Mieszanie gazów – symulacja

Tomasz Sowiński

Dyskutowany przez nas ostatnio zabawny model Paula Ehrenfesta obrazujący dochodzenie układów do stanu równowagi jest bardzo pouczający. Jest on doskonałą ilustracją zdumiewającego faktu, że choć prawa ewolucji traktują oba kierunki przeskakiwania pcheł równoprawnie, to wraz z upływem czasu liczba pcheł zawsze zmienia się na psach w taki sposób, aby doprowadzić do jej wyrównania. Model ten, choć bardzo ciekawy, ma jedną podstawową wadę. Trzeba mieć bardzo dużo dobrej woli, aby uznać, że jest on dobrą ilustracją dla jakichś zjawisk fizycznych – tych zachodzących w przyrodzie (może poza sytuacją rozprzestrzeniania się gazu, o której wspominaliśmy). Dlatego dziś zapoznamy się z innym modelem teoretycznym, którego idea jest bliższa temu, co rozumiemy pod pojęciem modelu fizycznego.

Tomasz Sowiński jest asystentem w Centrum Fizyki Teoretycznej PAN. W 2005 roku skończył z wyróżnieniem studia na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego w zakresie fizyki teoretycznej, a trzy lata później uzyskał tam stopień naukowy doktora. Od lat zajmuje się popularyzacją nauk przyrodniczych.

DWA WIELKIE UMYSŁY

Autorami modelu fizycznego, którym się dziś zajmiemy, byli dwaj wielcy naukowcy żyjący w XVIII wieku – Szwajcar Daniel Bernoulli i Francuz Pierre Laplace. Właściwie, będąc zgodnym z historyczną prawdą, powinniśmy raczej powiedzieć, że Bernoulli model zaproponował, a Laplace go rozpropagował. W każdym razie dziś jest on znany jako model mieszania się gazów Bernoullego–Laplace'a. Zanim przejdziemy do jego omówienia, warto na chwilę zatrzymać się i przyjrzeć sylwetkom tych dwóch geniuszy.

Bernoulli urodził się w ostatnim roku XVII wieku, a już w 1725 został profesorem matematyki w Petersburgu. Osiem lat później został profesorem botaniki w Bazylei, a w roku 1750 objął tam katedrę fizyki. Jak widać, był zatem bardzo wszechstronnie uzdolnionym człowiekiem i we wszystkich dziedzinach, którymi się zajmował, był poważanym naukowcem. Najbardziej znany jest chyba ze sformułowania tzw. wzoru Bernoullego opisującego zachowanie się idealnej, nieściśliwej cieczy i wytłumaczenia tym sposobem tzw. dynamicznego paradoksu hydrostatycznego. Zapewne za jakiś czas będziemy mieli okazję o nim porozmawiać. Jego zamiłowanie do paradoksów było zresztą bardzo powszechnie znane. W świecie matematyki zasłynął ze sformułowania tzw. paradoksu petersburskiego. W dużym skrócie mówiąc, polega on na obserwacji, że istnieją takie gry hazardowe, w których można wygrać nieskończoną ilość pieniędzy, ale zdrowy rozsądek nie pozwala nam w nie grać.

Pierre Laplace (1749–1827) był głównie matematykiem i astronomem. Jeśli chodzi o fizykę, to jest najbardziej znany ze swojego deterministycznego poglądu na świat, który wynikał wprost z jego fascynacji prawami Newtona. Do historii nauki i filozofii przeszły jego słowa, które w wolnym tłumaczeniu brzmią: „Obecny stan całego Wszechświata jest prostą konsekwencją jego przeszłości i bezpośrednią przyczyną jego przyszłości. Gdyby jakiś Intelekt posiadał wiedzę o położeniach i prędkościach wszystkich obiektów we Wszechświecie i wszystkich siłach nań działających oraz potrafiłby poddać te dane analizie, to mógłby poznać całą przyszłość Wszechświata”. Ten tajemniczy stwór nazwany przez Laplace'a Intelektem jest często nazywany Demonem Laplace'a. Choć sam Laplace'a nigdy tego nie robił, to wielu późniejszych filozofów utożsamiało Demona z wszechwiedzącym Bogiem.

Dzisiaj tych dwóch wielkich naukowców interesuje nas jednak z zupełnie innej przyczyny. Opracowali i rozpowszechnili oni bowiem bardzo intuicyjny i zrozumiały model mieszania się dwóch gazów. Najwyższy czas, aby się nim zająć.

