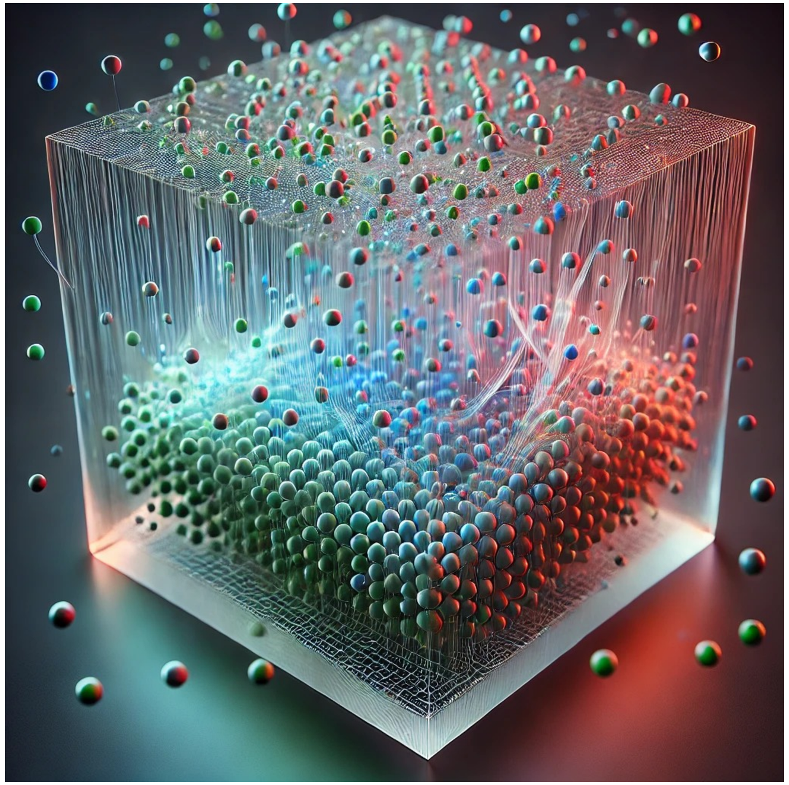
Факультет физики

Москва
2024

Численное моделирование идеального газа

Теория идеального газа

Идеальный газ — это гипотетическая модель газа, молекулы которого не взаимодействуют друг с другом (кроме как при ударах), а также имеют пренебрежимо малые размеры. Состояние газа в 2D можно описать 4N переменными: координаты и скорости



Распределение Гиббса

$w(\overline{p},\overline{q}) = A\exp^{-\beta\cdot E(\overline{p},\overline{q})}$ - функция распределения по импульсам и координатам

В нашем случае газ находится в двухмерном сосуде, внешних полей нет. Энергия частицы:

$$\varepsilon(\overline{v},\overline{r}) = \frac{mv^2}{2}$$

$$w(\overline{v},\overline{r}) = A\exp^{-\beta mv^2/2}$$

$w_{\overline{v}}(\overline{v}) = A_{\overline{v}}\exp^{-\beta mv^2/2}$ - распределение по вектору скорости

Распределение по модулю скорости

$w_{\overline{v}}(\overline{v}) = A_{\overline{v}} \exp\left(\beta \frac{mv^2}{2}\right) = A_{\overline{v}} \exp\left(\beta \frac{mv_x^2}{2}\right) \exp\left(\beta \frac{mv_y^2}{2}\right)$ - проекции скорости v_x, v_y независимы, поэтому:

$w_{v_x}(v_x) = A_{v_x} \exp\left(-\beta \frac{mv_x^2}{2}\right)$ - распределение по проекции скорости

В силу симметрии $A_{v_x} = A_{v_y}$, а также того что $w_{\overline{v}}(\overline{v}) = w_{v_x} w_{v_y}$:

$A_{v_x} = A_{v_y} = A_{\overline{v}}^{\frac{1}{2}}$

Распределение по любой из проекций нормировано на единицу:

$\int_{-\infty}^{+\infty} A_{v_x} \exp\left(-\beta \frac{mv_x^2}{2}\right) dv_x = 1$, то есть $A_{v_x} = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2}$ и $A_{\overline{v}} = \frac{m}{2\pi kT}$

