톤이 평형을 이루도록 유도하기 때문에 양쪽의 압력이 같아지게 된다. 이를 확인하려면 주위의 압력을 달리 했을 때 부피의 변화를 관찰해야 한다.

$$P_1V_1 = P_2V_2 \quad (2.1)$$

1.3 샤를의 법칙

압력과 분자수가 일정할 때 부피와 절대온도가 정비례한다는 법칙이다. 이 프로젝트에서는 양쪽 구역의 분자수를 같게 하고 온도를 다르게 하면 확인할 수 있는 법칙이다.

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2} \quad (2.2)$$

1.4 아보가드로의 법칙

온도와 압력이 일정할 때 분자수와 부피가 정비례한다는 법칙이다. 이 프로젝트에서는 양쪽 구역의 온도를 같게 하고 분자수를 다르게 하면 확인할 수 있는 법칙이다. 이 법칙의 가장 중요한 점은 기체의 종류와는 아무 관련이 없다는 점이다.

$$\frac{V_1}{n_1} = \frac{V_2}{n_2} \quad (2.3)$$

1.5 이상기체 상태방정식

앞선 모든 법칙을 종합하여 하나의 방정식을 완성시킬 수 있다. 이 프로젝트에서는 양쪽 구역의 이론적 부피비를 이 방정식을 기본으로 계산하였다.

$$PV = nRT \quad (2.4)$$

1.6 기체의 평균 운동에너지와 속력

기체의 평균 운동에너지는 온도에만 비례한다. 증명은 생략하겠다. 이 프로젝트에서는 기체 분자의 기본 속력을 선정할 때 이를 이용하였다.

$$(E_k)_{avg} = \frac{3}{2}kT \quad (2.5)$$

이상기체의 속력은 맥스웰-볼츠만 분포를 따른다. 하지만 프로젝트 스케일에서는 많은 양의 분자를 다루지 못하기 때문에 분자들의 속력을 맥스웰-볼츠만 분포를 따르게 설정한다고 해도 오차가 많이 발생할 수 있어 이 프로젝트에서는 그렇게 하진 않았다.

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad (2.6)$$

이 맥스웰-볼츠만 확률분포를 통해 분자들의 평균속도, 제곱평균속도, 최빈속력 등을 구할 수 있다. 이 3개의 속도 모두 정확한 값은 다르지만 모두 $\sqrt{\frac{T}{M}}$ 에 비례한다는 사실을 관찰할 수 있다. 그래서 이 프로젝트에서 분자의 초기속력을 $\sqrt{\frac{T}{M}}$ 에 비례하게 부여하였고, 속력을 너무 빠르지도, 너무 느리지도 않게 하기 위해 상수는 2를 선택하였다.

$$v_{avg} = \int_0^\infty v f(v) dv = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \quad (2.7)$$

$$v_{rms} = \sqrt{\int_0^{\infty} v^2 f(v) dv} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \quad (2.8)$$

$$v_{mean} = \sqrt{\frac{2RT}{M}} \quad (2.9)$$

제 2 절 기체 분자

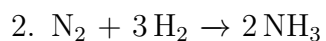
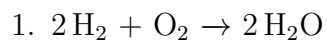
2.1 기체 분자의 물리량

기체 종류	분자량	분자 크기 (Å)
H ₂	2	0.74
He	4	0.31
N ₂	28	3.64
O ₂	32	3.46
H ₂ O	18	1.9
NH ₃	17	1.63

표 2.1: 기체 분자량의 물리량

2.2 기체 반응

모든 기체는 이상기체로 가정했기 때문에 프로젝트에서 나타나는 입자들은 모든 온도에서 기체상태이다. 실제로는 모든 온도에서 자발적으로 화학반응이 일어나지는 않지만 상황의 다양성을 증가시키기 위하여 기체들은 모든 온도에서 조절자 선택 하에 다음과 같은 반응을 일으킬 수 있도록 하였다.



