

Simulação de um Gás Bidimensional

YOSHIHARU KOHAYAKAWA*, RONNIE MAINIERI*
and OTAVIANO HELENE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

Recebido em 2/8/82

We present here the result of a computer simulation of two two-dimensional gases, initially at different temperatures. The results are effective in demonstrating the energy equipartition. The observed energy and velocity distribution after the equilibrium agree with the proper (two-dimensional) theoretical distribution.

Apresentamos aqui resultados obtidos por uma simulação em computador de uma mistura de dois gases bidimensionais, inicialmente a temperaturas diferentes. Esses resultados têm por objetivo ilustrar a equipartição da energia, observando-se a evolução temporal da energia total de cada um dos gases. Observando as distribuições de energia e velocidade entre as moléculas dos gases depois do equilíbrio, conseguimos também ilustrações para a distribuição da Maxwell-Boltzmann.

INTRODUÇÃO

O uso de técnicas de simulação por computação no estudo de sistemas de muitas partículas tem sido frequente tanto com finalidades didáticas^{1,2} como com finalidades de pesquisa em mecânica estatística³.

Essas simulações podem ser feitas usando-se técnicas estatísticas (método de Monte Carlo)^{1,2} ou métodos completamente dinâmicos³. No

* Estudante de Graduação em Física

primeiro caso pode-se sortear um par de partículas e, independentemente de suas posições, provocar uma interação entre elas. Essa interação pode ser feita sorteando-se também o parâmetro de impacto¹. No tratamento de problema de forma completamente dinâmica considera-se a trajetória de cada uma das partículas, sendo que a interação entre elas só ocorre quando suas superfícies se tocam; neste ponto são resolvidas as equações de movimento e determinadas as condições finais depois do choque (velocidades e direções destas). No presente trabalho optamos por este último procedimento que, embora custe um tempo bem maior de computação do que o método estatístico, deve dar, acreditamos, uma maior confiança aos estudantes nos resultados obtidos.

Nosso interesse maior no problema é conseguir uma ilustração para o teorema da equipartição da energia e para as distribuições de energia e velocidade das moléculas de um gás. Quanto a esses pontos, chamamos a atenção de que o teorema pode soar estranho aos estudantes, especialmente aqueles dos primeiros anos de graduação. A dúvida pode ser manifestada com perguntas do tipo "por que é a energia que é equipartida e não a velocidade, ou \sqrt{E} , ou E^2 ou qualquer outra coisa"? Quando se tenta responder a essa pergunta com uma demonstração formal do teorema da equipartição da energia, deparamos com outra dificuldade: a compreensão (ou, muitas vezes, a aceitação), por parte dos estudantes, da distribuição de Maxwell-Boltzmann.

Nós acreditamos que os resultados aqui apresentados, que aparecem resumidos nas figuras, possam ajudar no aprendizado e no ensino da termodinâmica e da mecânica estatística.

Na nossa abordagem consideramos um gás constituído de dois grupos de 75 moléculas cada. Esse pequeno número de moléculas consideradas é devido a problemas com tempos excessivamente longos de computação. Como o problema foi tratado de forma completamente dinâmica, sem qualquer fator estatístico na determinação das interações, precisamos considerar a interação entre todos os pares de moléculas. Como o total de pares possíveis cresce com o quadrado do número de moléculas, o tempo de computação também cresce da mesma forma, obrigando-nos a restringir esse número.

O GAS

Para simplificação do problema consideramos um gás bidimensional, com moléculas circulares. As forças de interação, tanto entre moléculas como entre estas e as paredes do recipiente, foram supostas radiais, de tal forma a não provocarem rotações das partículas. Os choques eram puramente elásticos, havendo portanto conservação da energia mecânica (na forma de velocidade das moléculas). As forças radiais eram nulas, menos no instante de interação, quando eram repulsivas e infinitas — os choques correspondem portanto àqueles entre discos "duros" deslizando em uma mesa.

Um dos grupos de 75 moléculas, que chamaremos de gás 1, é constituído de discos de raio 0,25 unidades de comprimento, uc (veja apêndice), e massa 1,2 unidades de massa, um . O outro grupo de 75 partículas, o gás 2, é constituído de discos de raio 0,15 uc e massa 0,8 um . O recipiente que contém os gases é um quadrado de 10 uc x 10 uc .