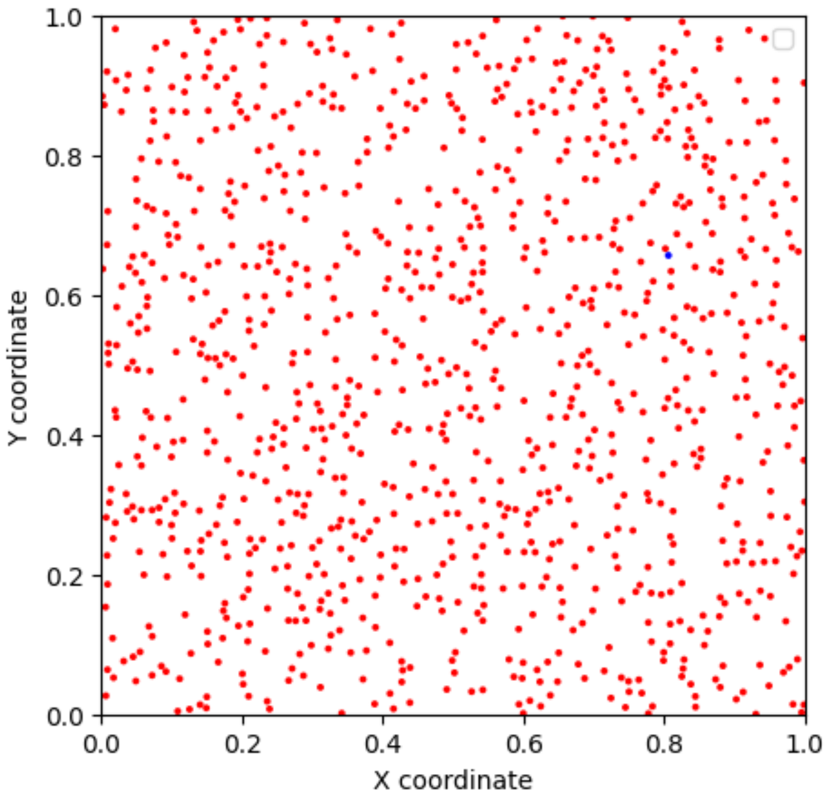
Распределение по модулю скорости

Зададим вектор скорости частицы через полярные координаты, тогда $w_{v,\phi}(v,\phi) = A_{\overline{v}} \cdot e^{\beta \frac{mv^2}{2}} \cdot v$, интегрируем по углу и получаем:

$w_v(v) = \frac{m}{kT} v \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)$ - распределение по модулю скорости, также называемое распределением Максвелла

Моделирование

1. Молекулы считаем абсолютно твердыми и гладкими шарами одинаковой массы, которые могут абсолютно упруго сталкиваться между собой и стенками. При этом гравитационного или иного взаимодействия между ними нет.
2. 2D модель в квадрате $[0,1] \times [0,1]$.
3. R = 0.005
4. Шаг итерации dt $\ll \frac{R}{v_{max}}$



Алгоритм

1. На каждом шаге проверяем какие частицы сталкиваются
2. Для сталкивающихся пар пересчитываем скорости
3. Для частиц, ударяющихся об стенки, пересчитываем скорости (абсолютно упругий удар)
4. Считаем новые координаты частиц $[x,y] = [x,y] + [v_x, v_y] * dt$
5. Записываем скорости и координаты для анимации

