

# MKT: Final Recap

9 ноября 2023 г.

# Problem

Смоделировать поведение молекул одноатомного газа (был выбран *He*) в предположении абсолютно упругих соударений.

# Solution

- Равномерно генерируем  $N$  частиц и присваиваем им случайную скорость с фиксированной длиной вектора, найденной эмпирическим путём.

# Solution

- Равномерно генерируем  $N$  частиц и присваиваем им случайную скорость с фиксированной длиной вектора, найденной эмпирическим путём.
- Чтобы смоделировать движение тел, мы воспользовались формулой зависимости координаты тела от времени

$$\vec{x} = \vec{x}_0 + \vec{v} \cdot t$$

# Solution

Чтобы смоделировать отталкивание молекул друг от друга, для каждой пары  $i, j$  мы проверяли, столкнулись ли они (задача проверки пересечения двух сфер тривиальна).

Но как же считать скорости тел после столкновения? Для начала вспомним формулу для абсолютно упругого удара в случае коллинеарных скоростей:

$$v'_i = \frac{2m_{3-i}v_{3-i} + v_i(m_i - m_{3-i})}{m_1 + m_2}, \quad i = 1, 2$$

Остаётся заметить, что в столкновении участвует лишь проекция скоростей на  $\vec{r}_2 - \vec{r}_1$ .

# Solution

- Также не стоит забывать об ударах молекул об стенки испытательной камеры. Для моделирования этого процесса мы заметили, что каждая из стенок является "зеркалом" по определённой координате пространства.

# Solution

- Также не стоит забывать об ударах молекул об стенки испытательной камеры. Для моделирования этого процесса мы заметили, что каждая из стенок является "зеркалом" по определённой координате пространства.
- Давайте будем зеркально отражать эту координату скорости и положения молекула при обнаружении пересечения с определённой стенкой!

# Problem

Описанный ранее алгоритм работает вполне корректно, но уже при количестве частиц свыше 1000 начинаются тормоза, что делает моделирование приближенного к реальности эксперимента практически невозможным! Как можно решить?



# Solution

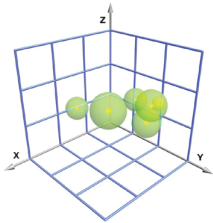
- Разбиваем испытательную камеру на блоки. (размер блока выбирается эмпирическим путём,  $\gg$  размера молекулы)

# Solution

- Разбиваем испытательную камеру на блоки. (размер блока выбирается эмпирическим путём,  $\gg$  размера молекулы)
- Ставим каждой молекуле в соответствие блок, в котором она находится

# Solution

- Разбиваем испытательную камеру на блоки. (размер блока выбирается эмпирическим путём,  $\gg$  размера молекулы)
- Ставим каждой молекуле в соответствие блок, в котором она находится
- Сортируем блоки, чтобы удобно обрабатывать лишь те пары молекул, которые находятся в одних блоках.



# Solution

- Заметим, что данный алгоритм очень хорошо параллелится (разве что кроме части с сортировкой)

# Solution

- Заметим, что данный алгоритм очень хорошо параллелится (разве что кроме части с сортировкой)
- Благодаря тому, что даже при большом количестве молекул имеем порядка 10 столкновений, нам удалось существенно ускорить модель.

# Solution

- Заметим, что данный алгоритм очень хорошо параллелится (разве что кроме части с сортировкой)
- Благодаря тому, что даже при большом количестве молекул имеем порядка 10 столкновений, нам удалось существенно ускорить модель.
- Имеем модель, которая поддерживает 750000 молекул при скорости вычислений 60 tps.  
Приступим к экспериментам и сбору метрик!

# Problem

Хочется собирать метрики, чтобы провести аналогии с реальной жизнью и впоследствии иметь возможность проверять гипотезы. Какие метрики вообще существуют? Как их собирать?

