

中華民國第四十六屆中小學科學展覽會
作品說明書

高中組 物理科

佳作

040103

由粒子系統微觀氣體動力論

學校名稱： 私立五育高級中學

作者： 高三 王念恩	指導老師： 葉宏毅
---------------	--------------

關 鍵 詞：粒子系統、氣體動力論、理想容器

【壹】摘要

本實驗利用粒子系統的特性，創造出氣體粒子，任由它們在規定的容器中永不止息的運動，再由粒子數 n 、粒子均方根速度 V_{rms} 、粒子半徑 r 、容器大小 R 等變數來微觀 Maxwell 的氣體動力論。研究結果如下：

一、在器壁完美無瑕能產生鏡面反射的理想容器中，粒子均勻分佈在容器內；在表面粗糙無法預測反彈角度的非理想容器中，粒子則集中在器壁附近。

二、粒子的平均速率可以下式表示：

$$\bar{v} = \left(\sqrt{\frac{8}{3\pi}} + \frac{1 - \sqrt{\frac{8}{3\pi}}}{n} \right) v_{rms} \quad (\text{理想容器與非理想容器相同})$$

三、無論是否為理想容器，無論粒子是否具有體積，粒子與器壁的碰撞頻率關係式都

可以表示成 $FQ_w \propto \frac{n\bar{v}}{R-r}$ ，並預測當 $n \rightarrow \infty$ 時，理想容器之 $FQ_w = \frac{3n\bar{v}}{4(R-r)}$ ；而

非理想容器之 $FQ_w = 0.98 \frac{n\bar{v}}{R-r}$ 。

四、無論是否為理想容器，可導出粒子間碰撞頻率 $FQ_p \propto \frac{nr^2 v_{rms}}{R^3}$ ，並預測在 $n \rightarrow \infty$

時，理想容器與非理想容器中 $FQ_p = 3\sqrt{2} \frac{nr\bar{v}}{R^3}$ 。

【貳】研究的動機與目的

摸得著、聞得到、卻怎麼也看不見的氣體分子，著實的圍繞在我們身邊，就當一陣徐徐的風吹來時，可理解有無數的氣體分子正撞擊著我們的身體，滑過了皮膚，只留下感覺，卻怎麼也難以想像它們那微小地只有百來奈米不到的微小世界。風來時穿過指尖的，是不是就如同閃過指縫的溪流；被關在輪胎裡的氣體分子，就這麼跟著輪子轉個不停嗎？那被關在籃球中的氣體呢？顯然的，地球這世界少不了它們，然而，我們有能力精確的描述他們的行為嗎？

高中二年級物質科學物理篇下冊中提到了麥克斯威爾 (James Clerk Maxwell, 1831-1879) 這位英國的數學奇才，他利用了敘述統計與平均自由徑的機率解法，計算出容器中氣體分子的速率分佈；無獨有偶的，遠在澳洲的波茲曼 (Ludwig Boltzmann, 1844-1906) 在假設能量均分的狀況下，推導出了與 Maxwell 相同的氣體動力學說。雖然因他們的推導所繪製出來的氣體分子速率分佈圖對高中生而言頗能理解，但之於上述看似簡單的原理敘述，也僅只於可以唸出中文文字的了解程度，接下來一大堆不知名的符號組合出的公式只更加深了我對這位數學家的敬畏。氣體動力論就這麼畫下帶著驚歎號的句點。

「不能再簡單一點嗎？大到宇宙無垠浩瀚的星際，小到氣體分子等球狀物體，多多少少都要聽從牛頓 (Isaac Newton, 1643-1727) 的話，乖乖的運動，不是嗎？」

我們希望，棄守對我們高中生而言艱難的統計力學，走另條小路，由電腦模擬的粒子系統中，一顆顆氣體分子行逕累積所成就的整體行為表現，能以最簡單的「彈性碰撞」力學來重新看待氣體的運動模式。

【參】實驗設備與器材

一、實驗器材

(一) 硬體部分

1. Apple iMac G5 一台。
2. Intel PC 50 台。

(二) 軟體部分

1. Apple Mac OS X 10.4.6 Tiger + XCode 2.3。
2. Microsoft Windows XP + Microsoft Visual C++ Free Compiler。

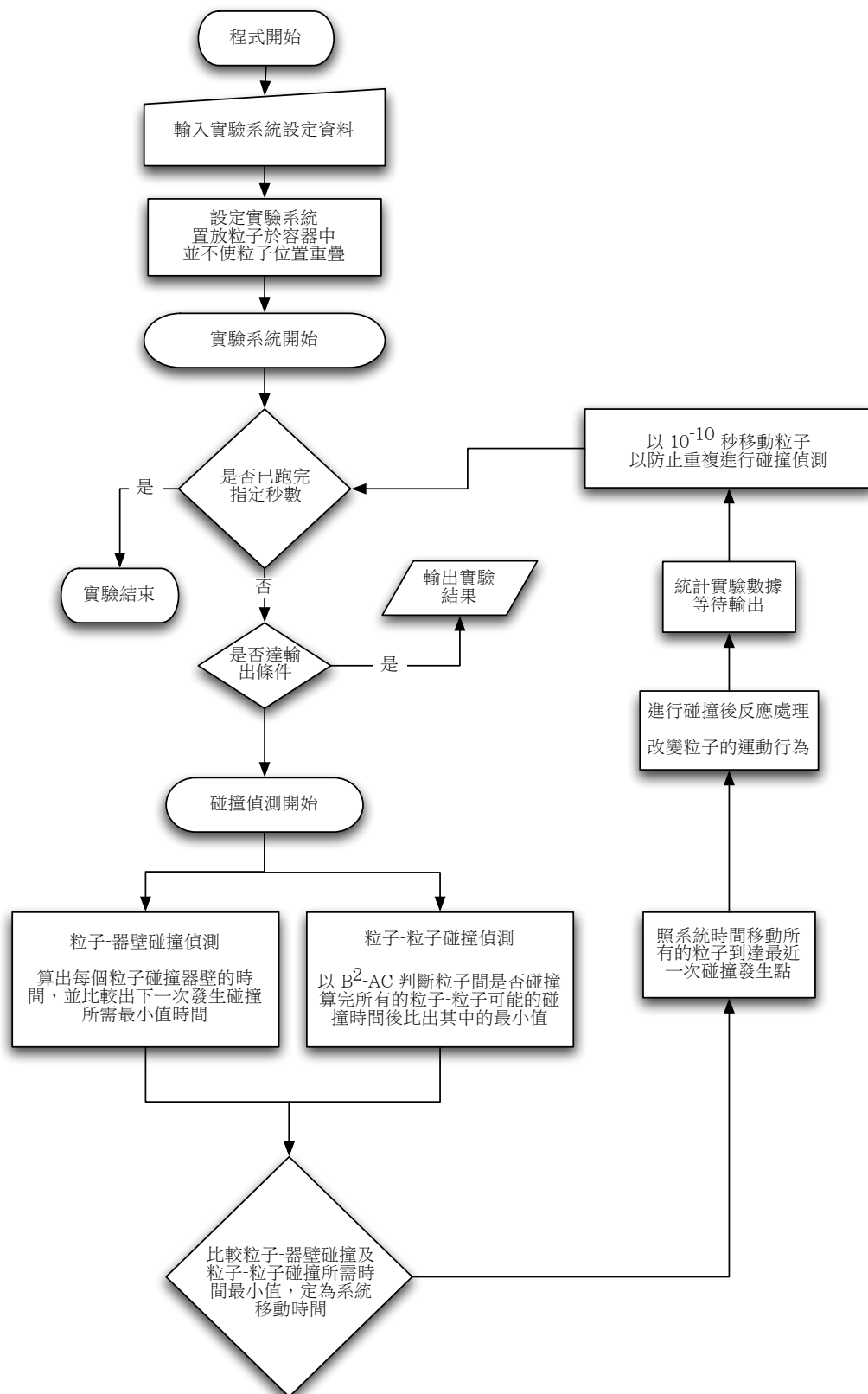
二、程式原始碼的撰寫

基於競賽保密的原則，暫無法由網路上下載程式供他人研究使用。

原始程式碼及可執行的程式將於科展競賽完畢後再行釋出。

程式碼原在老師的蘋果電腦上開發，後交由學生進行修改部份源碼後移植到 Windows XP 系統上編譯執行，以利用學校內多台 Intel PC 來執行運算。

三、程式流程圖



【肆】研究的思維與方法

在 S.T.P 下，一莫耳的氣體分子就有 6.0221415×10^{23} 個分子，佔有 $2.24 \times 10^{-2} \text{ m}^3$ 的體積，那是多麼大的天文數字呀，高中的物理課本左翻右找，也找不到一次超過四個物體正同時運動的計算例題，拜現今電腦科技的進步，我們把這個難題交給了電腦程式，利用它執行迴圈式重複性計算的能力，請它幫我們進行「看不見」的實驗。