Построение распределения Максвелла

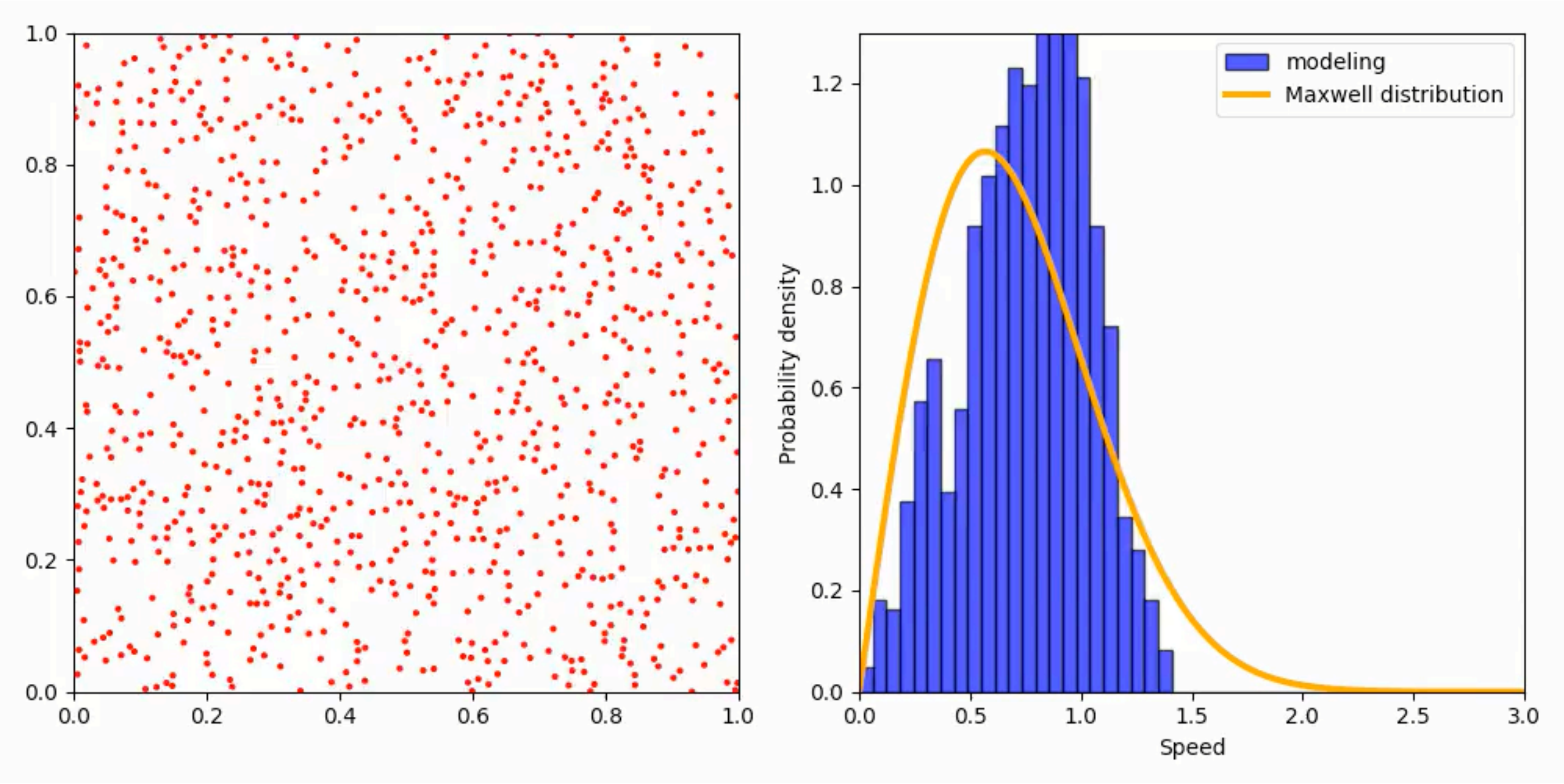
Система замкнута, $E = const$, поэтому в момент установления равновесия:

По теореме о равнораспределении кинетической энергии по степеням свободы: для одной молекулы $kT = \frac{mv^2}{2}$, поэтому $E_{kin}^{sum} = NkT = \frac{m}{2}\sum_i v_i^2$, где суммирование по начальным скоростям.

Тогда $\frac{m}{kT} = \frac{2N}{\sum v_i^2}$ и можем построить теоретическое распределение Максвелла.