As velocidades iniciais das partículas foram geradas ao acaso, obedecendo-se uma distribuição de Maxwell-Boltzmann para os módulos destas e uma distribuição uniforme para as direções. A energia total inicial do gás 1 era de 1644 unidades de energia, ue , e do gás 2, 108 ue . No início as partículas de ambos os gases foram distribuídas uniformemente no recipiente que as continha.

A evolução temporal das velocidades e posições das partículas foi seguida por um tempo de 1,2 unidades de tempo, ut . Durante esse tempo houve um total de aproximadamente 930 choques entre moléculas e 1070 choques com as paredes do recipiente. Ou seja, cada molécula chocou-se em média 12,4 vezes com alguma outra molécula e 7,1 vezes com as paredes do recipiente.

EQUIPARTIÇÃO DA ENERGIA

A partir da situação inicial, quando os gases tinham energias totais bem diferentes, os choques entre as partículas provocaram uma redistribuição da energia. O efeito global dessa redistribuição é no sen-

tido de diminuir, em média, a energia das moléculas do gás 1 e aumentar, também em média, a energia das moléculas do gás 2.

A figura 1 mostra a energia total dos dois gases em instantes sucessivos. Como os dois gases tem a mesma quantidade de partículas, e cada uma delas tem dois graus de liberdade, o equilíbrio corresponde a valores iguais das energias totais dos dois gases. Como podemos observar nessa figura o equilíbrio é atingido aproximadamente na terça parte do tempo total evoluído, $t \approx 0,4ut$, ou seja, quando cada partícula sofreu, em média, aproximadamente 4 choques com outras partículas.

A figura 2 mostra a diferença energética entre os dois gases. A curva continua corresponde a uma exponencial ajustada. Na figura 1 mostramos a flutuação estatística esperada que deve afetar as energias⁴.

O equilíbrio é atingido quando as energias totais dos dois gases são iguais, embora suas moléculas tenham características (raio e massa) diferentes. Isso é previsto pelo teorema da equipartição da energia, pois ambos os gases tem a mesma quantidade total de graus de liberdade e as energias dependem quadraticamente das quantidades de movimento.

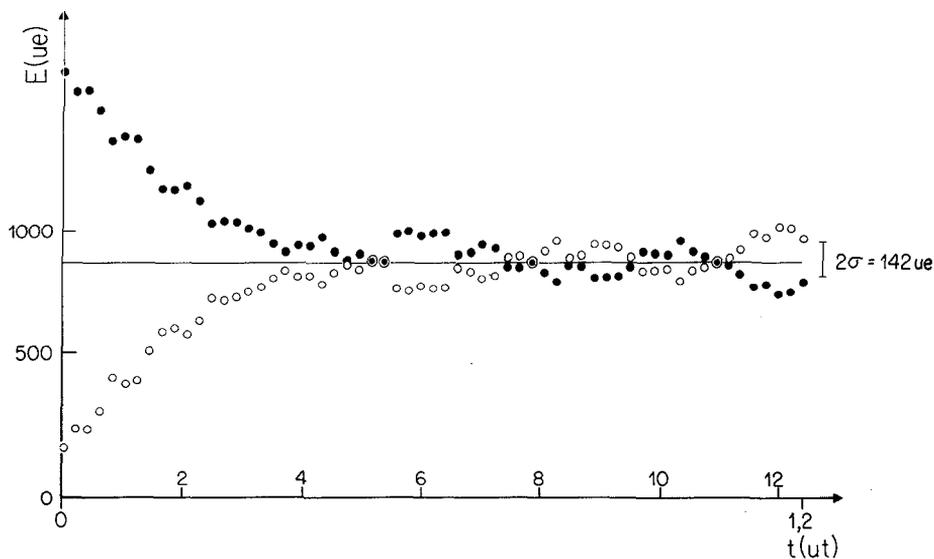


Fig.1 - Evolução temporal das energias totais dos gases. A escala inferior no eixo do tempo corresponde a ut ; a escala superior corresponde ao dobro do número médio de choques entre partículas.

