

# Projekat iz predmeta

## 13E063SF Statistička fizika

Elektrotehnički fakultet u Beogradu

### Idealni termometar

Temperatura predstavlja meru unutrašnje energije nekog sistema. Merenje temperature uvek se zasniva na merenju nekog drugog parametra sistema koji se zatim dovodi u vezu sa temperaturom. Idealni termometar bi trebalo da ima jako slabu interakciju sa sistemom čija se temperatura meri, tako da je perturbacija tog sistema zanemarljivo mala, a opet dovoljno jaku interakciju tako da merenje temperature bude validno. U ovom projektu biće obrađen primer jednog teorijskog termometra.

Posmatraju se dva sistema u kontaktu. Jedan sistem predstavlja *Maksvelovog demona* koji u ovom primeru ima ulogu termometra. *Maksvelov demon* razmenjuje energiju sa drugim sistemom-idealnim gasom koji se sastoji od velikog broja čestica i kroz ovakvu interakciju meri temperaturu idealnog gasa. Simulirati interakciju između *Maksvelovog demona* i posmatranog idealnog gasa prema sledećem uputstvu:

1. Idealni gas se sastoji od  $N = 400$  molekula helijuma, molarne mase  $M = 4$  g/mol na temperaturi od  $T = 300$  K. Izračunati unutrašnju energiju  $U$  ovakvog gasa i priložiti izvođenje i izračunatu vrednost. Molekuli helijuma mogu imati brzine u sva tri pravca Dekartovog koordinatnog sistema. Radi jednostavnosti, u početnom stanju, podesiti da svaki molekul ima  $|\vec{v}_x| = |\vec{v}_y| = |\vec{v}_z| = v_0$ . Intenzitet  $v_0$  podesiti tako da ukupna energija gasa odgovara izračunatoj unutrašnjoj energiji gasa. Priložiti izvođenje potrebnog intenziteta brzine i navesti izračunatu vrednost.
2. Neka je početna energija *demon*  $E_d$  takva da odgovara srednjoj energiji koju bi imao na temperaturi  $T_d = 0$  K.
3. Idealni gas i njemu pridruženog demona smatrati sistemom čija se ukupna energija održava.
4. Napraviti ansambl ovakvih sistema, tj. napraviti određen broj kopija ovog idealnog gasa (zbog zahtevnosti simulacije, napraviti recimo oko  $N_s = 10 - 20$  kopija) i svakoj kopiji pridružiti po jednog *demon*. Zbog zahtevnosti simulacije, prvo testirati programski kod na ansamblu koji se sastoji od samo jedne kopije sistema gas-*demon*.
5. U okviru svakog ansambla, svaki *demon* na isti način interaguje sa sebi pridruženim idealnim gasom. *Demon* proizvoljno (sa uniformnom raspodelom) bira neki od molekula. Na primer, *demon* iz prvog člana ansambla će iz skupa od  $N$  molekula, u kome svaki molekul ima podjednaku verovatnoću da bude izabran, izabrati molekul broj 1, *demon* iz drugog člana ansambla će iz sebi pridruženog idealnog gasa izabrati molekul broj 70, *demon* iz trećeg člana ansambla molekul broj 23...
6. Nakon što izabere molekul, *demon* proizvoljno (sa uniformnom raspodelom) bira jednu komponentu brzine molekula ( $v_x$ ,  $v_y$  ili  $v_z$  komponentu brzine) i pokušava da promeni intenzitet izabrane komponente brzine.
7. *Demon* pokušava da promeni intenzitet izabrane komponente brzine, izabranog molekula, za proizvoljno  $\delta$  iz opsega  $[-\delta_m, \delta_m]$ , gde za  $\delta_m$  uzeti  $\delta_m = 5v_0$ . Drugim rečima, ako je *demon* izabrao  $k$ -ti molekul i  $j$ -tu komponentu brzine ( $j = x, y, z$ ) i ako je sa uniformnom raspodelom izabrao  $\delta$  iz opsega  $[-\delta_m, \delta_m]$ , *demon* pokušava da realizuje da nov intenzitet posmatrane komponente brzine bude  $v_j^k + \delta$ .