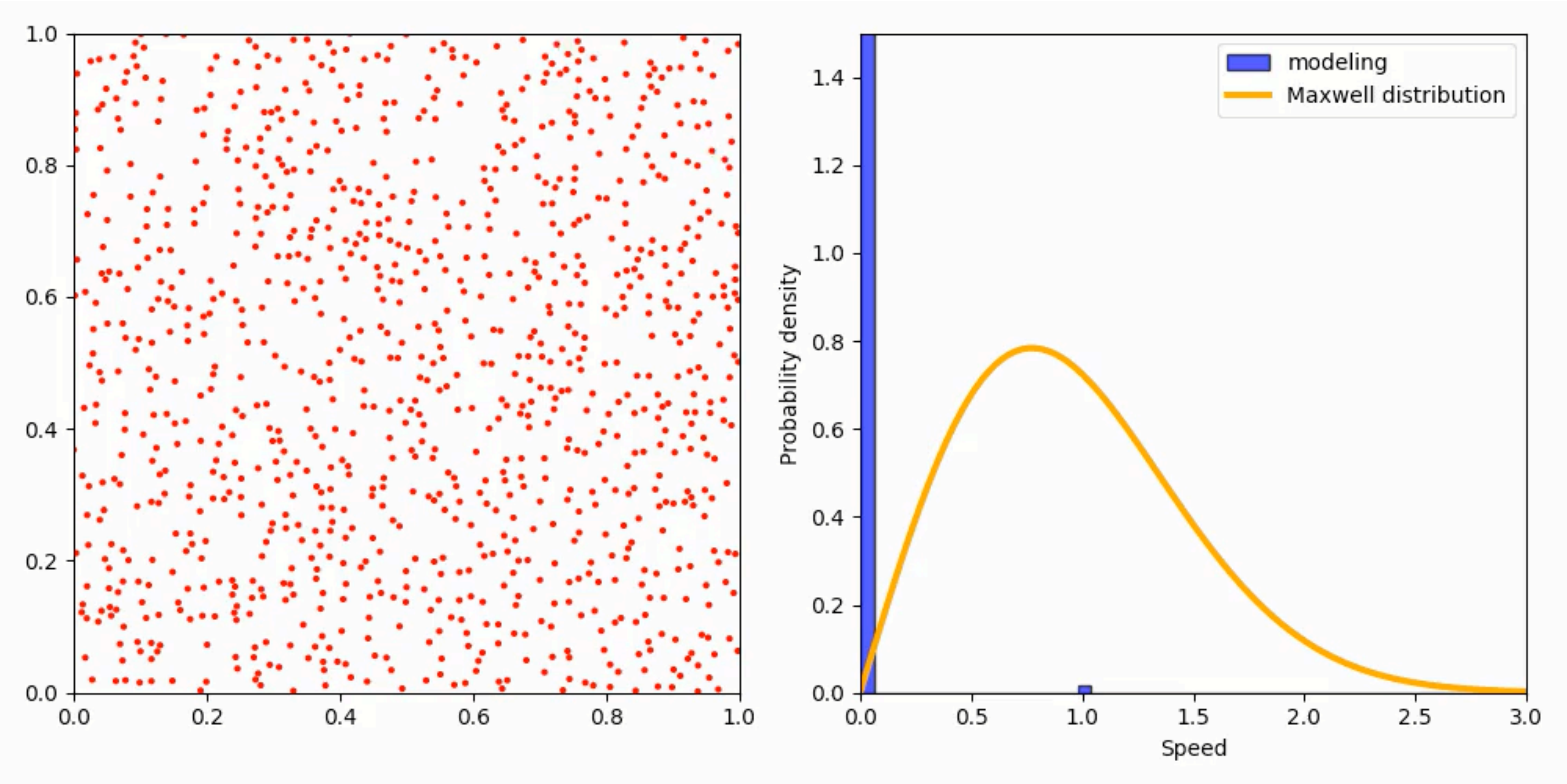
Различные начальные распределения, 1300 частиц

1) Координаты и скорости, равномерно распределенные на [0,1]



Вид.1: эволюция равномерно распределенной системы

2) Координаты распределены равномерно на [0,1], Скорость трех частицы 20 у. е., остальные покоятся