一、選擇粒子系統 (Particle System)

粒子系統是為了完成「星際大戰」(Star Wars) 這部電影的數位特效時被開發出來的概念 (Reeves, 1983)，這系統專門是為了解決龐大而離散的粒子行為所研發出的一類電腦程式的撰寫方式，其具有的特性如下：

- (一) 每一個粒子都具有『個性』，如受力的大小、運動的方式、質量的變化、大小形狀、速率的變化、溫度的變化、顏色的變化。
- (二) 每一個粒子的行為因時間軸的延展而產生變化，所有的粒子遵守統一的系統運作時間行使自己的行為。
- (三) 粒子的運動是盲目的，必須由系統統一規定各粒子之間的交互關係，以達成整個系統的總體行為。

利用 C++ 語言的結構性資料，我們很輕易可以設定粒子系統中每一個粒子具有自己的質量、半徑大小、所在的空間向量值及速度的向量值。

二、氣體分子模型的選擇

為了簡化計算上的困難度，我們選擇模擬氦氣原子的運動行逕，我們將單原子的 He 當作我們模擬的對象，其原子半徑約為 31 pm，原子量為 4。

三、系統的先決假設

所有的碰撞，我們都視為沒有能量耗損的完全彈性碰撞。粒子間沒有位能的差別，也沒有作用力。

四、裝氣體分子的容器設計

為了加快電腦的執行能力，我們無法將一莫耳的氣體分子全數放進我們的程式中，我們假設了一個裝氣體分子的球形中空容器，半徑是 $9.6 \times 10^{-9} \text{ m}$ (為 He 半徑的 300 倍，He 原子的半徑值指定為 1)，這樣的體積大約可容納 S.T.P 下 100 顆氣體分子。

五、理想容器與真實容器、粒子與器壁之間的碰撞

我們想像了兩種容器壁的表面狀況：

如果氣體分子所撞擊的器壁是完美無瑕的表面，氣體分子必然可以按照完美的鏡面反射反彈回來，入射角等於出射角，速度的變化可寫成：

$$\vec{v}' = \vec{v} - 2 \frac{\vec{n} \cdot \vec{v}}{|\vec{n}|^2} \vec{n}$$

但，當以氣體分子如此微小的世界去觀察所有物體的表面時，絕不可能找到一個「平整無瑕」的表面，反倒是分子排列得亂七八糟，對氣體分子來說是個坑坑洞洞的表面，因此氣體分子在與容器壁發生碰撞時，反彈的方式絕不可能如同「鏡面反射」一般。如圖 1 所示，既然反彈的方向完全沒有辦法預測，我們便規定粒子在與器壁發生碰撞之後，其速度的純量值不變，但方向向量以亂數取得，其取得的關係式為：

$$\frac{|\vec{n} \cdot \vec{v}'|}{|\vec{n}| |\vec{v}'|} = \cos \theta < -1.15 \frac{r}{R}$$

(r：粒子半徑，R：容器半徑)

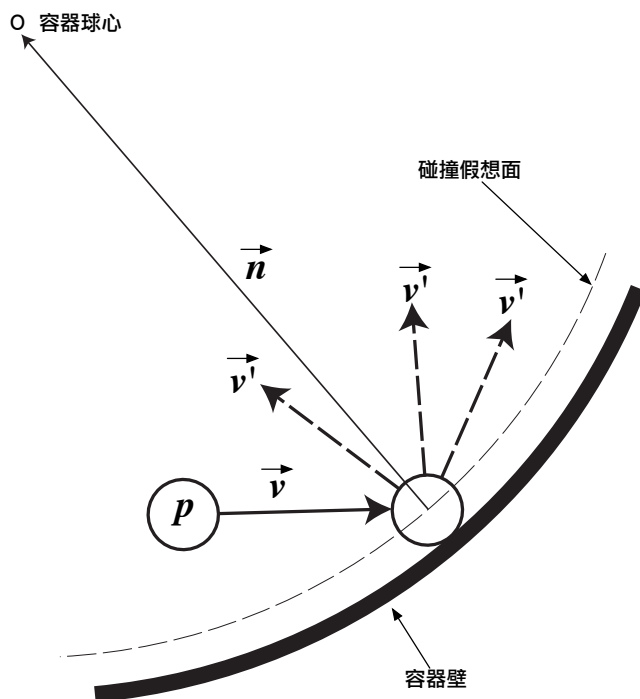


圖 1

六、粒子與粒子之間的碰撞

如圖 2 所示，我們讓粒子與粒子的碰撞完全遵照以下公式計算：

假設 P1 質量為 m_1 ，P2 為

m_2 ， $\vec{v}_1$ 在 $\vec{n}$ 上的投影為 $\vec{n}_1 = \frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{n}}{|\vec{n}|^2} \vec{n}$ ，

$\vec{v}_2$ 在 $\vec{n}$ 上的投影向量為 $\vec{n}_2 = \frac{\vec{v}_2 \cdot \vec{n}}{|\vec{n}|^2} \vec{n}$

$$\vec{U}_{1x} = \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \vec{n}_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \vec{n}_2$$

$$\vec{U}_{2x} = \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \vec{n}_1 - \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \vec{n}_2$$

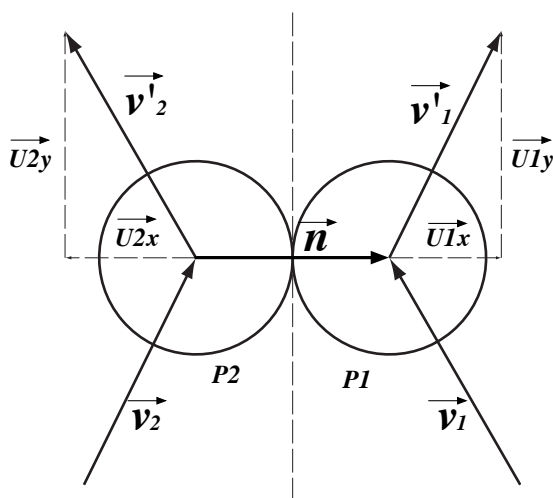


圖 2

$$\vec{U}_{1y} = \vec{v}_1 - \vec{n}_1$$

$$\vec{U}_{2y} = \vec{v}_2 - \vec{n}_2$$

最後得到

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2}(\vec{n}_2 - \vec{n}_1)$$

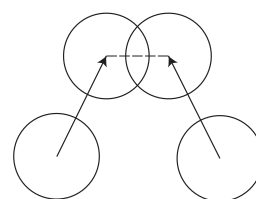
$$\vec{v}'_2 = \vec{v}_2 + \frac{2m_1}{m_1 + m_2}(\vec{n}_1 - \vec{n}_2)$$