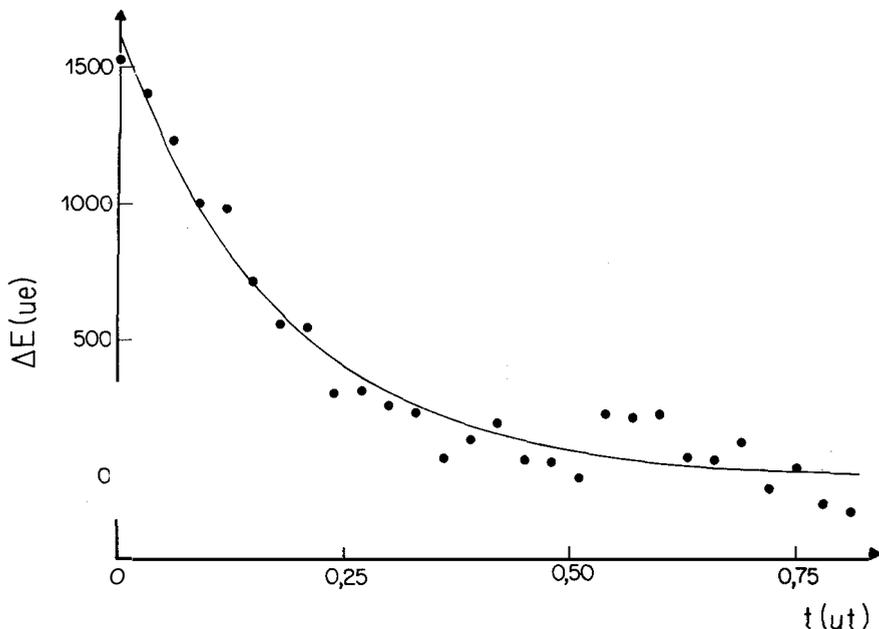


Fig.2 - Evolução temporal da diferença entre as energias totais do gás 1 e do gás 2. A curva contínua corresponde a uma exponencial ajustada aos pontos.

DISTRIBUIÇÃO DE ENERGIA E VELOCIDADE

A figura 3 mostra um histograma do número de partículas por intervalo de energia observado no gás 1, depois de atingido o equilíbrio. Como o número total de partículas do gás 1 é muito pequeno, um histograma feito a partir da observação do gás em um determinado instante apresentaria poucas partículas em cada intervalo de energia, implicando uma grande flutuação estatística. Assim a figura 3 foi feita acumulando-se dados de oito observações instantâneas do gás deste $t=0, 5ut$ até $t=1, 2ut$. O intervalo de tempo entre duas observações sucessivas, $\Delta t=0, 1ut$, é suficientemente longo para que as distribuições sucessivas acumuladas sejam estatisticamente diferentes entre si: em $\Delta t=0, 1ut$, cada molécula sofre em média aproximadamente 1 choque com outra molécula, alterando portanto sua energia.

A figura 4 mostra um histograma equivalente àquele da figura 3, mas para o gás 2. Este histograma foi obtido com o mesmo procedimento

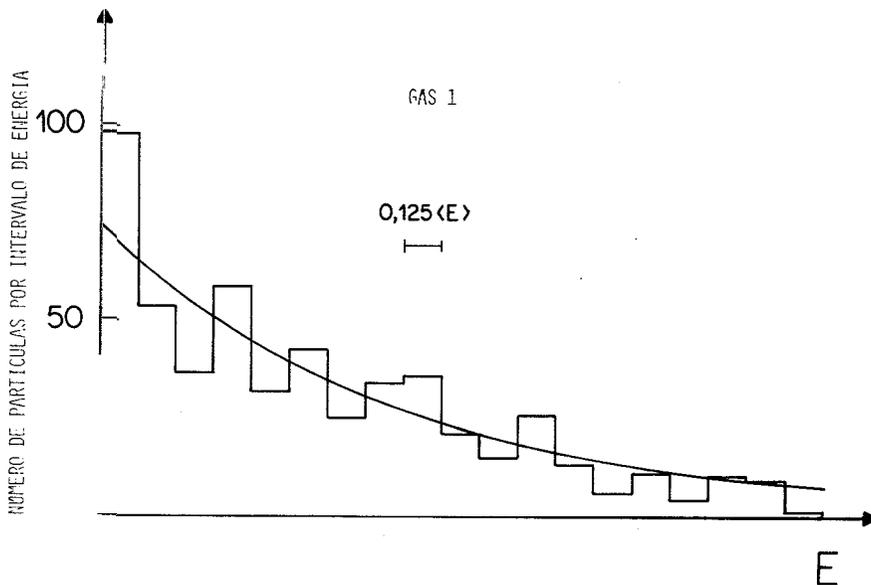


Fig.3 - Histograma da distribuição de energia entre as moléculas do gás 1, obtido conforme descrito no texto. A curva contínua corresponde a distribuição do Boltzmann esperada para um gás bidimensional.