Вид.2: эволюция неравномерно распределенной системы

Начальное распределение скоростей: две быстрые частицы, остальные покоятся

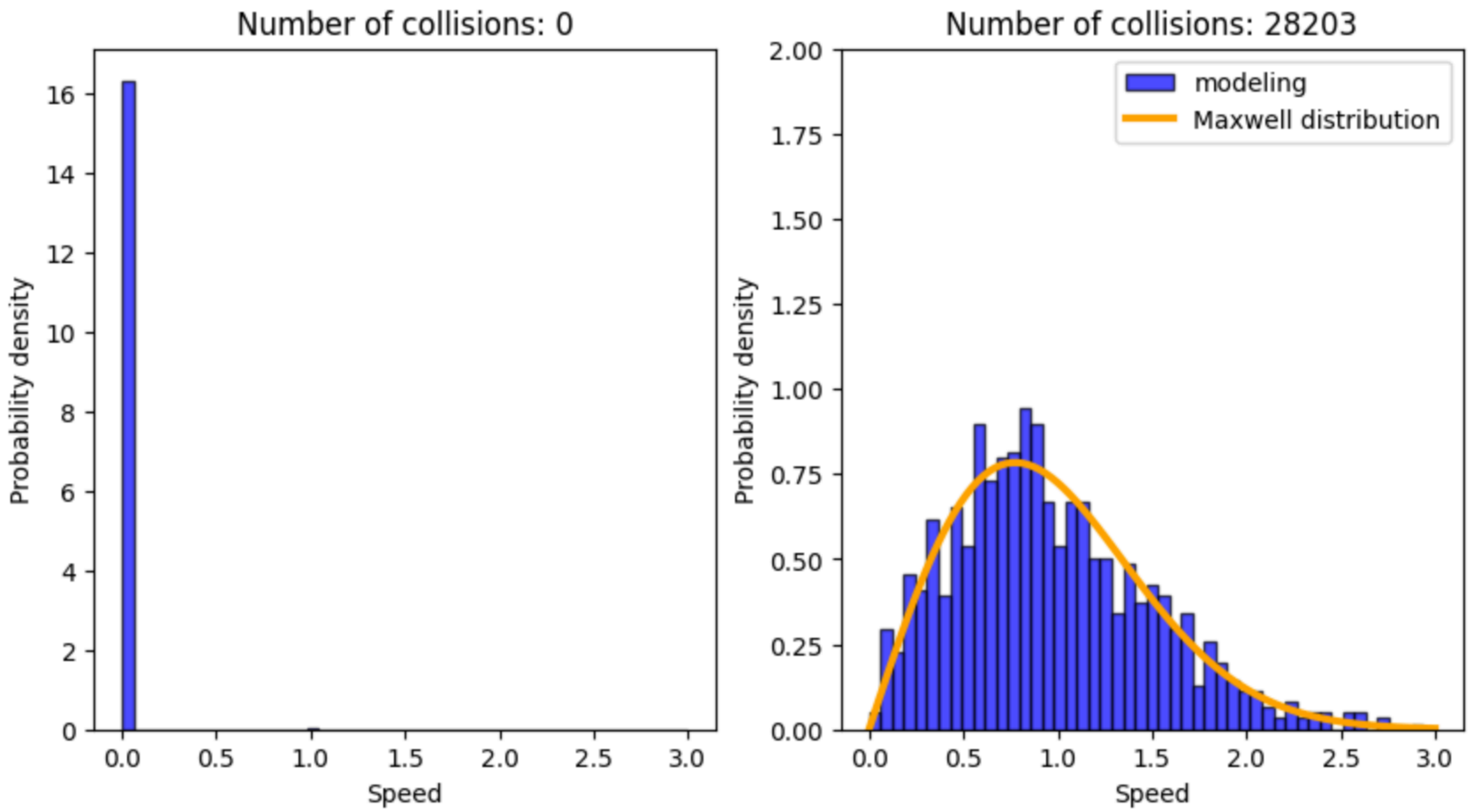


Рис.1: Две быстрые частицы, остальные покоятся

Начальное распределение скоростей: равномерное на [0, 1]