七、系統總體運作時間 Δt 的決定

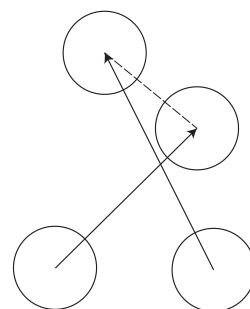
系統總體運作時間的決定與碰撞事件的偵測有相當大的關聯，這是我們最頭痛的部分。

(一) 放棄以往的碰撞偵測

在以往的碰撞偵測中，如圖 3 所示，多數是將粒子以一固定長度的系統運作時間 Δt 移動到新的位置之後，再偵測每一個粒子與粒子之間有沒有體積重疊的現象(球心距離小於兩個粒子的半徑和)，或是球心位置是否大於容器半徑與粒子半徑的差值，如圖三 A。這有相當程度會估算錯誤的危險，如果 Δt 如果太長，或是粒子的速度量值過大時，如圖 3 B，若兩粒子發生碰撞於 Δt 時間的內旅程中，將因為在新的位置上的未計算到粒子與粒子的重疊現象而忽略了實際的碰撞事件，使得計算後的結果相當不可靠。許多電玩遊戲以固定 Δt 時間的方式設計是為了這畫面能運作流暢，但在本實驗中並不適用。



A. 碰撞被偵測



B. 碰撞被忽略

圖 3

(二) 萬無一失的碰撞偵測思維

我們想了很多的方法試圖解決碰撞次數被低估的可能性，最後我們拿許多球賽慣用的犯規處理規則進行來譬喻整個系統的運作：我們將碰撞事件視同為「犯規」，我們好似場上的裁判一般，觀察著每一個粒子在未來的時間裡犯規的可能性，我們不斷的來回搜尋最可能在觀察當下的未來裡在最短的時間內會犯規的粒子，把這最短的時間 Δt 算出來變成系統運作時間軸的延展值，全部的粒子以這個時間移動到自己的新位置，而剛剛被發現會犯規的粒子也剛剛好移動到犯規的現場上，當裁判的我們則給與這一個粒子(與器壁碰撞)或這一對粒子(粒子與粒子碰撞)新的行進速度與方向。每一段不固定長度的 Δt 時間切片中，只會發生一次碰

撞事件，在這樣的「犯規」系統裡，再也沒有任何一個碰撞事件會被忽略，增加了程式的可靠性。

目前我們還沒有找到與我們類似的碰撞偵測法，很慶幸的，這「犯規」碰撞偵測策略幫我們掃除了氣體運動模型在精準度上的疑慮。

在數學的解決上，方法如下：

(一) 粒子與器壁發生碰撞所需的最短時間計算法

圖 4 中，粒子半徑為 r ，容器半徑為 R

$$\vec{P}_f = \vec{P}_i + \vec{v}\Delta t$$

$$|\vec{P}_f| = R - r$$

$$|\vec{P}_i + \vec{v}\Delta t| = R - r$$

$$|\vec{P}_i|^2 + 2\vec{P}_i\vec{v}\Delta t + |\vec{v}|^2 \Delta t^2 - (R - r)^2 = 0$$

$$\Delta t = \frac{-2\vec{P}_i\vec{v} \pm \sqrt{4(\vec{P}_i\vec{v})^2 - 4|\vec{v}|^2 [|\vec{P}_i|^2 - (R - r)^2]}}{2|\vec{v}|^2}$$

$$\Delta t_c = \frac{-\vec{P}_i\vec{v} \pm \sqrt{(\vec{P}_i\vec{v})^2 - |\vec{v}|^2 [|\vec{P}_i|^2 - (R - r)^2]}}{|\vec{v}|^2} \quad (\text{其中 } \Delta t_c \geq 0)$$

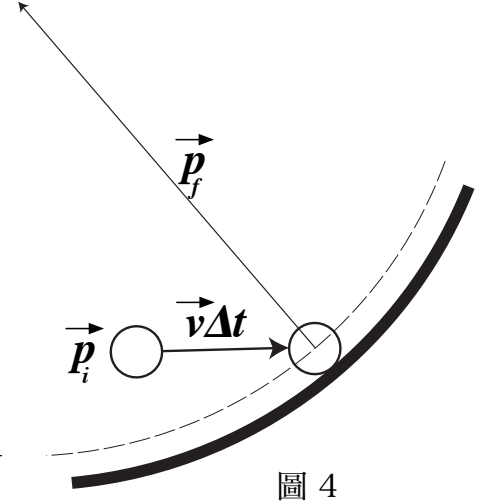


圖 4

Δt_c 必有兩解，且一正一負，取其正值為粒子將碰撞器壁所需的旅行時間。

(二) 粒子與粒子發生碰撞所需的最短時間計算法

圖 5 中，兩粒子半徑各為 r_1, r_2

$$\vec{P}_{1f} = \vec{P}_{1i} + \vec{v}_1\Delta t$$

$$\vec{P}_{2f} = \vec{P}_{2i} + \vec{v}_2\Delta t$$

$$|\vec{P}_{2f} - \vec{P}_{1f}| = r_1 + r_2$$

$$|\vec{P}_{2f} - \vec{P}_{1f}|^2 = (r_1 + r_2)^2$$

$$|\Delta\vec{P} + \Delta\vec{v}\Delta t|^2 = (r_1 + r_2)^2$$

$$|\Delta\vec{v}|^2 \Delta t^2 + 2\Delta\vec{P}\Delta\vec{v}\Delta t + |\Delta\vec{P}|^2 - (r_1 + r_2)^2 = 0$$

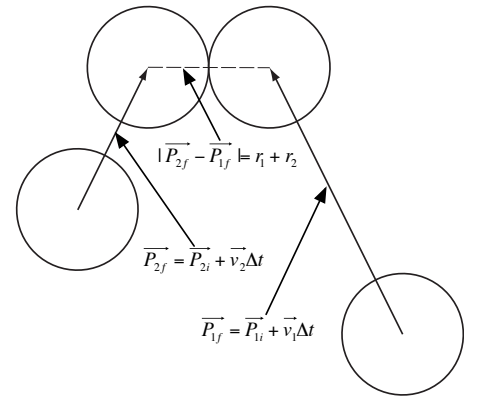


圖 5

$$\Delta t_p = \frac{-\overrightarrow{\Delta P} \cdot \overrightarrow{\Delta v} \pm \sqrt{(\overrightarrow{\Delta P} \cdot \overrightarrow{\Delta v})^2 - |\overrightarrow{\Delta v}|^2 [|\overrightarrow{\Delta P}|^2 - (r_1 + r_2)^2]}}{|\overrightarrow{\Delta v}|^2} \quad (\text{其中 } \Delta t_p \geq 0, \text{ 且為最小值})$$

若有解的狀況下 (即兩球會發生碰撞), Δt_p 的兩解會同時為正值或同為負值, 取最小的正值為兩粒子旅行到即將發生碰撞事件的位置所需的時間。

(三) 粒子與粒子是否可能發生碰撞的判別式

$$A = |\overrightarrow{\Delta v}|^2$$

$$B = \overrightarrow{\Delta P} \cdot \overrightarrow{\Delta v}, \text{ 要發生在「未來」的碰撞則 } B \leq 0.$$

$$C = [|\overrightarrow{\Delta P}|^2 - (r_1 + r_2)^2]$$

$$B^2 - AC > 0, \text{ 粒子與粒子發生正撞到斜撞不等。}$$

$$B^2 - AC = 0, \text{ 粒子與粒子發生單點切撞。}$$

$$B^2 - AC < 0, \text{ 粒子與粒子不會發生碰撞。}$$

八、逆向操作

Boltzmann 說能量均分, 氣體分子的速度以鐘形曲線的速度分佈。而我們逆向先假設每一個粒子的初始速度都一樣, 也就是說, 一開始在系統中只有一種速度的粒子。

九、平衡時間的決定

由於本實驗是以逆向操作的方向進行, 分子若不發生碰撞則能量不會交換, 若發生碰撞, 分子的速度開始改變, 由本實驗對分子速率區間的統計繪圖後, 可得到類似 Maxwell-Boltzmann 分子速率分佈圖一般的圖形, 如圖 6 所示。

在不發生粒子碰撞的實驗中, 我們以粒子在容器中的分佈狀況為實驗是否達到平衡可停止收集資料, 容器被分成 173 分的殼層, 我們觀察在某時間中殼層內的粒子密度, 與整體密度比較, 若比值接近一定值時視為達到平衡。如圖 7 所示。