# Solution

- Кинетическая энергия – суммируем кинетические энергии всех частиц. Простая, но плохо интерпретируется: сколько энергии много, а сколько мало?

$$E = \sum \frac{mv^2}{2}$$



# Solution

- Кинетическая энергия – суммируем кинетические энергии всех частиц. Простая, но плохо интерпретируется: сколько энергии много, а сколько мало?

$$E = \sum \frac{mv^2}{2}$$

- Температура – по сути средняя кинетическая энергия, но уже можно делать какие-то выводы, насколько реальна наша модель

$$T = \frac{2}{3} \frac{\bar{E}}{k}$$

# Solution

- Давление – для подсчёта каждая стенка запоминает суммарный импульс и раз в достаточно малое  $\Delta t$  происходит подсчёт

$$p = \frac{|mv_{proj}|}{S \cdot \Delta t}$$

# Solution

- Давление – для подсчёта каждая стенка запоминает суммарный импульс и раз в достаточно малое  $\Delta t$  происходит подсчёт

$$p = \frac{|mv_{proj}|}{S \cdot \Delta t}$$

- Длина свободного пробега – каждая молекула помнит, когда было её последнее столкновение.

$$\lambda = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n v_i \cdot (t - t_{lastCollide}(i))$$

# Problem

Итак, мы получили какие-то чиселки, как понять, корректны ли они?

# Solution

- Главная формула для идеального газа – это, бесспорно, уравнение Менделеева-Клапейрона:

$$pV = \nu RT$$

# Solution

- Главная формула для идеального газа – это, бесспорно, уравнение Менделеева-Клапейрона:

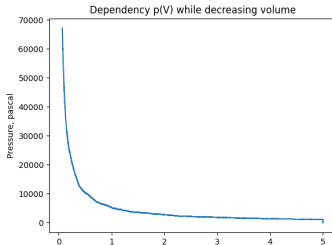
$$pV = \nu RT$$

- Первое, что можно проверить в этой формуле – это просто то, выполняется ли она?
  - Тестируем 100000 молекул гелия – это  $\sim 1.66 \cdot 10^{-19}$  моль
  - Скорости молекулам выдали случайным образом – получили температуру  $\sim 213$  K
  - Объем испытательной камеры получился  $2.5 \cdot 10^{-20}$ .  
Подставив все значения в данную формулу получим ожидаемое значение давления 11760 Па. Подсчитанное же давление равняется \* \* \* – неплохой результат!

# Experiment

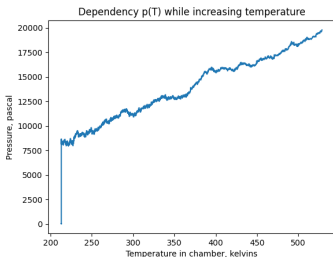
Что ещё можно выжать из этого уравнения? Построить графики зависимостей при изменении какого-то одного параметра и посмотреть, соблюдаются ли типы зависимостей.

- Давайте сжимать камеру по одной из координат. Ожидается, что получится гиперболическая зависимость плотности от объёма:  $\rho = \frac{C}{V}$ . Действительно, вполне похоже на параболу



# Experiment

- Теперь будем постепенно нагревать молекулы. Ожидается, что получится линейная зависимость:  $p = C \cdot T$ . Действительно, после выравнивания давления и начала нагрева вырисовывается линейная зависимость.





# Experiment

Также хотелось бы рассказать о проведённом нами эксперименте:

- В одной из стенок была проделана квадратная дыра.

# Experiment

Также хотелось бы рассказать о проведённом нами эксперименте:

- В одной из стенок была проделана квадратная дыра.
- Зафиксировали количество горячих частиц до открытия дыры

# Experiment

Также хотелось бы рассказать о проведённом нами эксперименте:

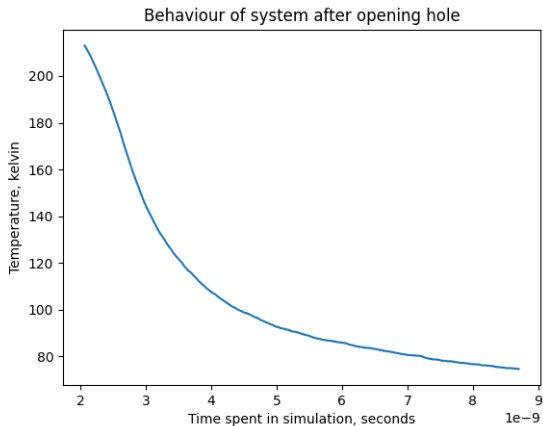
- В одной из стенок была проделана квадратная дыра.
- Зафиксировали количество горячих частиц до открытия дыры
- Открыли отверстие и подождали небольшое время (Около минуты)

# Experiment

Также хотелось бы рассказать о проведённом нами эксперименте:

- В одной из стенок была проделана квадратная дыра.
- Зафиксировали количество горячих частиц до открытия дыры
- Открыли отверстие и подождали небольшое время (Около минуты)
- Оказалось, что в начале температура уменьшается очень резко, вероятно всего из-за быстрых молекул, вероятность вылета которых существенно больше.