SYTUACJA DOŚWIADCZALNA

Sytuacja fizyczna, którą będziemy rozważali, jest bardzo prosta. Dwa różne gazy znajdują się w jednym pojemniku, ale są rozdzielone nieprzepuszczalną przegrodą. W pewnej chwili usuwamy przegrodę, umożliwiając swobodny przepływ gazów w całej objętości. Jeśli wykonalibyśmy taki eksperyment w rzeczywistości, to zaobserwujemy, że wraz z upływem czasu oba gazy mieszają się i dążą do równomiernego wypełnienia obu części pojemnika. Ten proces fizyczny już wcześniej opisywaliśmy (MT 09/2008), ale wtedy nie było dla nas jasne, dlaczego tak się dzieje.

Posiadając już odpowiednią wiedzę z poprzednich dyskusji, dodajmy, że proces mieszania się dwóch gazów jest w pewnym sensie bardzo dziwny. Jest tak dlatego, że choć prawa dynamiki nim rządzące posiadają symetrię odwrócenia w czasie (MT 09/2008), to nie ulega żadnej wątpliwości, że doświadczalnie jest wyróżniony kierunek upływu czasu – gazy dążą do równomiernego wypełnienia całego pojemnika. Przepraszam, że przypominam w tym miejscu to, co już wcześniej tak dogłębnie było opisane. Robię to jednak celowo, bo uzmysłowienie sobie tej podstawowej pozornej sprzeczności jest fundamentalną obserwacją, bez której nie sposób nic zrozumieć. Nie sposób też poczuć ducha i idei rządzących współczesną mechaniką statystyczną, w której kręgu ciągle się obracamy.

MODEL BERNOULLEGO–LAPLACE'A

Uproszczony model matematyczny stworzony przez Bernoullego i Laplace'a, który jest doskonałą ilustracją procesu mieszania się gazów, jest następujący. Wyobraźmy sobie, że mamy dwa pojemniki z kulami zielonymi i czerwonymi. Kul obydwu kolorów jest tyle samo. Powiedzmy, że 300. W chwili początkowej wszystkie zielone kule znajdują się w jednym pojemniku, a wszystkie czerwone w drugim. Odpowiada to oczywiście sytuacji początkowej prawdziwej sytuacji fizycznej, w której gazy są od siebie rozdzielone.

Teraz musimy opracować jakieś prawo dynamiki dla naszego modelu, które sprawi, że układ będzie ewoluował w czasie. Zastanówmy się zatem, jak można najprościej scharakteryzować ewolucję rzeczywistego układu dwóch mieszających się gazów. Jak wiemy, w rzeczywistym doświadczeniu wraz z upływem czasu prawdziwe cząsteczki gazów zaczynają się przemieszczać. Oczywiście część cząsteczek jednego gazu przeleci do drugiej części pojemnika, a część cząsteczek drugiego przeleci do pierwszej. W ten sposób właśnie będzie następowało mieszanie. Jednak warto zwrócić uwagę na fakt, że jeśli na początku liczby cząsteczek obydwu gazów były sobie równe, to średnio w każdej z części zbiornika sumaryczna liczba cząsteczek się nie zmieni. Oczywiście mogą się zdarzyć pewne fluktuacje, ale generalnie będzie tak, że obie części będą wypełnione tą samą liczbą cząsteczek. Jedyne, co się będzie zmieniało, to proporcje, w jakich będą one wypełniały obie części pojemnika.

Ze względu na powyższą obserwację tworzymy następujące, bardzo uproszczone, prawo ewolucji układu w modelu Bernoullego–Laplace'a. W każdej jednostce czasu losowo wybieramy dwie kule – po jednej z każdego pojemnika – i zamieniamy je miejscami. Tym sposobem zapewniamy, że w każdej chwili czasu w każdym z pojemników znajduje się tyle samo kul (zmienia się jedynie proporcja odpowiednich kolorów), a jednocześnie pozwalamy kulom przemieszczać się pomiędzy pojemnikami. Analogia z rzeczywistą sytuacją doświadczalną jest zatem bardzo bliska.

Zanim przejdziemy do analizowania dynamiki takiego uproszczonego modelu, warto zwrócić uwagę na fakt, że nasze prawo zupełnie nie wyróżnia żadnego koloru kul ani kierunku ich przenoszenia. Zawsze losowane są dwie kule z różnych zbiorników, a następnie są zamieniane miejscami. Nasze prawo spełnia zatem coś w rodzaju symetrii odwrócenia w czasie. Jeśli bowiem jakieś dwie kule zostaną wylosowane i zamienione miejscami, to w kolejnym kroku znów mogą być wylosowane i wrócić na swoje pierwotne miejsca. Przy tym prawdopodobieństwo ich wylosowania zarówno w pierwszym, jak i drugim kroku jest identyczne. Jest zatem pełna symetria!