在粒子發生碰撞的實驗中, 我們不斷取得粒子個別的自由徑, 與整個系統的平均自由徑做標準差的計算, 若標準差百分比在規定的數值內 (通常定為 0.1% ~ 5%, 計算方式容後介紹), 我們認定為是平衡狀態, 停止實驗並取得數據。如圖 8 所示。

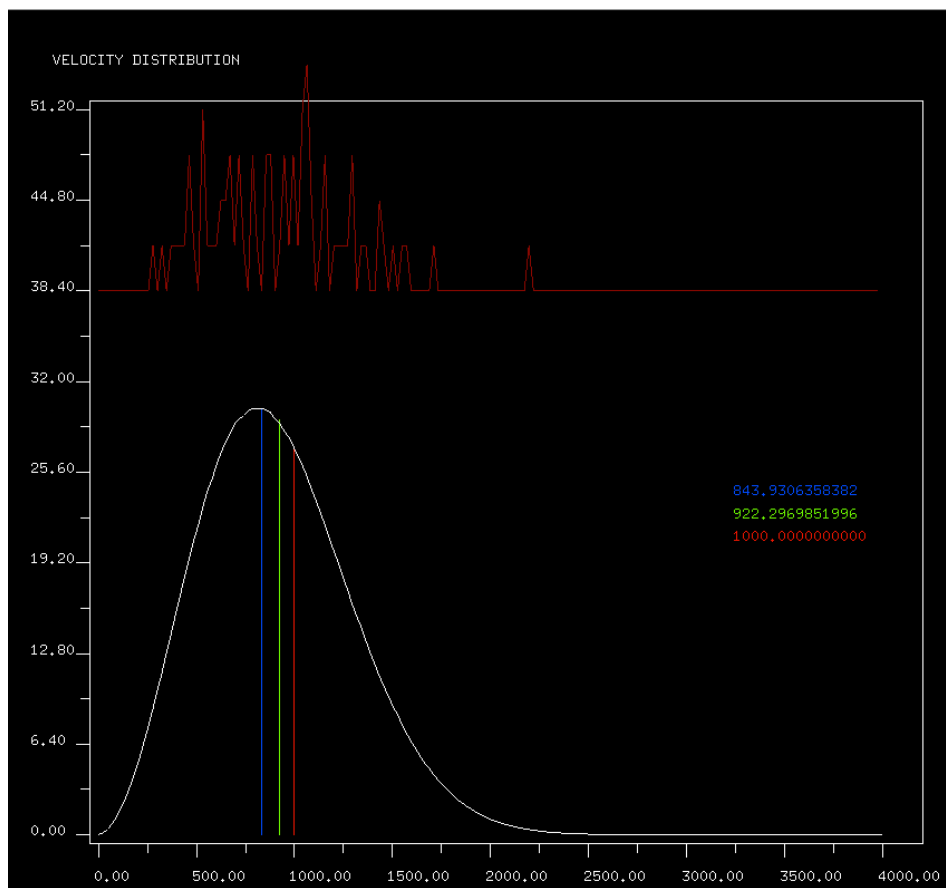


圖 6 粒子速度分佈類似 Maxwell-Boltzmann 的理論

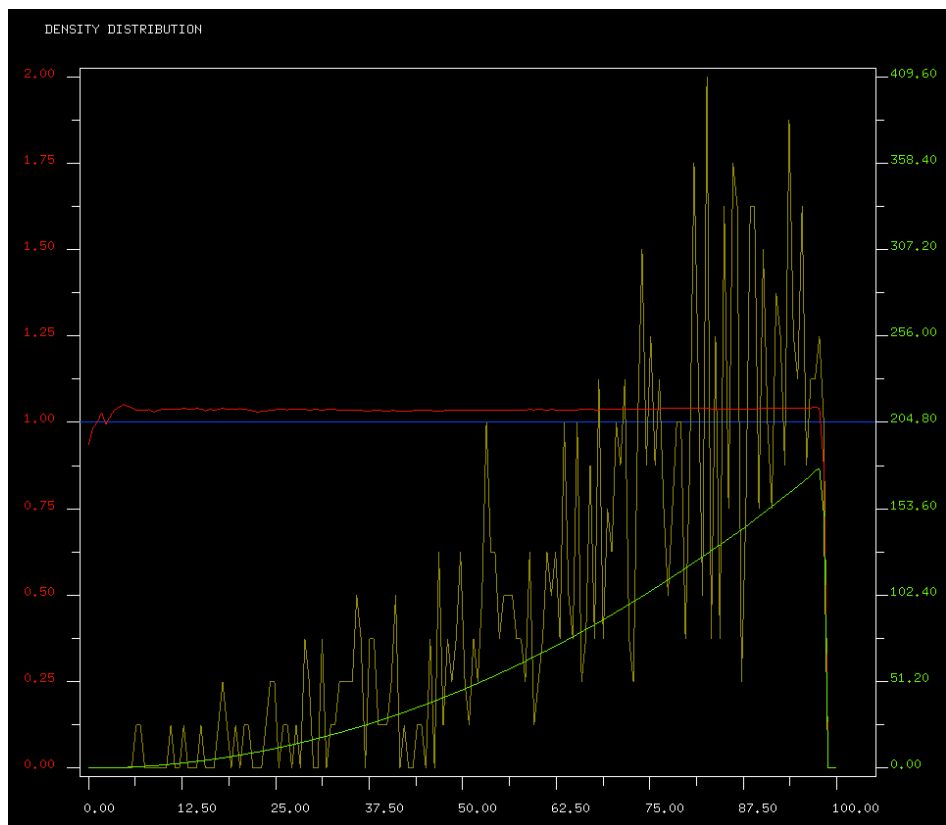


圖 7 殼層粒子密度 / 總體密度比值圖

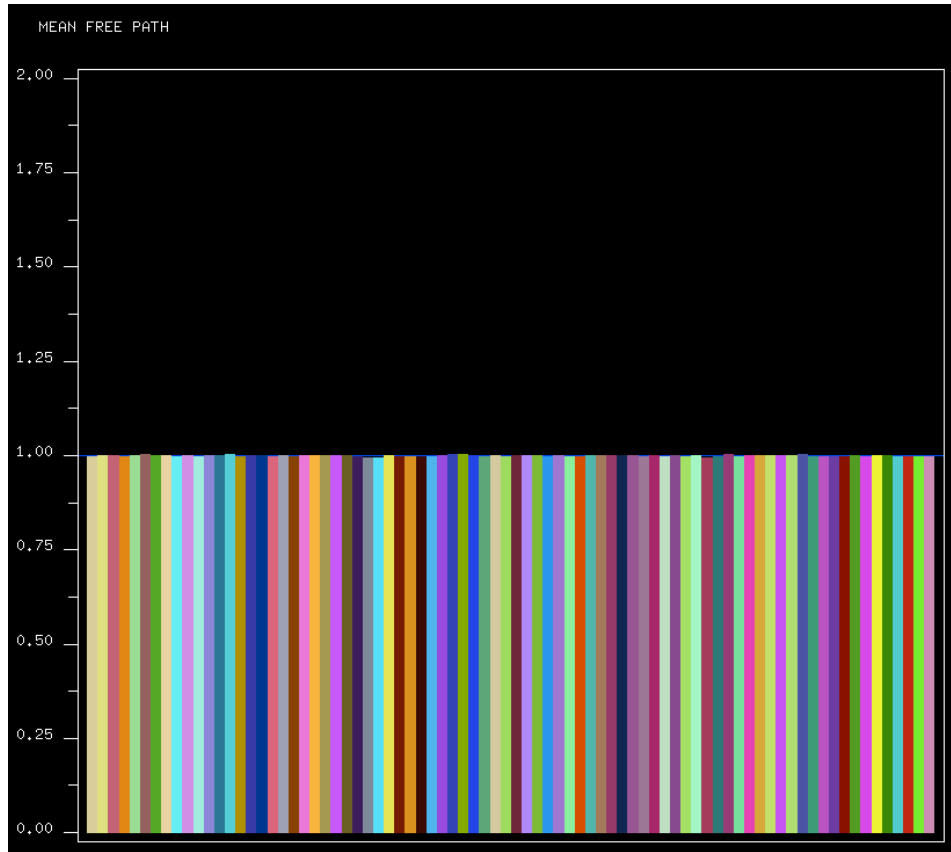


圖 8 粒子個別自由徑與系統平均自由徑比值圖

十、數值方法

(一) 均方根速率的取得

$$V_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n v_i^2}{n}}, \text{ 於每次碰撞事件發生時就計算一次。}$$