- (a) Ukoliko je promena brzine takva da *demon* smanjuje intenzitet komponente brzine izabranom molekulu (ukoliko je  $\delta < 0$ ), *demon* uzima energiju od idealnog gasa, te je *demonu* potrebno povećati energiju za odgovarajuće  $\Delta E$ , a idealnom gasu je potrebno smanjiti unutrašnju energiju za  $\Delta E$ .
- (b) Ukoliko je promena brzine takva da *demon* povećava intenzitet komponente brzine izabranom molekulu (ukoliko je  $\delta > 0$ ), *demon* predaje energiju idealnom gasu. U ovom slučaju promena brzine se realizuje samo ako *demon* u tom trenutku poseduje dovoljnu količinu energije koja je potrebna za takvu promenu, odnosno ukoliko je u tom trenutku  $E_d \geq \Delta E$ . Ukoliko se promena brzine realizuje, energija *demon*a se smanjuje za odgovarajuće  $\Delta E$ , a unutrašnja energija gasa se povećava za  $\Delta E$ . Ukoliko se promena brzine nije realizovala, *demon* i gas ostaju sa nepromenjenim energijama.
8. Tačke 5, 6 i 7 se ponavljaju veliki broj puta ( $50 \times 10^3 - 150 \times 10^3$  iteracija) kada se očekuje da sistem u okviru svakog člana ansambla uđe u ravnotežno stanje.
9. Nakon velikog broja iteracija, izabrati proizvoljnu kopiju sistema iz posmatranog ansambla.
- (a) Za izabranu kopiju nacrtati i u okviru izveštaja priložiti histogram raspodele intenziteta brzina molekula idealnog gasa (**grafik 1**).
- (b) Kakvog je on oblika? Napisati teorijski očekivanu formu raspodele po intenzitetima brzina za posmatrani idealni gas u stanju termodinamičke ravnoteže. Da li se raspodela koju prikazuje dobijeni histogram slaže sa teorijski očekivanom raspodelom? Na posebnom grafiku preklopiti histogram i teorijski očekivanu raspodelu (**grafik 2**).
- (c) Koliko iznosi najverovatnija brzina  $v_{mp}$  molekula idealnog gasa koja je dobijena simulacijom? Izračunati teorijski očekivanu vrednost najverovatnije brzine i priložiti izvođenje.
- (d) Za izabranu kopiju nacrtati i u okviru izveštaja priložiti histogram raspodele energija *demon*a (**grafik 3**).
- (e) Kakvog je on oblika? Napisati teorijski očekivanu formu raspodele energije *demon*a u stanju termodinamičke ravnoteže. Da li se raspodela koju prikazuje dobijeni histogram slaže sa teorijski očekivanom raspodelom?
- (f) Koliko iznosi srednja energija gasa, a koliko iznosi srednja energija *demon*a? Koja temperatura odgovara dobijenoj srednjoj energiji gasa, a koja temperatura odgovara dobijenoj srednjoj energiji *demon*a? Da li je *demon* uticao na temperaturu gasa? Da li je interakcija sa gasom uticala na temperaturu *demon*a?
10. U svakoj od kopija sistema, na osnovu rezultata simulacije odrediti srednju vrednost energije *demon*a  $\langle E_d \rangle_i$  ( $i = 1, \dots, N_s$ ), a zatim odrediti srednju vrednost ove energije po ansamblu  $\langle E_d \rangle_{ans}$ . Kolika je temperatura *demon*a  $T_d$  koja odgovara dobijenoj vrednosti  $\langle E_d \rangle_{ans}$ ?
11. U svakoj od kopija sistema, na osnovu rezultata simulacije odrediti vrednost unutrašnje energije gasa  $U_i$  ( $i = 1, \dots, N_s$ ), a zatim odrediti srednju vrednost ove energije po ansamblu  $U_{ans}$ . Kolika je temperatura gasa  $T$  koja odgovara dobijenoj vrednosti unutrašnje energije  $U_{ans}$ ?
12. Komentarisati dobijene vrednosti za temperaturu *demon*a i temperaturu idealnog gasa.

---

Izveštaj sa urađenim projektom treba da na naslovnoj strani sadrži naslov "PROJEKTNI ZADATAK IZ STATISTIČKE FIZIKE, Elektrotehnički fakultet u Beogradu, školska 20xx/xx godina", kao i ime, prezime i broj indeksa studenta.

Tekst projektnog zadatka treba da sadrži odgovore na postavljena pitanja, tražene grafike i programski kod u programskom jeziku po izboru, sa komentarima linija/segmenta programskog koda koji detaljno objašnjavaju linije/segmente programskog koda. Svi grafici treba imaju detaljno obeležene ose (veličina koja se prikazuje na osi i odgovarajuće merne jedinice) i odgovarajuće naslove.