SYMULACJA KOMPUTEROWA

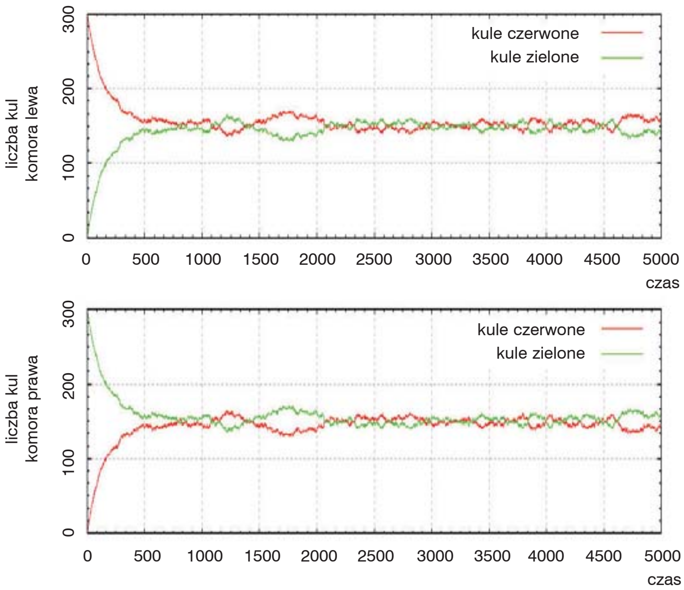
Nie pozostaje nam nic innego, jak przeprowadzić symulację. Oczywiście nie może się obejść bez odpowiednio przygotowanego programu. Każdy może sam przemyśleć, jak zaimplementować opisany powyżej algorytm. Można również skorzystać z mojej wersji programu, którą tak jak poprzednio załączam na końcu artykułu. Bardzo chciałbym Cię jednak, drogi Czytelniku, zachęcić do podjęcia próby samodzielnego napisania takiego programu. To naprawdę nie jest nic trudnego, a satysfakcja, że zrobiło się to samemu, jest gwarantowana. Zapewniam Cię!

No to co? Uruchamiam mój program. W odróżnieniu od tego napisanego w poprzednim miesiącu ten „wypluwa” (pozwoliłem sobie w tym miejscu użyć niezbyt ładnego słowa, powszechnie jednak używanego w żargonie informatyków) mi liczbę kul danego koloru w jednym i drugim pojemniku w zależności od czasu. Ustawiam po 300 kul każdego koloru i...

Efekt działania programu

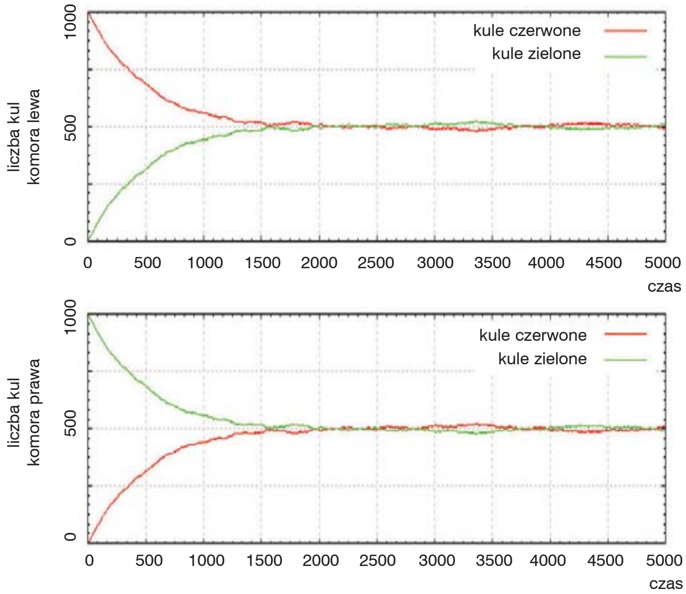
niestety pojawia się pierwszy problem. Zupełnie nie wiem, ile kroków czasowych wziąć pod uwagę. Próbuję sobie to jakoś poukładać w głowie i myślę, że dobrze będzie, jak każda z kul będzie miała przynajmniej z dziesięć prób na wylosowanie. To daje 3000 kroków. Dokładam jeszcze dwa tysiące dla pewności i ustawiam 5000. Zobaczymy...