(二) 粒子平均速率

我們將每個粒子所旅行的總路徑長記錄在每個粒子的資料中，以所有 n 個粒子所行走的路徑總和為 D ，總共耗時為 T 時間：

$$V_a = \frac{D}{nT}$$

(三) 速率分佈

設定速率區間大小 $\Delta v_i = \frac{4v_{rms}}{173}$ (將四倍均方根速率 V_{rms} 分成 173 分)，在每次碰撞事件發生時便計算出每個粒子所屬的速率區間之出現頻率 FQv ，而各速率區間全時的分佈頻率則以下列方式計算 (加權法)：

$$FQv_f = \frac{FQv_i \times totalSpan + FQv \times \Delta t}{totalSpan + \Delta t}$$

其中 totalSpan 為總旅行時間， Δt 為未來一次碰撞所需時間， FQv_i 為上次計算出的全時分佈頻率， FQv_f 為新計算出的全時分佈頻率。

(四) 粒子在距離容器中心的出現頻率

同 (三) 中的計算，將容器半徑分成 173 等分，每次碰撞發生便計算出粒子球心所在的距離區間，統計後區間中粒子出現頻率為 FQd ，全時區間粒子出現頻率 FQd_f 的計算為：

$$FQd_f = \frac{FQd_i \times totalSpan + FQd \times \Delta t}{totalSpan + \Delta t}$$

(五) 殼層內出現粒子數 / 總體密度

將容器半徑劃分成 173 等分，每一分為 ΔR ，殼層內出現的粒子數 N ，殼層

內粒子密度可表示為： $\frac{N}{\frac{4}{3}\pi[(R_i + \Delta R)^3 - R_i^3]}$ ，而總體密度為： $\frac{n}{\frac{4}{3}\pi R^3}$ ，比值

為： $\frac{NR^3}{n[(R_i + \Delta R)^3 - R_i^3]}$ 。

若比值等於 1 時，表示該殼層中的密度等於總體密度。

(六) 個別自由徑與平均自由徑

1. 個別自由徑：粒子系統中每個粒子資料中包含了所運行的總路徑長 (travelLength) 及與粒子間發生碰撞的次數 (particleCollision)，個別自由徑為

$$\lambda_i = \frac{travelLength_i}{particleCollision_i}$$

2. 平均自由徑：將所有粒子的運行路徑加總 (totalTravelLength) 除以系統中發生所有的粒子間碰撞事件數 (totalParticleCollision)，平均自由徑為：

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^n travelLength_i}{\sum_{i=1}^n particleCollision_i}$$

3. 平衡的取得由 $stdev_p = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\lambda_i - \lambda)^2}{n}} \times 100\%$ 式中得的標準差百分比，若小於初設的暫止設定值則實驗暫停，方便紀錄 (0.05%~1.0%)。

十一、程式正確性驗證

我們先以理想及非理想容器兩容器為模擬對象，跑了一系列三組條件設定，後將粒子速率分佈圖套疊，觀察程式的正確性。如圖 9 與 10 所示 (為非理想容器)。

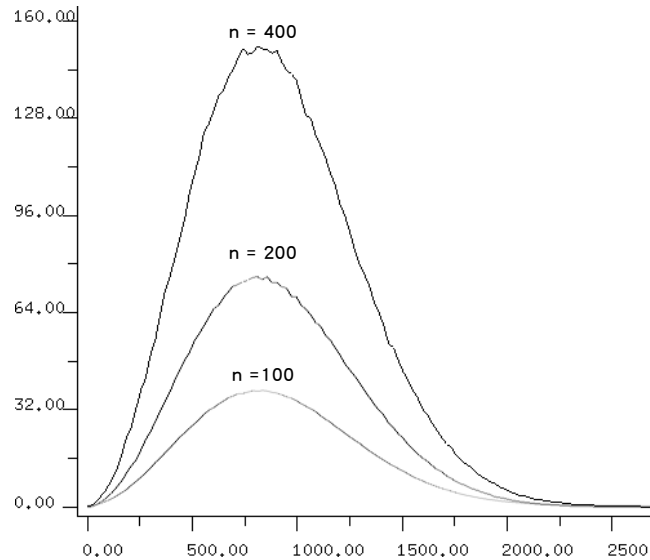


圖 9 套疊粒子數 n 變項之粒子速率分佈圖

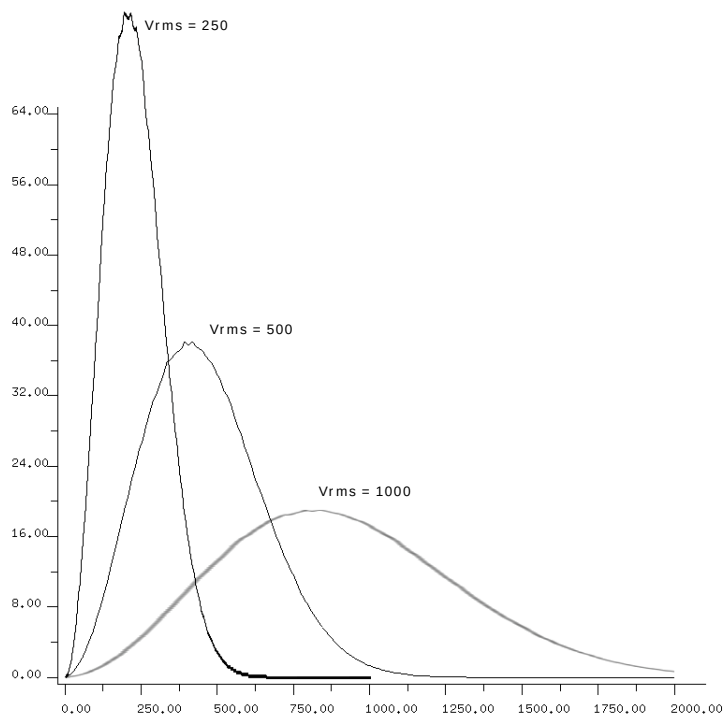
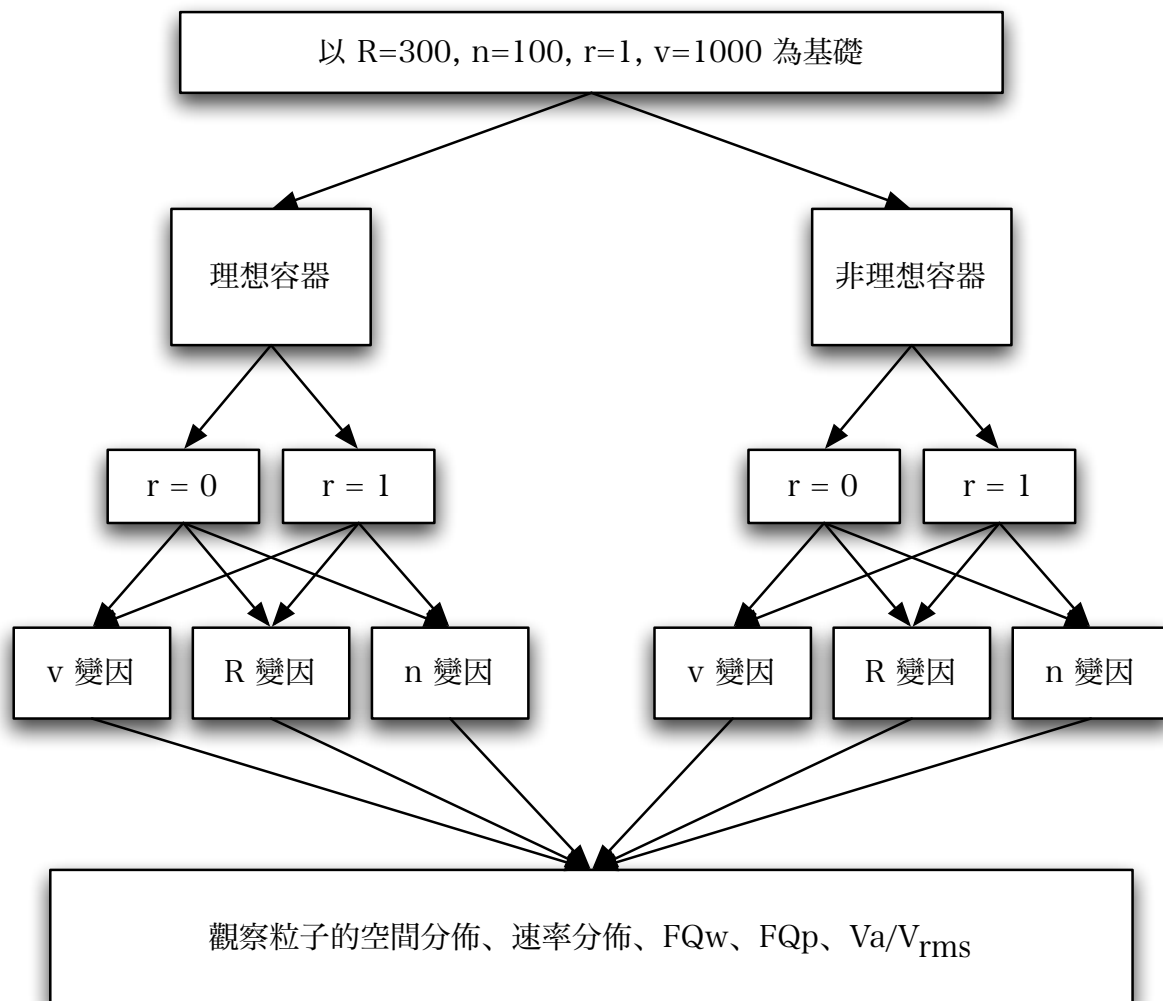