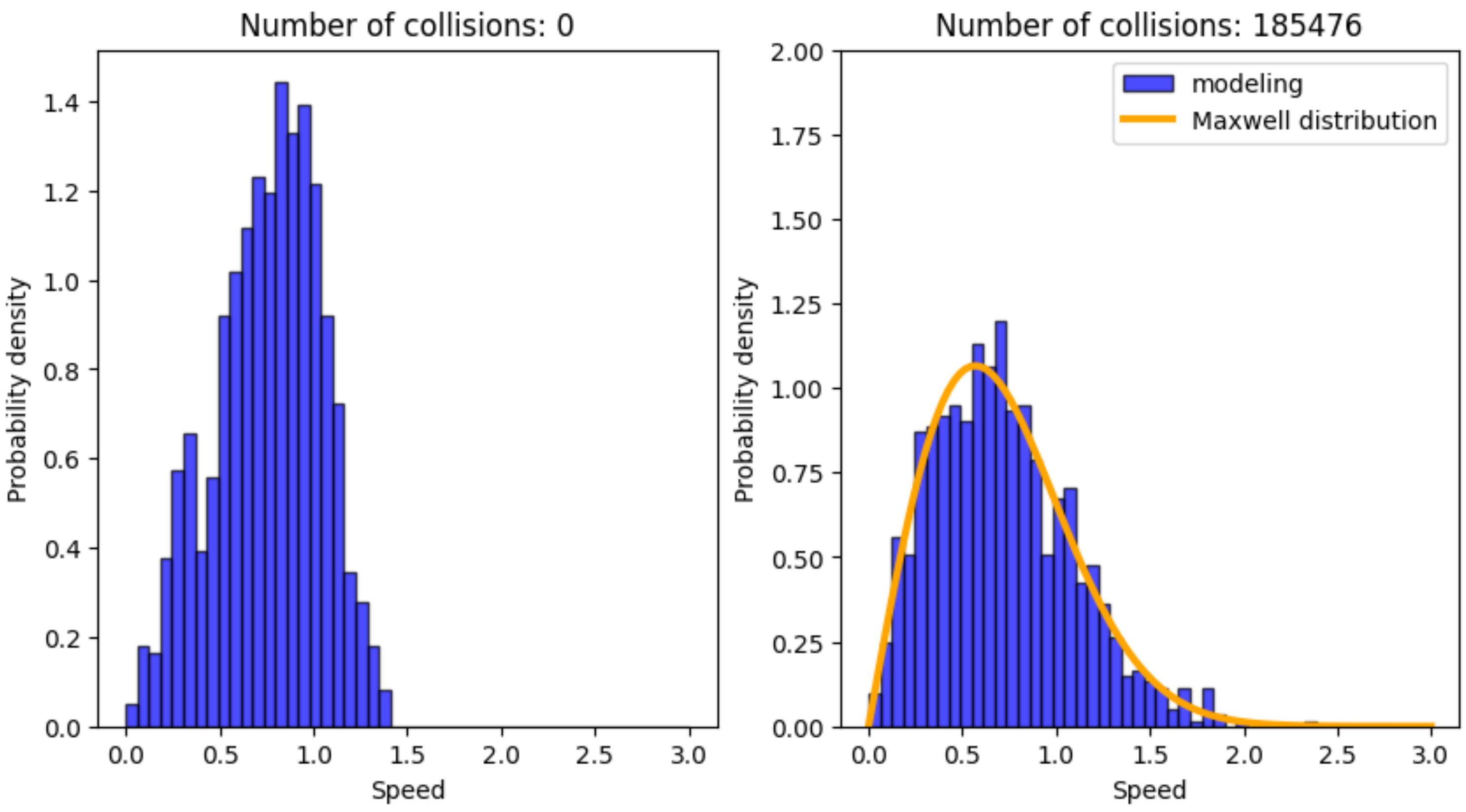


Рис.2: равномерное распределение

Начальное распределение скоростей: нормальное с $\mu = 1, \sigma = 0.2$

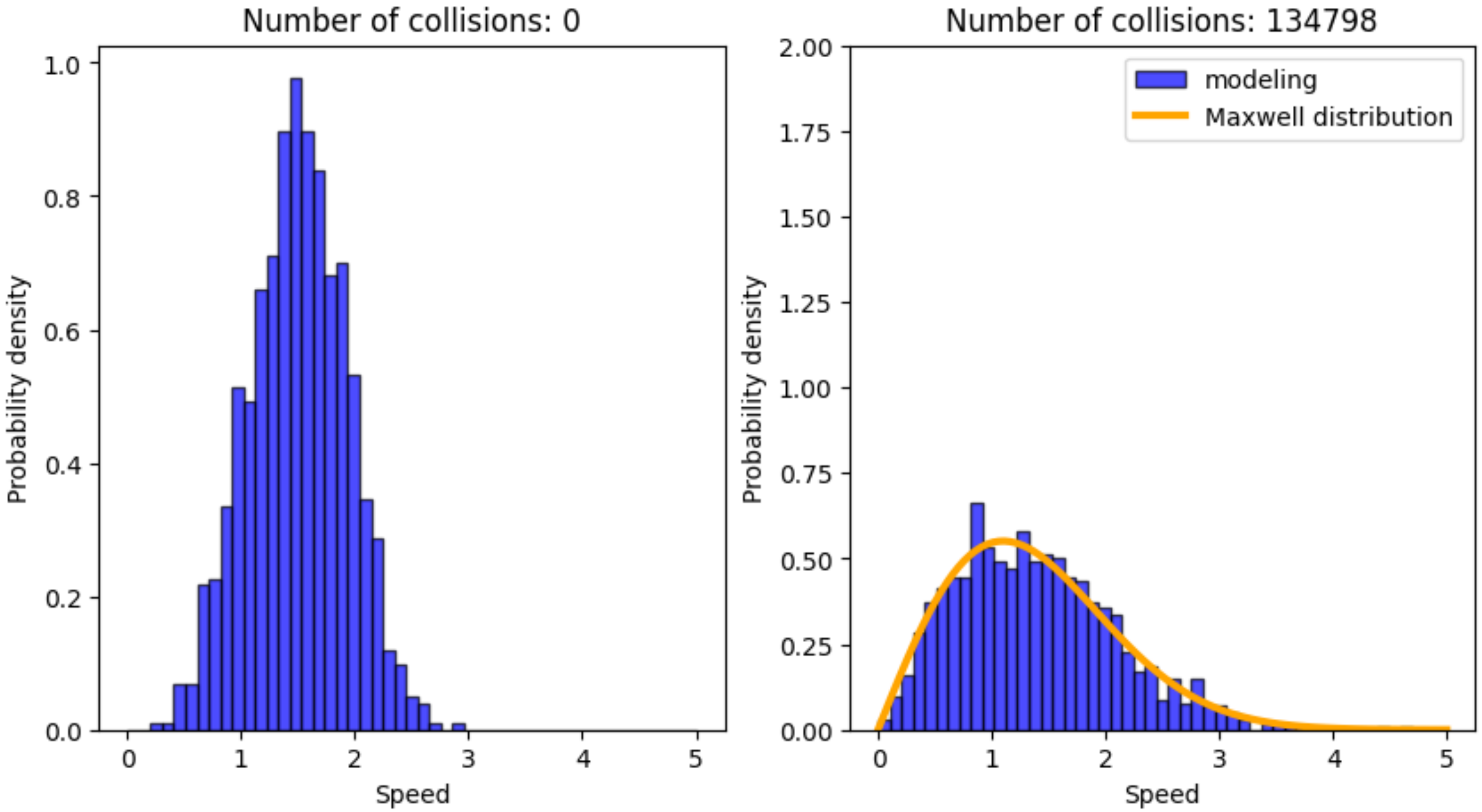


Рис.3: нормальное распределение с $\mu = 1, \sigma = 0.2$