Program ruszył. Wrzucam wygenerowane dane do programu rysującego wykresy i oto co otrzymuję:

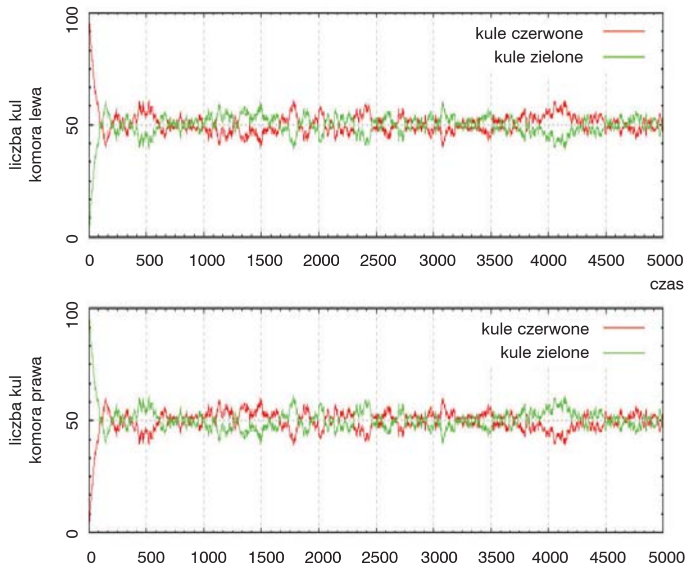


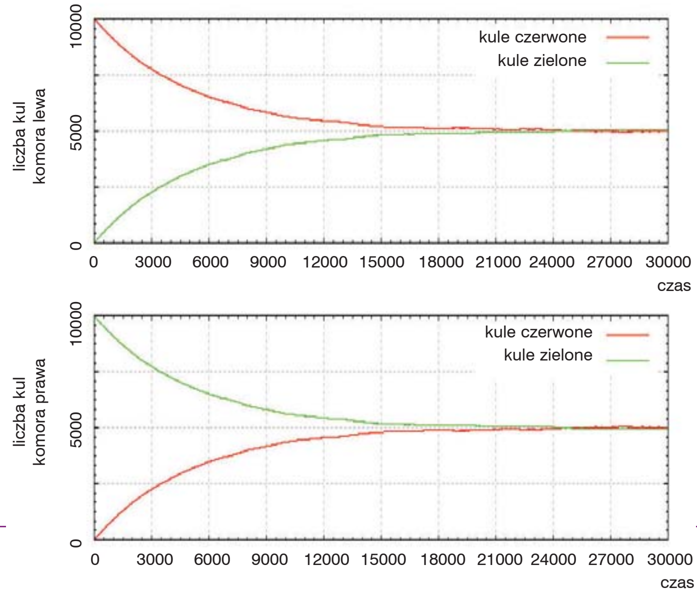
Z wykresu wynika jasno, że liczba kul czerwonych i zielonych wraz z upływem czasu wyrównuje się w każdym z pojemników. Dzieje się to oczywiście przy obecności pewnych fluktuacji, ale dążenie do wyrównania „stężenia" kul nie budzi chyba żadnych wątpliwości. Widać też ewidentnie, że moja próba odgadnięcia liczby kroków czasowych zupełnie nie była trafiona. Układ doszedł do równowagi już po ok. 500 krokach. Później są już tylko minimalne fluktuacje (czasami troszkę większe) wokół tego położenia.

No to super! Mój pseudogaz złożony z kul dąży do równomiernego rozłożenia kul poszczególnych kolorów w pojemnikach. Wydaje się zatem, że model rzeczywiście działa. Ale ciekawe jest, jak to wszystko zależy od liczby kul. Zapewne im więcej kul, tym układ potrzebuje więcej czasu, aby równowagę osiągnąć. Sprawdźmy! Ustawiam 1000 kul czerwonych oraz 1000 kul zielonych i uruchamiam program. W wyniku jego działania otrzymuję następujący wykres:



Rzeczywiście – równowaga jest teraz osiągana troszkę później. Dopiero po ok. 1500 krokach czasowych. Ale to, co przede wszystkim rzuca się w oczy, to poziom fluktuacji. Teraz są one dużo mniejsze. Otrzymane linie jakby bardziej gładkie. Tak! Im więcej kul, tym mniejsze względne fluktuacje. Zupełnie jak w przypadku skaczących pcheł. Ale sprawdźmy to jeszcze, aby upewnić się, czy rzeczywiście tak jest. Program uruchamiam dla 100 i 10 000 kul w każdym kolorze. Oto wynik tych symulacji:





pseudogaz

Całkowite potwierdzenie. Rzeczywiście w przypadku 100 kul fluktuacje są na tyle duże, że trudno mówić o równowadze. Jak widać, zdarza się dość często, że różnica pomiędzy liczbą kul czerwonych a zielonych w konkretnym pojemniku różni się o ok. 20, czyli sięga 20% wszystkich kul w pojemniku. W sytuacji, gdy kul jest 10 000, linie są niemal idealne. Żadnego chaotycznego zachowania.