# Graph



# Experiment

Смотреть за молекулами одного газа конечно здорово, но есть эксперимент поинтереснее – диффузия.

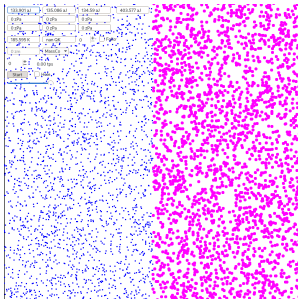


Рис.: Гелий и ксенон

# Experiment

Как мы показывали ранее, диффузия происходит. Но есть ли какие-то способы проверить, насколько корректно?

# Experiment

Как мы показывали ранее, диффузия происходит. Но есть ли какие-то способы проверить, насколько корректно?

Да! Мы можем посчитать коэффициент диффузии с помощью закона Фика для какой-то из стенок камеры:

$$\frac{\nu}{S \cdot \Delta t} = \frac{\Delta P}{l} D$$

где  $\frac{\nu}{\Delta t}$  – количество вещества, столкнувшегося со стенкой за время  $\Delta t$ ,  $S$  – площадь стенки,  $\Delta P$  – изменение давления за это время,  $l = \frac{V}{S}$ , а  $D$  – коэффициент, который хотим найти.



# Experiment

Реализовав все необходимые функции, получили  $D \sim 2 \cdot 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с. Но что это за попугай? Реально ли это?

# Experiment

Реализовав все необходимые функции, получили  $D \sim 2 \cdot 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с. Но что это за попугай? Реально ли это?

В начале обратимся к Википедии – в нормальных условиях для молекул газов коэффициент имеет порядок  $10^{-5}$ . Но наши условия совсем ненормальные – температура 185.6 К, а давление 1.6 МПа.

Для  $D$  имеем зависимость  $\sim \frac{T^{3/2}}{P}$ , подставив условия эксперимента получим, что наш коэффициент должен быть в 32 раза меньше значения из Википедии. Это около  $3.125 \cdot 10^{-7}$ , мы близко!

# Experiment

Но что если хотим посчитать коэффициент как-то по-другому, используя нашу модель? Можно ли это сделать?

# Experiment

Но что если хотим посчитать коэффициент как-то по-другому, используя нашу модель? Можно ли это сделать?

Существуют коэффициенты самодиффузии для каждого из газов в отдельности. Чтобы получить уже искомый коэффициент диффузии воспользуемся формулой

$$\frac{D_1 n_1 + D_2 n_2}{n_1 + n_2}$$

где  $n_i$  – концентрация соответствующего газа. В нашем случае концентрации равны, поэтому просто возьмём полусумму.

# Experiment

Но откуда взять эти коэффициенты самодиффузии?

Существует формула, использующая длину свободного пробега, а также среднюю скорость молекул. Мы их знаем!

$$D_{self} = \frac{1}{3} \lambda \bar{v}$$

Запустив симуляцию для каждого из газов поотдельности получим значения  $1.7 \cdot 10^{-7}$  и  $9.35 \cdot 10^{-7}$  для ксенона и гелия соответственно.

# Experiment

Получили альтернативное значение коэффициента диффузии  $\sim 5.5 \cdot 10^{-7}$ . Разница с изначальным значением  $2 \cdot 10^{-7}$  в 2.75 раза.

Многовато. Почему?

Если снова посмотреть на формулу коэффициента самодиффузии в учебнике, то увидим, что это всего лишь оценка, имеющая погрешность в 50%, а если ещё вспомнить, что  $\Delta t$  у нас не такое уж и маленькая, то полученная разность становится объяснимой.



- Смоделировали идеальный газ
- Собрали множество метрик





- Смоделировали идеальный газ
- Собрали множество метрик
- Проверили выполнение основного уравнение для идеального газа
- Проверили занимательный эксперимент с отверстием

- Смоделировали идеальный газ
- Собрали множество метрик
- Проверили выполнение основного уравнение для идеального газа
- Проверили занимательный эксперимент с отверстием
- Смоделировали диффузию двух газов и посчитали коэффициент диффузии разными способами