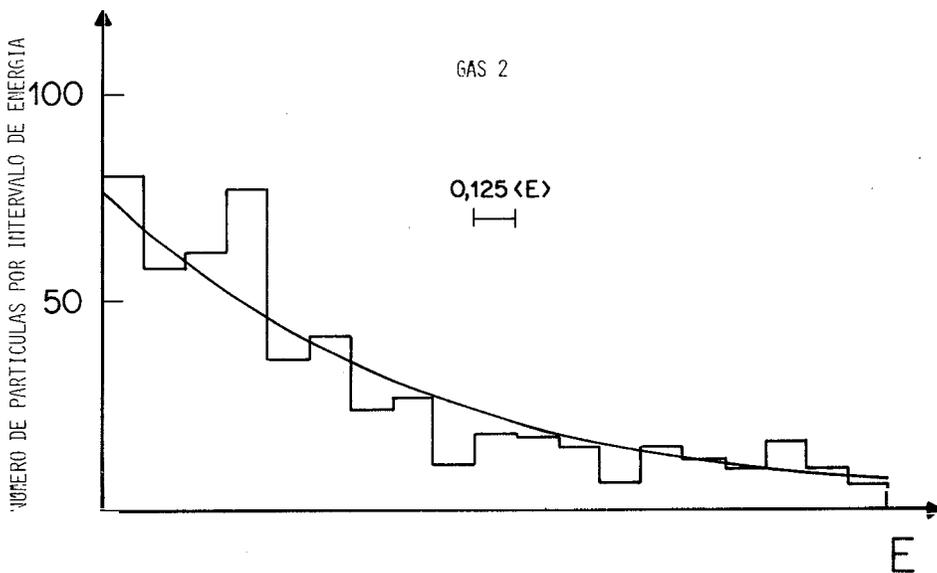


Fig.4 - O mesmo que a figura 3, aqui para o gás 2

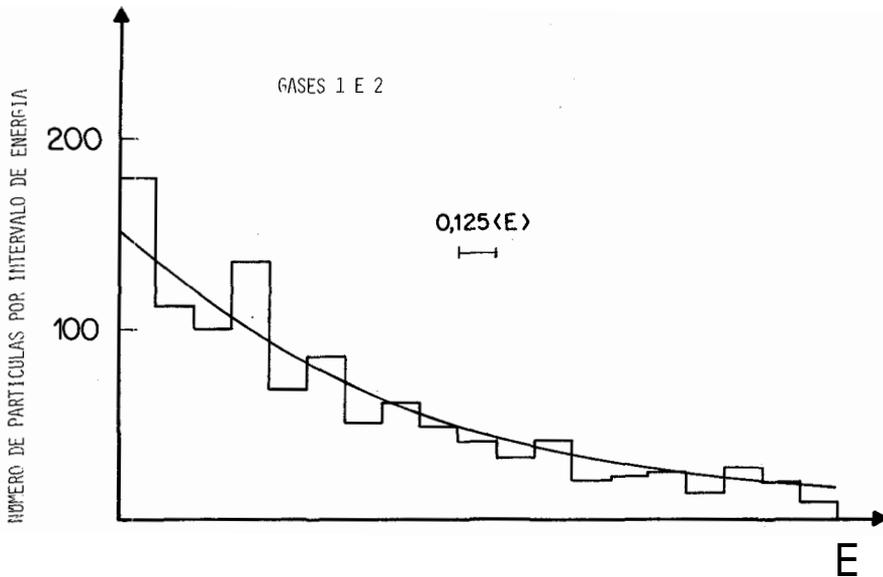


Fig.5 - Esta figura corresponde a soma dos histogramas das figuras 3 e 4.

que o anterior. A figura 5 corresponde a soma dos dois histogramas anteriores.

As curvas contínuas nas figuras 3, 4 e 5 correspondem à distribuição de Boltzmann adequada a um gás bidimensional,

$$F(E) = N e^{-E/\langle E \rangle} \quad (1)$$

Nesta equação E é a energia da partícula e $\langle E \rangle$ a energia média por partícula depois do equilíbrio,

$$\langle E \rangle = \frac{1752ue}{150} = 11,7 ue \quad (2)$$

O fator de normalização N da equação (1) é tal que

$$\int F(E) dE = \text{número total de partículas}, \quad (3)$$

que corresponde a $N=600$ para as figs. 3 e 4 e $N=1200$ para a fig.5.