제 3 장

프로그램의 구현

제 1 절 프로그램의 기능

이 프로그램의 시작화면인 그림 3.1을 보면 알 수 있듯이 기체분자운동을 구현한 좌측 부분과 좌측 부분의 상태를 나타내주기도 하고 상태를 조절할 수도 있는 우측부분으로 나뉜다. 그리고 좌측부분에서는 회색 피스톤을 기준으로 영역이 또 두 부분으로 나뉜다.

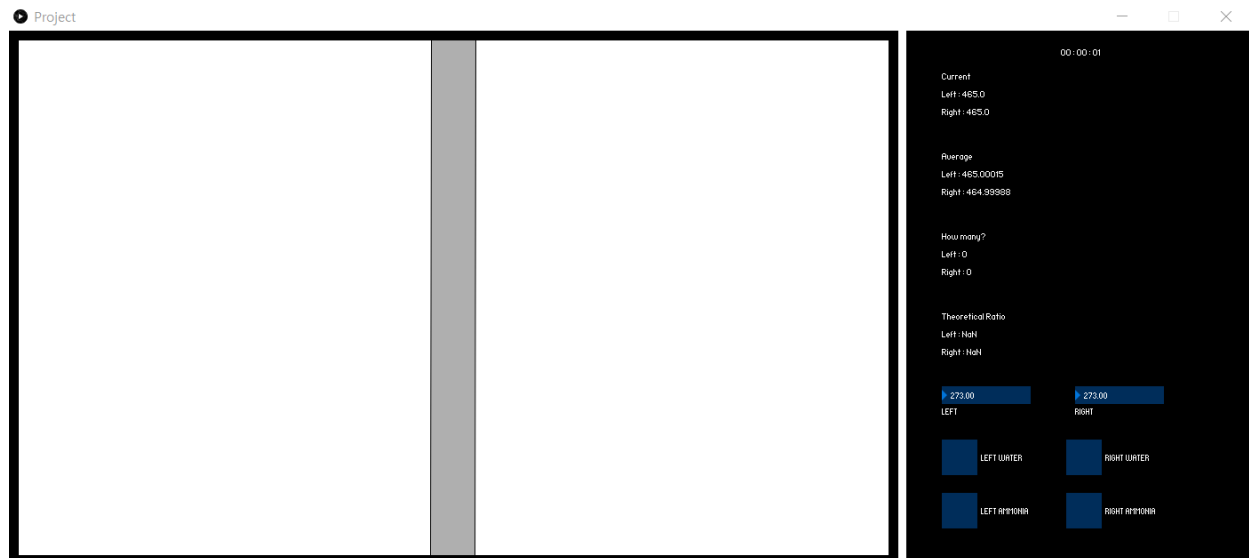


그림 3.1: 시작화면

그림 3.2와 같이 좌측부분에 기체 분자들을(H_2 , He , N_2 , O_2) 자유롭게 생성할 수 있다. (H_2O 와 NH_3 는 반응을 통해서만 생성된다.) 피스톤 왼쪽 영역에 기체를 생성할 때는 각 기체분자를 이루는 원자의 원자번호를 누르면 된다. 오른쪽 영역에 생성할 때에는 Ctrl 버튼과 함께 각 기체분자를 이루는 원자의 원자번호를 누르면 된다.

