

# Компьютерное моделирование идеального газа, распределение Максвелла, флуктуации.

Н. В. Павличенко, А. С. Подкидышев

Московский физико-технический институт  
pavlichenko.nv@phystech.edu podkidishev.as@phystech.edu

22 января 2020 г.

Аннотация

В данной статье рассматривается ...

## I. Введение

Линейные методы использовались с самого зарождения таких наук как статистика и машинное обучение. Они действительно хороши с теоретической точки зрения: для них доказано много теорем, найдены доверительные интервалы для отклика в различных моделях и, более того, существует аналитическое решение для нахождения оптимальных параметров алгоритма. Однако они имеют существенные проблемы: они очень плохо работают при нелинейных зависимостях в данных. Собственно, хотелось бы иметь метод, который позволял бы использовать все достоинства линейных моделей и, при этом, который позволял бы приближать и нелинейные зависимости определенных видов. Идея ядерных методов заключается в том, что пространство признаков, в котором зависимость нелинейная, можно отобразить в другое пространство, в котором она уже будет линейной. Это пространство называется спрямляющим. При этом на самом деле, достаточно знать только как выражается скалярное произведение в новом пространстве, что мы и будем называть функцией ядра. Далее рассмотрим теоретический аспект подробнее.

## II. Цель работы

## III. Описание построенной модели

То, чем мы руководствуемся при моделировании микроскопических параметров. И как с помощью них измеряем макропараметры.

### i. Соударение молекул друг с другом

Критически важной выглядит задача обработки соударений частиц, так как именно от точности этого алгоритма будет зависеть установление распределений скоростей, энергий, и других параметров системы. Для этого воспользуемся задачей об угле рассеивания при налете одного шара на другой. Сначала перейдем в систему отсчета второй молекулы (до удара). Тогда в ней вторая частица будет неподвижна и мы сможем свести задачу к обозначенной выше. Теперь перейдем к системе отсчета центра масс. Итоговый вектор перехода равен

$$\vec{W} = \vec{v}_2 + \frac{1}{2}\vec{v}_1. \quad (1)$$

Скорость первой молекулы в новой системе координат тогда  $\vec{v}$ . Теперь построим ортонормированный базис в плоскости соударения. Пусть  $\vec{x} = \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|}$ ,  $\vec{z} = \frac{[\vec{v}_1, \vec{v}_2]}{||[\vec{v}_1, \vec{v}_2]||}$ ,

$\vec{y} = \frac{[\vec{x}, \vec{z}]}{||[\vec{x}, \vec{z}]||}$ . Затем возьмем случайный угол в плоскости  $XY$ , получится единичный вектор  $\vec{u} = x \cdot \cos \alpha + y \cdot \sin \alpha$ . Вспомним, что в СЦМ при налете одной частицы на другую, модуль скорости налетающей частицы остается неизменным. Тогда  $w = |v| \cdot \vec{u}$  — это вектор в СЦМ после столкновения. Тогда в лабораторной системе отсчета вектор  $\vec{v}_1 = \vec{w} + \vec{W}$ . Отсюда из закона сохранения импульса  $\vec{v}_2 = \vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}_1$ .

ii. Соударение молекул о стенки сосуда

Рассмотрим задачу о вычислении давления идеального газа на стенку сосуда. Среднее суммарная сила будет даваться формулой

$$\bar{f} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_{i=1}^n f_i(t) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt f_i(t) \quad (2)$$

После соударения молекулы со стенкой её импульс( $p$ ) меняется:

$$p(T) - p(0) = \int_0^\tau f_i(t) dt$$

Поскольку  $M_{\text{стенки}} \gg m_{\text{молекулы}}$ :

$$\Delta p = 2mv$$

где  $v$  - проекция на скорости перпендикулярная соответствующей стенке

Итого:

$$\bar{f} = \frac{1}{\tau} \sum_{j=1}^n 2m_j v_j \quad (3)$$

Число столкновений  $j$ -й частицы за интервал времени  $T$  равно:

$$K_j = \frac{T v_j}{2\tau}$$

$$\bar{f} = \sum_{j=1}^N \frac{m_j v_j^2}{L_z}$$

Т.к объем сосуда  $V = L_x \cdot L_y \cdot L_z$

$$P = \frac{\bar{f}}{L_x L_y} = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^N m_j v_j^2$$

С помощью полученной формулы найдем  $P$  и сравним его с уравнением Клапейрона-Менделеева:

$$PV = \nu RT$$

T, K	V, m/s	N	P, $10^{-17}$	P, $10^{-17}$
104,69	1	7000	1,01	1,01
186,95	1	10000	2,58	2,58
291,25	1	10000	4,02	4,02
418,00	1	10000	5,79	5,77
570,43	1	10000	7,88	7,88
104,62	1	10000	1,44	1,44
104,63	0,729	10000	1,98	1,98
104,63	0,512	10000	2,82	2,82
104,63	0,343	10000	4,2	4,21
104,63	0,216	10000	6,7	6,69
104,63	0,125	10000	11,5	11,56
104,95	1	20000	2,9	2,90

Таблица 1: Сравнение Уравнения Менделеева-Клапейрона и давление полученное с помощью нашей модели

iii. Распределение Максвелла

Одной из самых важных частей работы было проверить установление распределения Максвелла модуля скоростей молекул. Для этого начальными параметрами симуляции были выбраны 1000 молекул одноатомного газа с массой молекулы  $4.82 \cdot 10^{-26}$  кг, в сосуде, имеющим форму куба со стороной 15см, которым были даны изначально одинаковые по модулю скорости, равные 284 м/с. Уже после 3 секунд симуляционного времени, установилось максвелловское распределение по модулям скоростей молекул, которое изображено на рисунке.