As figuras 3, 4 e 5 mostram um bom acordo entre a distribui-

ção de Boltzmann e a observação. As diferenças são devidas apenas à flutuação estatística.

As figuras 6 e 7 mostram as distribuições de velocidade (Maxwell-Boltzmann) adequadas aos gases bidimensionais e os histogramas correspondentes às observações. Também aqui foram acumuladas oito distribuições correspondentes a observações instantâneas desde $t=0, 5ut$ até $t=1, 2ut$, em intervalos de $0,1ut$. Ambas as figuras mostram um bom acordo entre as observações e as distribuições previstas.

As distribuições de velocidade esperadas, as distribuições de Maxwell-Boltzmann em duas dimensões, são dadas pela expressão

$$F(v) = N \cdot v \cdot e^{-mv^2/2\langle E \rangle} \quad (4)$$

onde o fator de normalização é

$$N = \frac{m \cdot 600}{\langle E \rangle}, \quad (5)$$

sendo m e $\langle E \rangle$ dados respectivamente em u e ue .

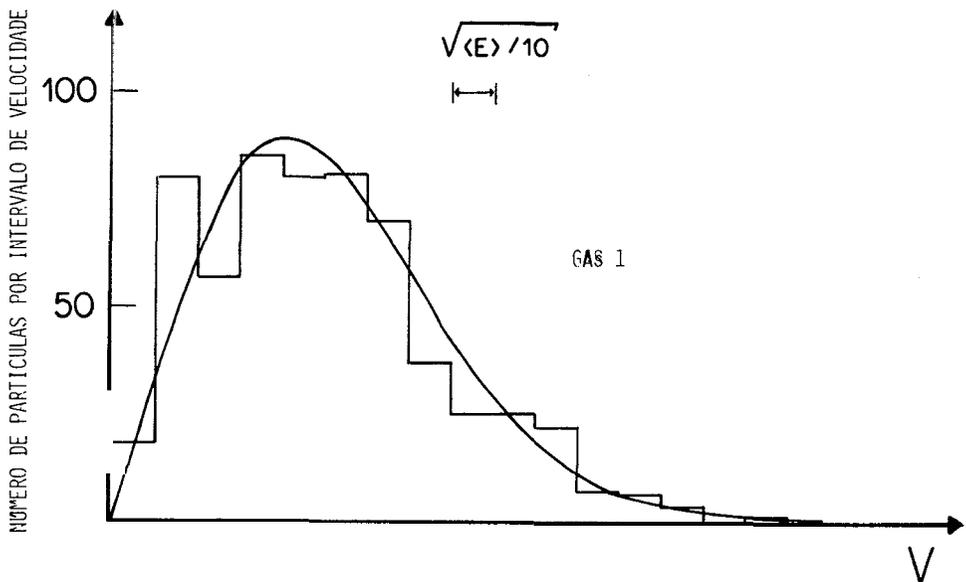


Fig.6 - Histograma das distribuições de velocidade das moléculas do gás 1. O intervalo de cada canal, indicado na figura, estará em uv quando a energia média estiver em ue . A curva contínua corresponde a distribuição de Maxwell-Boltzmann adequada a um gás bidimensional.

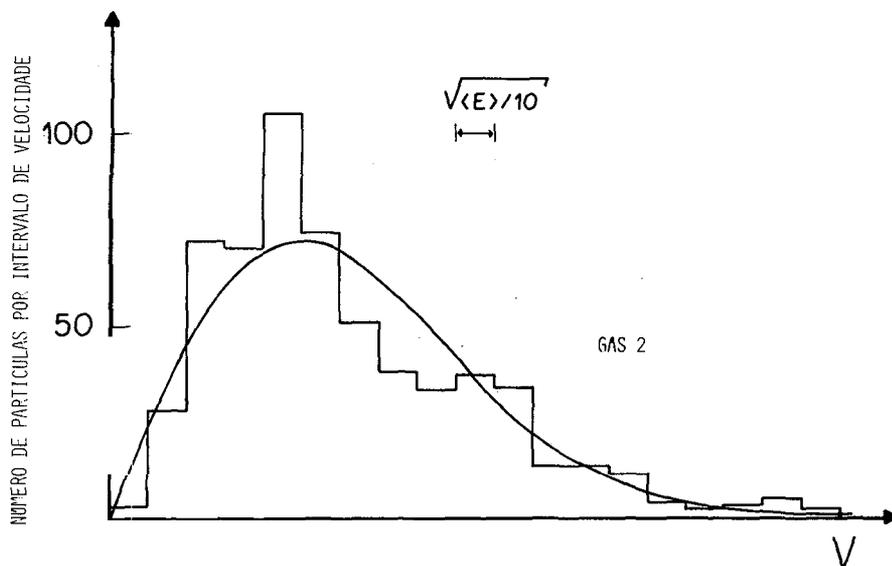


Fig.7 - O mesmo que a figura 6, para o gás 2.