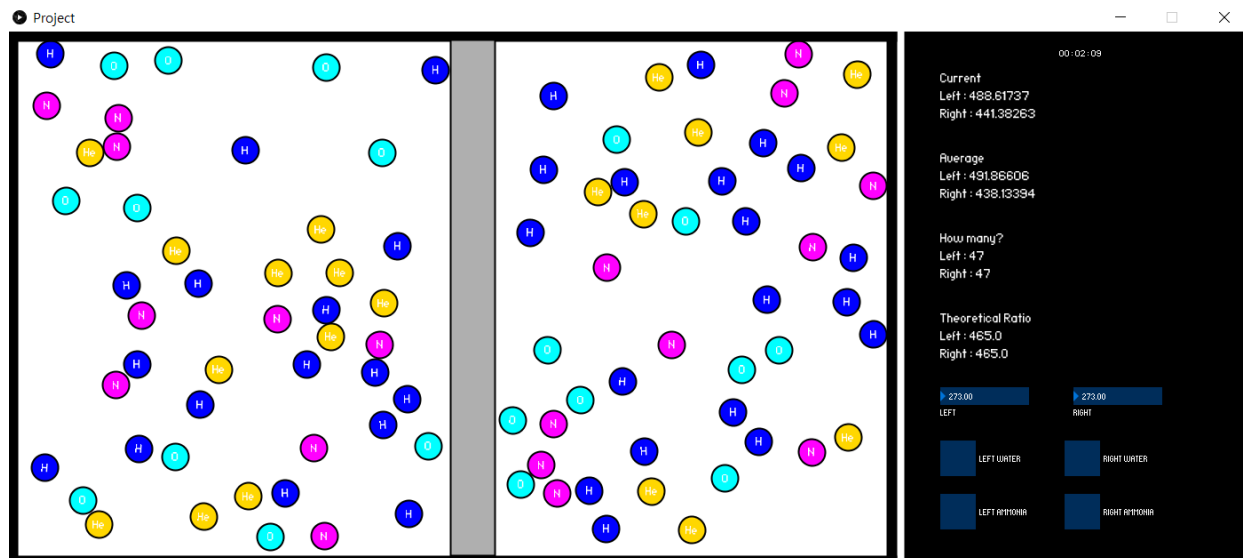


그림 3.2: 기체분자 생성화면

이번엔 우측부분을 보자. 이 부분은 Control Box라고 하는데, 맨 위에는 타이머가 존재한다. 이 타이머는 프로그램의 실행시간을 나타낸다. 그 밑에는 좌측부분의 상태를 알려주고 있다.

1. 현재 피스톤을 기준으로 왼쪽 구역과 오른쪽 구역의 부피비
2. 왼쪽 구역과 오른쪽 구역의 부피비의 평균
3. 왼쪽 구역과 오른쪽 구역에 존재하는 총 기체분자의 수
4. 이론적인 왼쪽 구역과 오른쪽 구역의 부피비

그 밑에는 좌측부분의 상태를 조절할 수 있는 버튼이 있다. 위에 나란히 있는 버튼은 왼쪽 구역과 오른쪽 구역의 온도(K)를 통제할 수 있는 NumberBox이다. 초기 설정은 각각 273K이고 최저 1K, 최대 10000K이며 스크롤바를 한번 올릴때마다 10K씩 올라간다. 그리고 가장 밑에 있는 4개의 버튼은 기체간의 반응을 조절하는 버튼이다. 중 위의 2개는 각각 왼쪽 구역과 오른쪽 구역의 물 생성을 가능케 할지를 조절하는 것이고, 아래의 2개는 암모니아 생성을 가능케 할지를 조절하는 CheckBox이다. 초기에는 모두 반응이 안되게 설정되어있으며 한번 누를때마다 가능여부가 바뀐다. 또, 스페이바를 누르면 모두 초기화된다. 이렇게 CheckBox를 이용해 그림 3.3과 같이 앞서 언급했던 2개의 화학반응을 모두 관찰할 수 있다.