Теоретически распределение должно иметь такую зависимость (обозначено на графике

пунктиром):

$$F(v) = \int_0^v 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad (4)$$

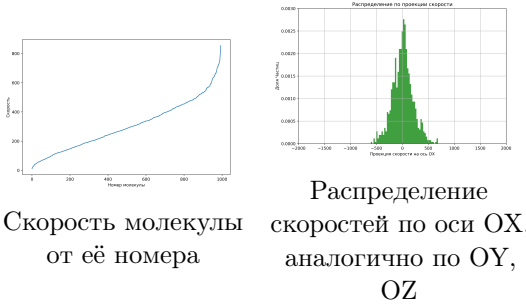


Рис. 1: Установление скоростей при прошествии большого количества времени

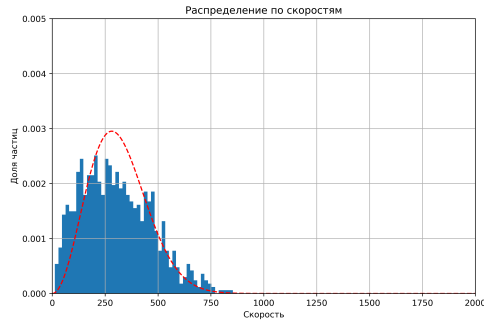


Рис. 2: Распределение доли молекул  $\left(\frac{dn}{n}(v)\right)$  по скоростям, полученное через большой промежуток времени

Вывод: Также были построены графики скоростей молекул и распределение проекций скоростей на ось OX. Заметим небольшое смещение гистограммы относительно аналитически полученного распределения влево. Это может быть связано с тем, что распределение направлений при столкновении молекул на самом деле не является равномерным. Такая неточность дает небольшую ошибку, но это можно будет учесть в последующих версиях программы.

#### iv. Распределение по энергиям в поле силы тяжести

Дополнительно рассмотрим распределение энергий в поле потенциальных сил. Для примера рассмотрим систему, в которой установилось максвелловское распределение по скоростям, состоящую из 1000 частиц в кубе  $0.15 \times 0.15 \times 0.15$ м при температуре 104К, в поле силы тяжести.

На рисунке изображена гистограмма, распределения по энергиям после 30 секунд симуляционного времени. Как можно заметить, зависимость доли частиц от энергии является экспоненциальной, и можно предположить, что она представляет из себя распределение Больцмана.

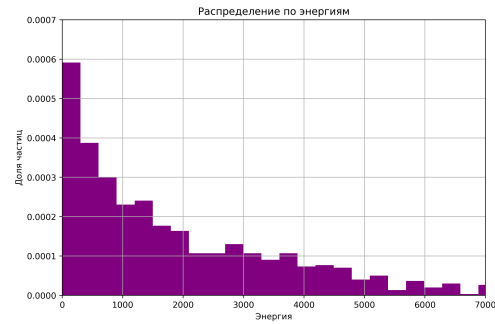


Рис. 3: Распределение доли молекул  $\left(\frac{dn}{n}(v)\right)$  по скоростям, полученное через большой промежуток времени

#### v. Уравнение адиабаты

"Сожмем" наш газ под поршнем и измерим зависимость  $P(V)$ : Уравнение адиабаты для идеального газа:

$$PV^\gamma = const$$

Тогда зная начальную точку  $P_0, V_0$  не трудно построить график  $P(V)$ :

$$P = \frac{P_0 V_0^\gamma}{V^\gamma}$$

Т.к мы моделируем одноатомный газ, то  $\gamma = \frac{5}{3}$

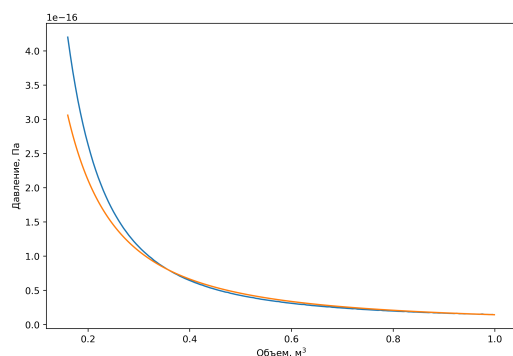


Рис. 4: Сравнение графика адиабаты нашей системы и уравнением адиабаты. Где blue — наша, Orange — уравнение адиабаты

Вывод: Адиабатический процесс над газом чувствителен к числу молекул в сосуде и шагу времени симуляции, поэтому заметна некоторая ошибка между аналитической формулой и полученной зависимостью. Однако, ясно видно, что степенная зависимость похожа на действительную (то есть  $\gamma \approx \frac{5}{3}\%$ )

#### IV. Заключение

В данной работе мы рассмотрели задачи классификации и регрессии в машинном обучении. Рассмотрели метод опорных векторов как их возможное решение, поставили задачу оптимизации и предложили алгоритм ее решения для обучения метода. Результаты показали, что метод применим для получения хорошего качества как на синтетических данных, так и на реальных. Кроме того, идеи перевода признаков в спрямляющее пространство применимы не только для линейных алгоритмов, но и для более сложных моделей.

#### Список литературы

- [Shawe-Taylor, J., Cristianini, N., 2004]  
 Shawe-Taylor, J., Cristianini, N. (2004).  
 Kernel Methods for Pattern Analysis.  
 Cambridge University Press

[S. Boyd, L. Vandenberghe, 2009] S. Boyd,  
 L. Vandenberghe (2009). Convex  
 Optimization. Cambridge University Press