Сходимость к распределению Максвелла для систем с разным количеством частиц

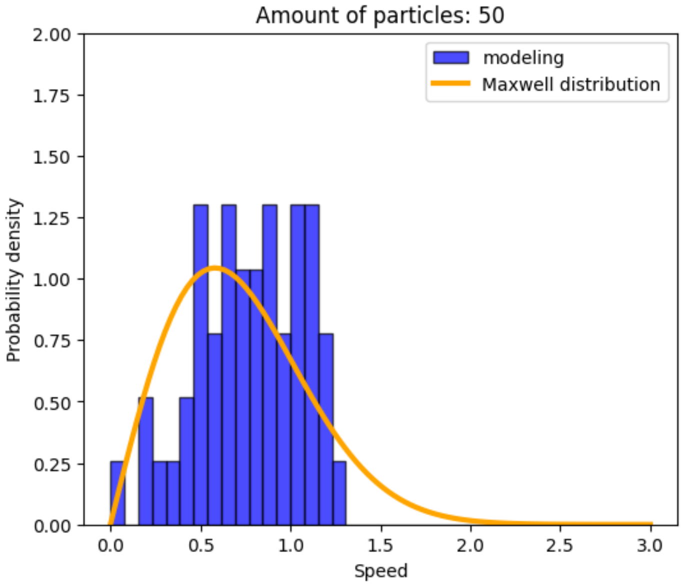


Рис.4: N = 50

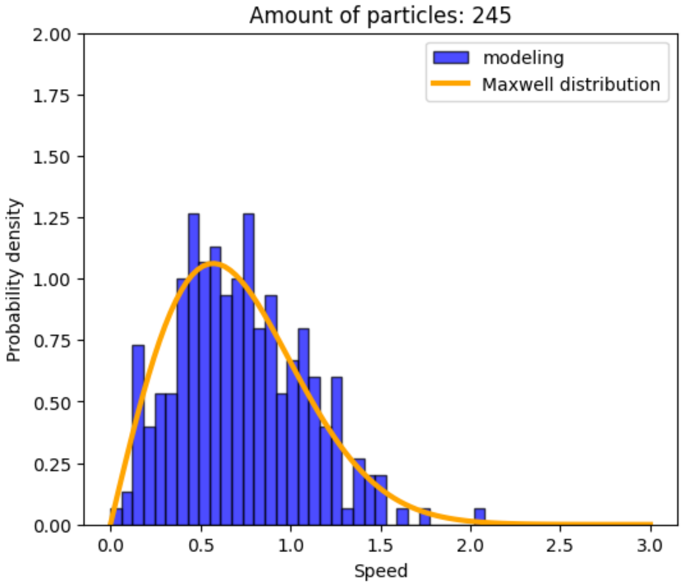


Рис.5: N = 245