ALE JAK TO WSZYSTKO ROZUMIEĆ?

No dobrze. Wiemy już, że sam fakt dążenia układów do stanu równowagi przy jednoczesnym istnieniu symetrii odwrócenia w czasie prawa zadającego dynamikę nie jest niczym szczególnym. Widzieliśmy to na przykładzie modelu Ehrenfesta skaczących pcheł oraz w przypadku modelu mieszania Bernoullego–Laplace'a. Ale wciąż jedno pytanie pozostaje bez odpowiedzi. Co jest podstawową przyczyną takiego stanu rzeczy? Co łączy te wszystkie układy fizyczne i uproszczone modele matematyczne, że mają taką własność?

MINI QUIZ MT
CZYTAM, WIĘC WIEM

Demon Laplace'a był pierwotnie nazwany

a) Integratorem
b) Innowiercą
c) Intelektem

Odpowiedź na tak postawione pytanie wcale nie jest prosta. Z jednej strony mamy prawdziwe układy fizyczne, w których znajdują się prawdziwe cząsteczki, a ich ruchem rządzą „prawdziwe" prawa przyrody, takie jak choćby prawa Newtona. Z drugiej mamy komputerowe programy modelujące abstrakcyjne układy matematyczne, korzystające z prymitywnych praw dynamiki, które w przyrodzie nie występują. A jednak jest jakiś wspólny mianownik, który sprawia, że dążenie do uzyskania równowagi jest silniejsze niż istnienie symetrii odwrócenia w czasie. Czy potrafimy uchwycić tę subtelną przyczynę? Odpowiedź brzmi: TAK. I o niej już następnym razem. Zapraszam!

Poniżej załączam kod źródłowy mojego programu, który pozwala symulować dynamikę modelu Bernoullego–Laplace'a. Program zapisuje do pliku kule.dat w pięciu kolumnach odpowiednio czas oraz liczbę kul czerwonych i zielonych w pojemniku lewym i prawym. Taki plik można później wczytać w dowolnym programie rysującym wykresy (np. darmowym GNU Plot lub MS Excel). Oczywiście zachęcam do samodzielnego eksperymentowania za pomocą komputera. Tak jak poprzednio darmowy kompilator DEV PASCAL można znaleźć na naszej płycie CD lub pobrać z Internetu pod adresem www.bloodshed.net

```
Uses crt,dos;

Var
  plik           : text;
  nazwa_pliku    : string;
  LRed, LGreen   : integer;
  RRed, RGreen   : integer;
  LosL,LosR      : real;
  T, i           : integer;


Begin
  nazwa_pliku:=`kule.dat`;
  Assign(plik,nazwa_pliku);
  Rewrite(plik);
  T:=5000;       { liczba krokow czasowych }
  LRed:=300;     { poczatkowa liczba kul
                 CZERWONYCH w komorze LEWEJ }
  RGreen:=300;    { poczatkowa liczba kul
                  ZIELONYCH w komorze LEWEJ }
  RRed:=0;        { poczatkowa liczba kul
                 CZERWONYCH w komorze PRAWEJ }
  LGreen:=0;      { poczatkowa liczba kul
                 ZIELONYCH w komorze PRAWEJ }
  Randomize;
  For i:=1 To T Do
  Begin
    Writeln(plik,i,` `,LRed,` `,LGreen,` `
                    ,RRed,` `,RGreen);
    LosR:=Random;
    LosL:=Random;
    If (LosR<=RRed/(RRed+RGreen))and(LosL>
             LRed/(LRed+LGreen)) Then
    { JESLI wylosowano z prawej czerwona
                  i z lewej zielona }
    Begin
      RRed:=RRed-1;
      RGreen:=RGreen+1;
      LRed:=LRed+1;
      LGreen:=LGreen-1;
    End;
    If (LosR>RRed/(RRed+RGreen))and(LosL<=
             LRed/(LRed+LGreen)) Then
    { JESLI wylosowano z prawej zielona
                 i z lewej czerwona }
    Begin
      RRed:=RRed+1;
      RGreen:=RGreen-1;
      LRed:=LRed-1;
      LGreen:=LGreen+1;
    End;
  End;
  Close(plik);
End.
```