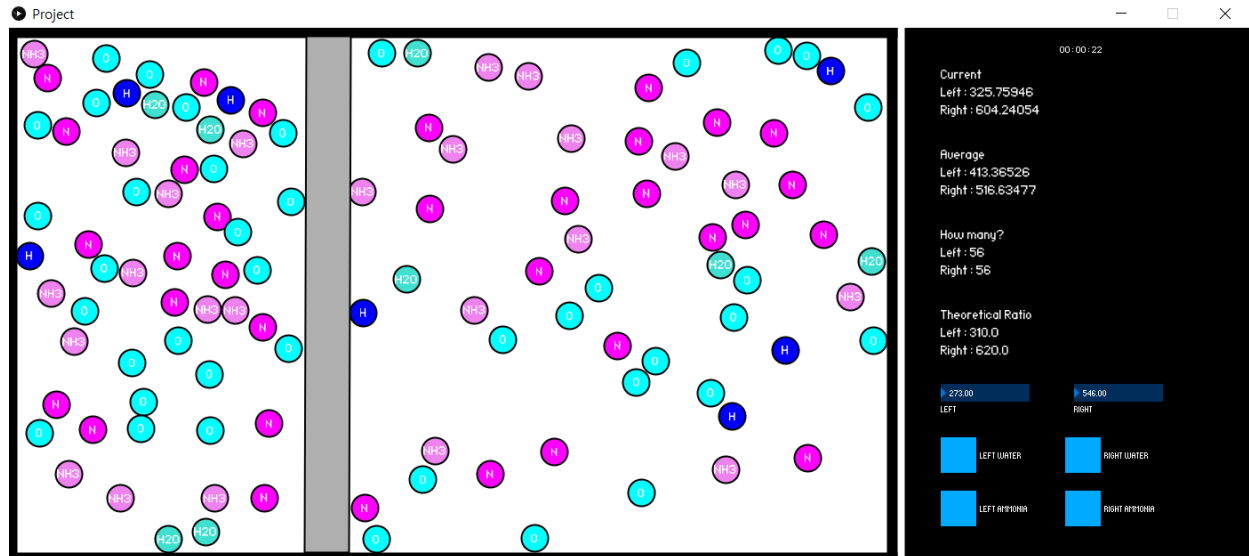


그림 3.3: 기체 반응

제 2 절 프로그램의 구현

2.1 OOP

이 프로그램은 기본적으로 객체지향적인(OOP) 성격을 띤다. 특히 기체분자들이 그렇게 구현되었는데, 먼저 모든 분자를 아우를 수 있는 입자 객체를 하나 생성하였다.(Particle) 왜냐하면 각 기체들의 성질을 반영한 객체들을 따로따로 만들면 시간이 많이 들 뿐만 아니라 비효율적이기 때문이다. 따라서 이 객체를 부모로 두고 상속기법을 이용하여 세부적인 기체분자의 성질을 반영한 여러개의 객체를 생성하였다. (Hydrogen, Helium, Nitrogen, Oxygen, Water, Ammonia) 이때 기체분자들의 모양과 크기는 모두 통일했고, 질량(밀도)만 달리했다. 왜냐하면 이상기체의 중요한 성질인 '기체분자는 질량은 가지지만 부피는 가지지 않는다.' 때문이다. 그런데 기체의 모양이나 크기를 달리해버리면 기체의 종류에 따라서 각 구역에 들어갈 수 있는 개수, 충돌 빈도수 등이 달라져 오차가 커진다. 그래서 H_2 , N_2 , O_2 는 모두 이원자 분자지만 질량만 그렇게 부여하고 모양은 모두 단원자로 통일한 것이다.

2.2 라이브러리

구현을 효율적으로 하고, 프로그램의 신뢰성을 높이기 위해 다음과 같은 외부 라이브러리들을 사용했다.

2.2.1 Box2D

이 라이브러리는 물리엔진의 사용을 가능하게 해준다. 기체분자간의 충돌, 벽과의 충돌, 피스톤과의 충돌을 구현할 때 이를 사용함으로써 보다 효과적인 구현이 가능했다. 벽들은(Boundary) 정적객체이고 기체분자은과(Particle) 피스톤은(Piston) 동적객체이므로 각각 BodyType을 STATIC과 DYNAMIC으로 설정하였다.

2.2.2 ControlP5

이 라이브러리는 각종 변수들을 통제할 때 시각화를 효율적으로 할 수 있게 해준다. 때문에 기체분자의 운동을 통제하는 ControlBox를 만들 때 사용하였다. 맨 위에 존재하는 Timer, 각 구역의 온도를 통제하는 NumberBox, 반응여부를 묻는 CheckBox가 그 예이다.

2.3 기체 반응

이 프로젝트에서 구현한 화학반응은 물이 생성되는 반응과 암모니아가 생성되는 반응이다. 물은 수소,산소기체가 각각 2:1로 결합하고 암모니아는 수소,질소기체가 각각 3:1로 결합한다. 이 결합과정은 산소, 질소 중심으로 수소기체들을 탐색해가며 수소기체와의 거리가 기체반지름의 4배 이하인 분자가 동시에 각각 2개, 3개 존재하면 반응하여 물과 암모니아가 2개씩 생성도록 구현하였다.