CONCLUSÃO

Esperamos que os resultados deste trabalho, especialmente aqueles contidos nas figuras, venham a servir como um recurso adicional no ensino e no aprendizado de alguns pontos da teoria cinética dos gases e da termodinâmica.

Devemos chamar a atenção para o fato de que, na simulação feita, a fração da área do recipiente ocupada pelos gases é bastante grande,

$$f = \frac{75 \cdot \pi \cdot (r_1^2 + r_2^2)}{10 \times 10} \approx 0,2 . \quad (6)$$

No entanto, apesar disso, o sistema pode ser considerado como estando na fase gasosa e não na fase sólida. Isso aconteceria se as moléculas ficassem restritas a uma porção limitada da área total, o que ocorre quando a fração de ocupação é bem maior³.

A figura 8 mostra, apenas como uma curiosidade, a trajetória de duas partículas do gás 1. Essa figura não tem qualquer outra pretensão além de ilustrar o bonito efeito do movimento browniano.

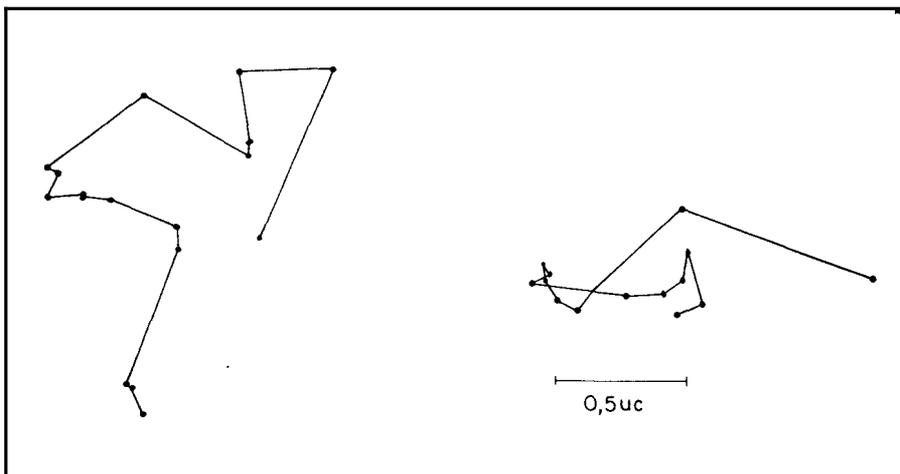


Fig.8 - Trajetória de duas partículas do gás 1.

Os autores gostariam de agradecer aos professores Max Cohenca e Philippe Gouffon, responsáveis pelo computador PDP11/45 do Departamento de Física Experimental do Instituto de Física da USP usado na simulação aqui apresentada. Agradecemos também ao Dr. Mário José de Oliveira por discussões e sugestões durante o desenvolvimento deste trabalho.

APENDICE

O sistema de unidade adotado é arbitrário, uma vez que não houve a preocupação desnecessária em reproduzir uma situação real. As unidades fundamentais são as de tempo, u_t , comprimento, u_c , e massa, u_m . As outras unidades necessárias no desenvolvimento decorrem destas e são

$$[\text{velocidade}] = uv = \frac{u_c}{u_t}$$

$$[\text{energia}] = ue = \frac{u_m \cdot (u_c)^2}{(u_t)^2}$$

Nas figuras 6 e 7 estão indicadas as escalas dos eixos das velocidades. Se $\langle E \rangle$ for tomado em ue , então o segmento indicado estará na unidade uv .

REFERENCIAS

1. J.Novak e A.B.Bortz, Am.J.Phys. 38, 1402 (1970).
2. M.Eger e M.Kress, Am.J.Phys. 50, 120 (1982).
3. B.J.Alder e T.E.Wainwright, Phys. Rev. 127, 359 (1962).
4. F.Reif, "*Statistical Physics, Berkeley Physics Course*" - McGraw- Hill Book Company.