圖 10 套疊粒子速率 Vrms 變項之粒子速率分佈圖

若將圖 9 與 10 各曲線的 y 軸數值加總後其值等於粒子數 n ，且在圖 9 中三曲線與 $y = 0$ 夾出的面積比為粒子數的比值，而圖 10 中三曲線與 $y = 0$ 夾出的面積相同。

十二、欲探討的面向與實驗設計

藉由改變系統中粒子的速度、粒子的半徑大小及粒子數量 (操作變因) 來觀察粒子與器壁碰撞的頻率、粒子與粒子間碰撞的頻率、總體平均速度的變化、方均根速率的變化、及分子速率分佈曲線的趨勢 (應變變因)。



【伍】研究結果

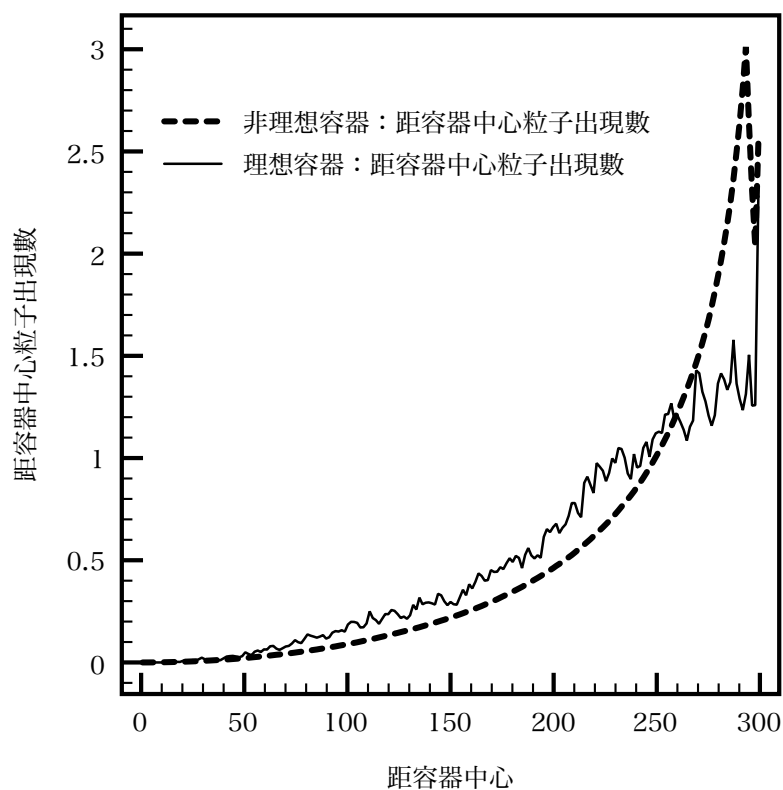
以下 R 代表容器半徑， n 代表粒子數， r 代表粒子半徑， v 代表粒子速度， FQw 代表粒子與器壁碰撞頻率， FQp 代表粒子與粒子間的碰撞頻率， V_a 為平均速率， V_{rms} 為均方根速率， V_p 為最大可能速率。

所有實驗數據以 $R = 300$ ， $n = 100$ ， $r = 0$ 或 $r = 1$ ， $v = 1000$ 為基礎開始，再以 R 、 n 、 r 、 v 為操作變數進行研究。

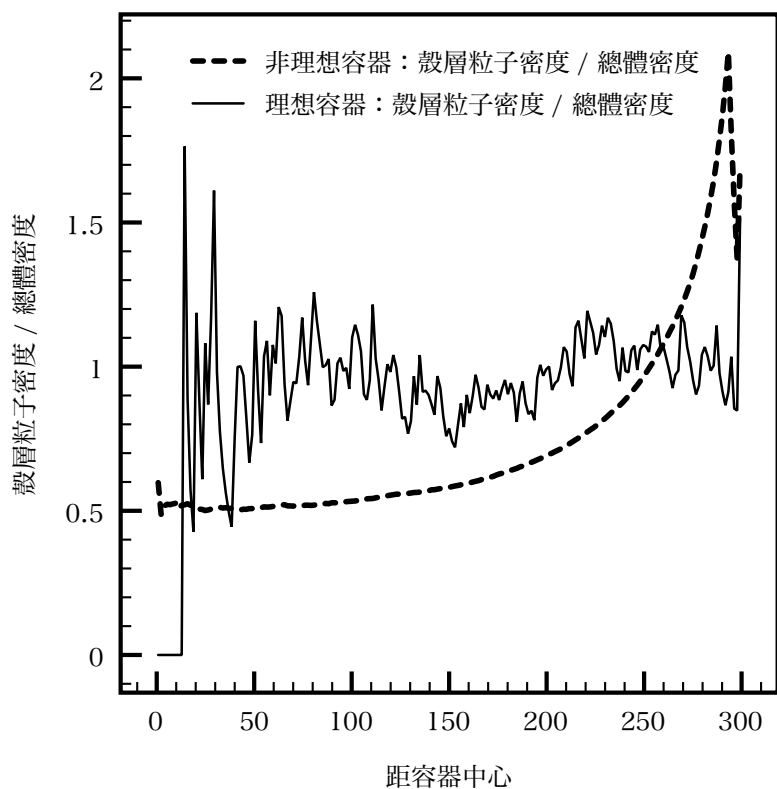
一、理想容器與非理想容器的差別

(一) 粒子半徑 $r = 0$ 時

1. 距離容器中心粒子出現分佈圖 (圖 11)