제 4 장

결과

이렇게 만든 프로젝트를 이용하여 여러가지 실험을 해보았다. 먼저, 아보가드로의 법칙을 시험해 보았다. 각 구역에 수소분자, 산소분자를 40개씩 생성하고 90초 동안 관찰하였다. 결과는 꽤나 성공적이었다. 실험장면인 그림 4.1을 보면 현재 왼쪽 구역과 오른쪽 구역의 부피비는 이론값과 많은 오차를 보였지만 그 평균값은 오차율 0.07%로 매우 정확한 결과가 나왔다.

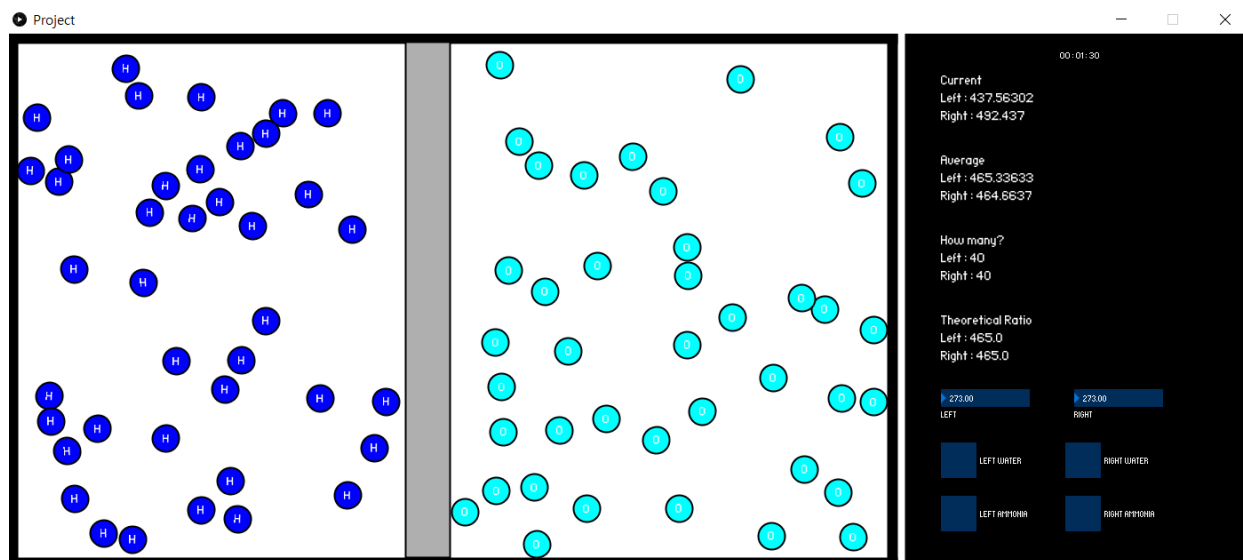


그림 4.1: 아보가드로 법칙 실험

두 번째 실험은 첫번째 실험에서 더 확장된 이상기체 상태방정식에 관한 실험이다. 그림 4.2와 같이 왼쪽 구역에는 수소기체와 질소기체, 오른쪽 구역에는 헬륨기체와 산소기체를 각각 40개씩 생성하고 오른쪽 구역의 온도를 546K으로 설정하였다. 이때 이론적으로는 부피비가 1:2가 나와야 하지만 결과는 전혀 그렇지 않았다. 분자의 개수를 늘이거나 줄여도 마찬가지였다. 그 이유는 다음과 같다고 생각한다.

1. 기체 분자의 부피를 각 구역의 부피에 대해 무시할 수 없다. (이상기체는 기체분자의 부피가 없어 기체분자들이 활동할 수 있는 공간이 더 넓다.)
2. 온도가 높아져 속력이 빨라져도 1의 이유 때문에 기체 분자간의 충돌이 더욱 많아져 피스톤과 부딪히는 횟수가 줄어들어 부피팽창이 잘 일어나지 않는다.