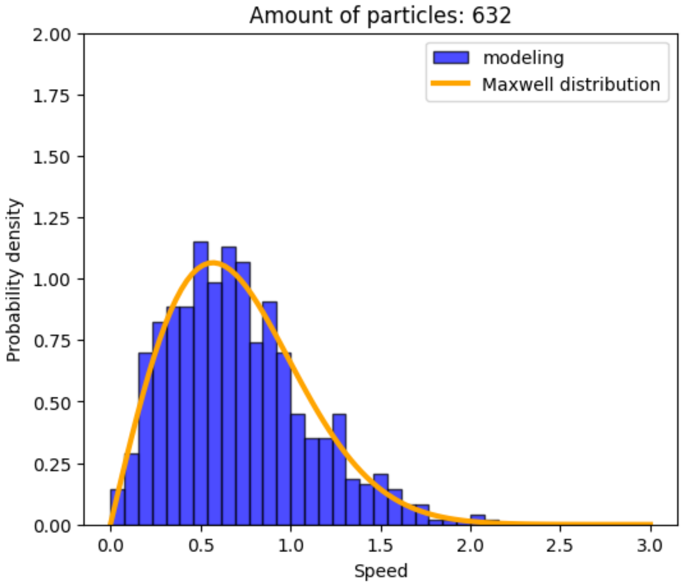


Рис.6: N = 632

Выводы

1. Система сходится к распределению Максвелла независимо от начального распределения
2. Система с малым количеством частиц также сходится (N = 245)

ВЫСШАЯ • ШКОЛА • ЭКОНОМИКИ