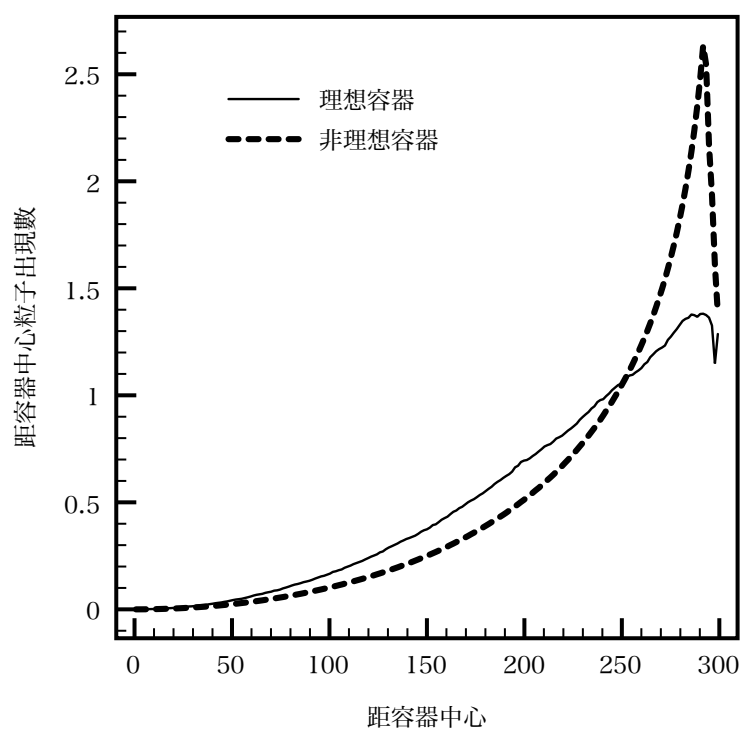


2. 殼層粒子密度 / 總體密度比值圖 (圖 12)



(二) 當粒子具有體積時 ($r = 1$)

1. 距離容器中心粒子出現分佈圖 (圖 13)



2. 殼層粒子密度 / 總體密度比值圖 (圖 14)

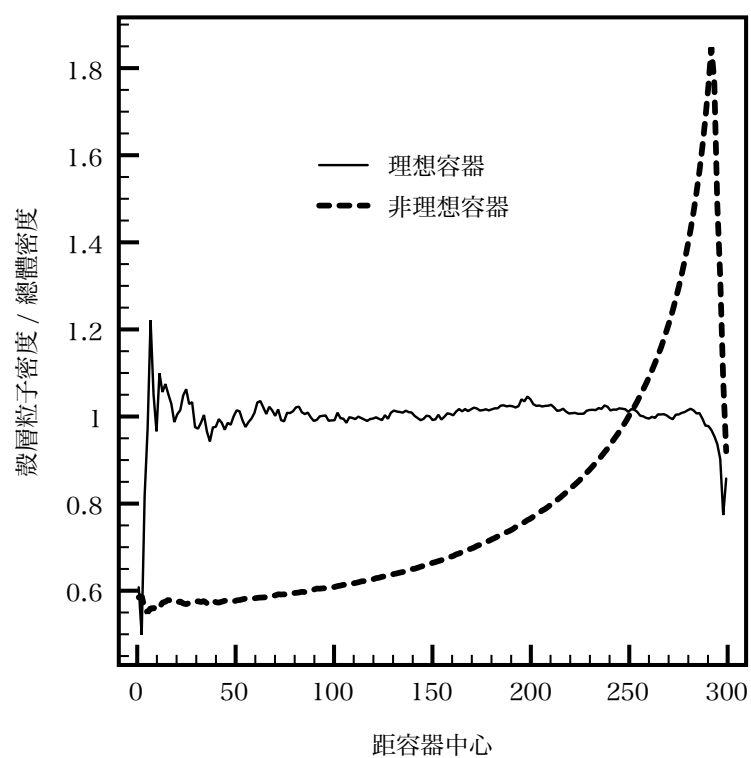


圖 11 到 14 表示 100 顆粒子在容器中的分佈狀況，其等分為 173 分後所計算出的出現數總和為 $n = 100$ 。

殼層粒子密度 / 總體密度 的比值接近 1 時表示粒子在容器中分均分佈。

二、以理想容器為實驗器材

(一) 粒子不具體積 ($r = 0$)

1. 粒子速度 v 為操作變因 ($V_{rms} = 100, 500, 1000, 5000, 10000, 20000$)

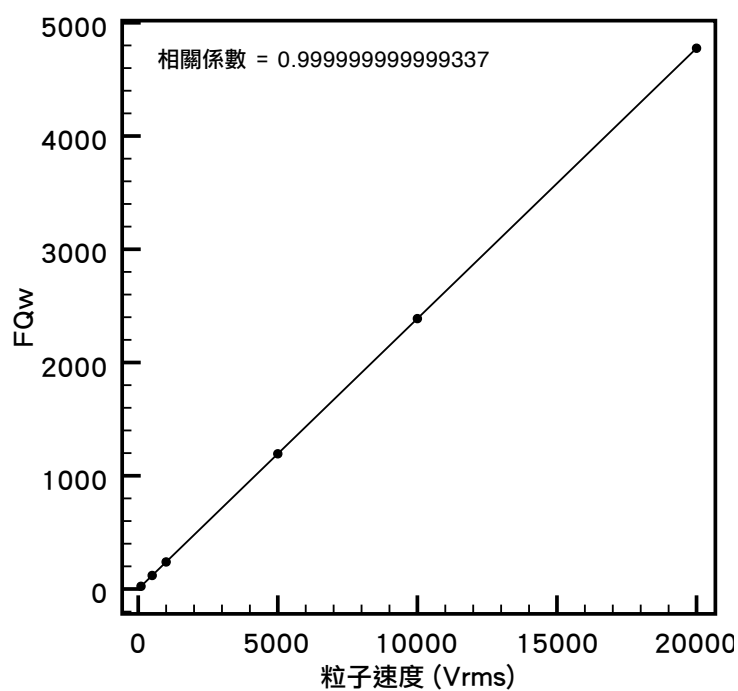


圖 15 V_{rms} vs. FQw

2. 容器半徑 R 為操作變因 ($R = 100, 300, 600, 800, 1200, 2400$)

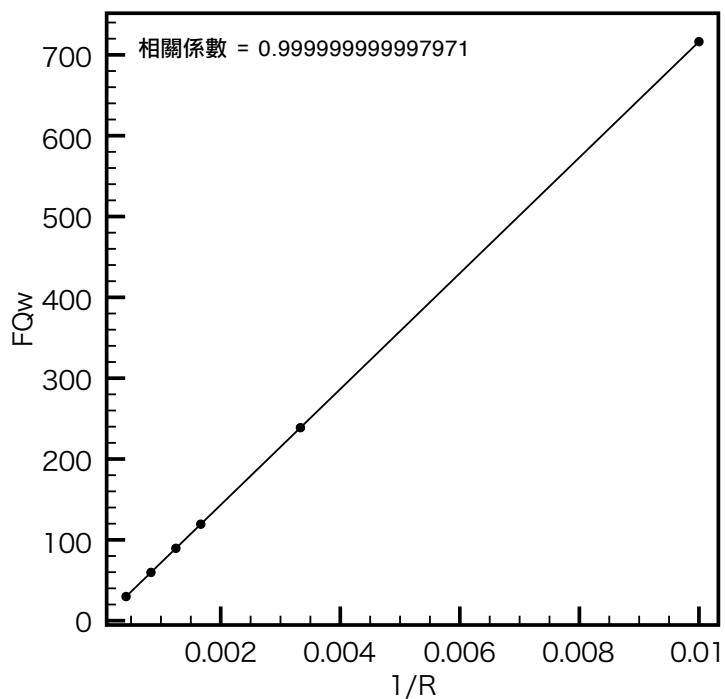


圖 16 $1/R$ vs. FQw

3. 粒子數 n 為操作變因 ($n = 50, 100, 200, 400, 600, 800$)