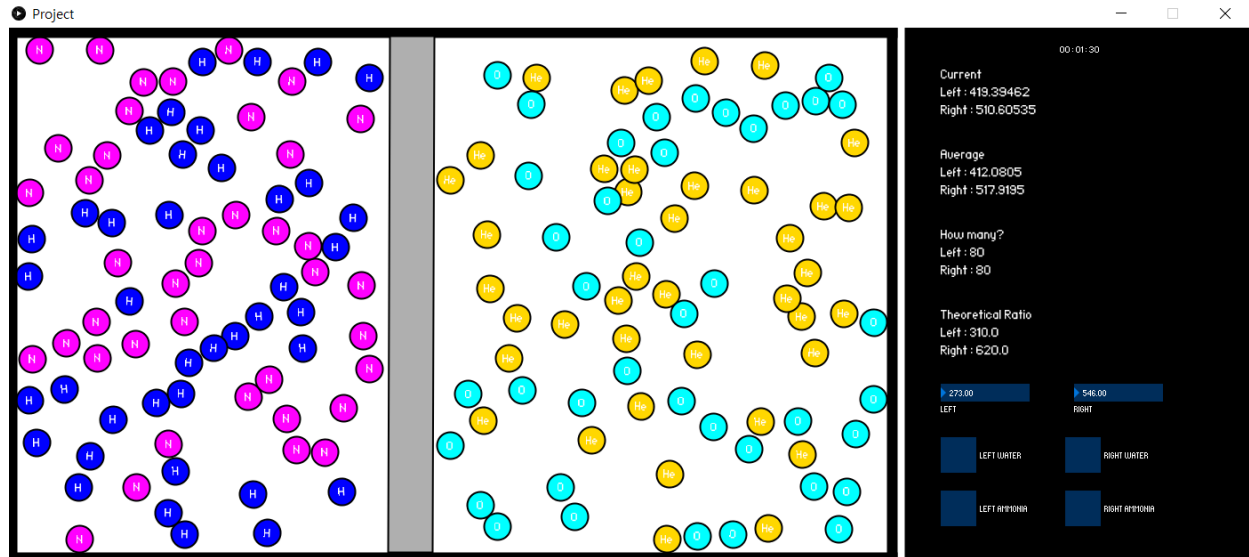


그림 4.2: 이상기체 상태방정식 실험

제 5 장

기대효과 및 활용방안

이는 기존의 열역학 법칙의 정당성을 부여해주고, 이상기체 가정의 정당성 역시 확인해 줄 수 있다. 그리고 프로그램이 동작하는 과정에서 발생하는 오차를 분석함으로써 열역학을 배우고 있는 사람이나, 어려워 하는 사람 등에게 교육용으로 활용가치가 높다. 실제로 눈에 보이지 않는 기체 분자를 시각화 함으로써, 기체의 운동에 대한 이해도를 높일 수 있을 뿐만아니라, 운동량 보존의 법칙 등을 눈으로 확인 할 수 있다. 또 이를 확장하여 기체 분자간의 인력, 반발력까지 고려하여 시뮬레이션을 할 때 수정된 이상기체 방정식인 반데르발스 상태방정식

$$\left(P + a \frac{n^2}{V^2}\right) (V - nb) = nRT \quad (5.1)$$

과의 부합성도 실험적으로 얻어낼 수 있을 것이다. 또한 구역의 수를 늘릴 수도 있고, 칸막이를 단열재가 아닌 열전도가 가능한 소재로 대체할 수 있다. 그러면 열전도의 법칙에 따라 칸막이를 통해 열이 전달될 것이고, 각 구역들은 열평형을 이루게 될 것이다. 반대로 한쪽구역을 대기로 설정해 기체의 등압, 등적, 등온, 단열 과정 등도 시뮬레이션해 그에 따라 기체 분자의 움직임이 어떻게 되는지 열역학적으로 해석할 수 있을 것이다. 이 프로젝트가 끝나도 위와같이 여러 기능들을 추가해 발전시킨다면, 더 많은 열역학적 현상을 시뮬레이션 할 수 있을 것이고, 교육적 가치는 더욱 높아질 것이다.

제 6 장

참고문헌

1. Fundamental Of Physics Halliday, Resnick, Walker
2. Physics for Scientists and Engineers by Raymond A. Serway
3. <https://phet.colorado.edu/ko/simulation/gas-properties>