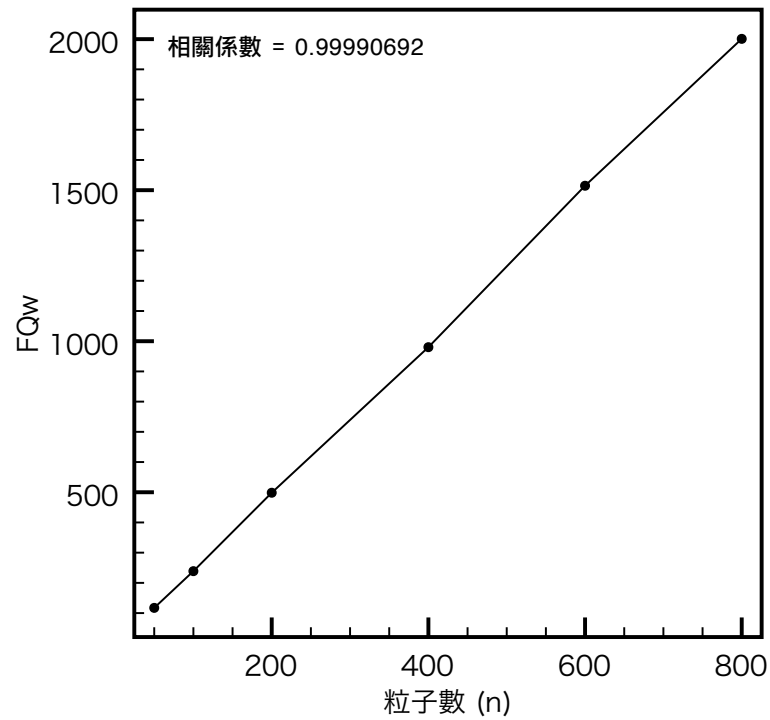
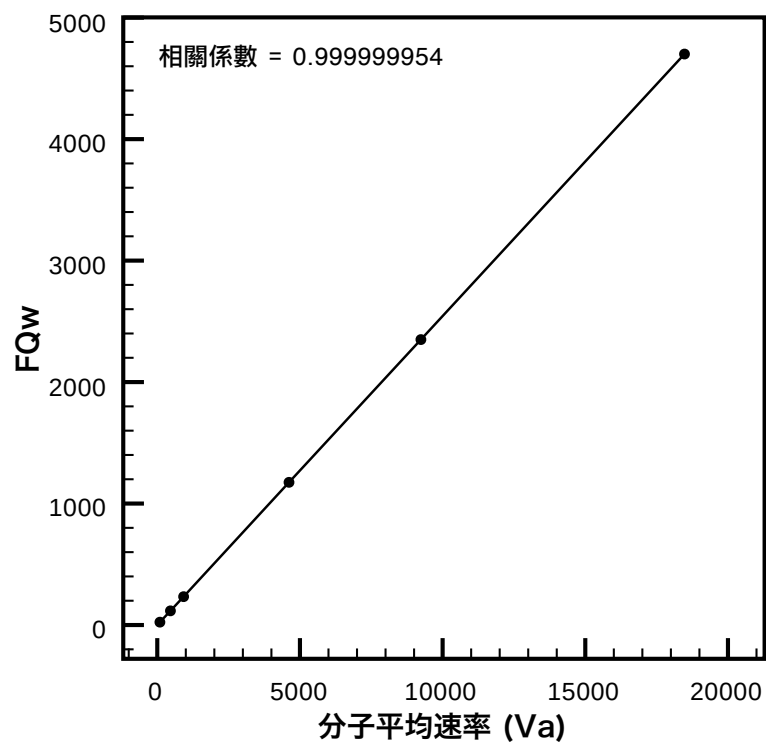


圖 17 n vs. FQw

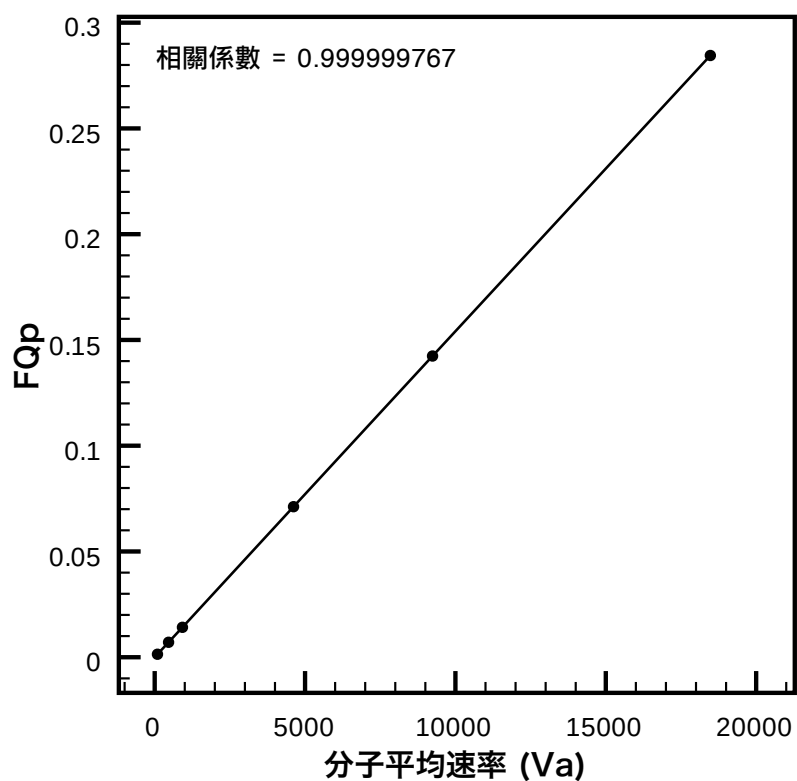
(二) 粒子具有體積 ($r = 1$)

1. 粒子速度為操作變因 ($V_{rms} = 100, 500, 1000, 5000, 10000, 20000$)

(1) 平均速率 Va vs. 粒子與器壁的碰撞頻率 FQw (圖 18)

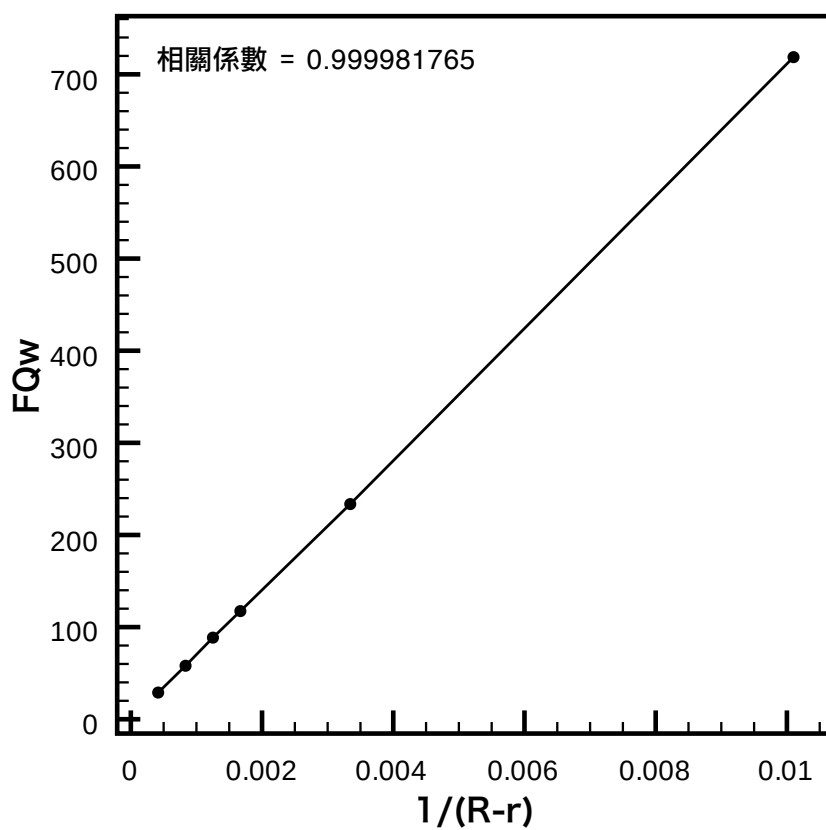


(2) 平均速率 V_a vs. 粒子與粒子間的碰撞頻率 FQ_p (圖 19)

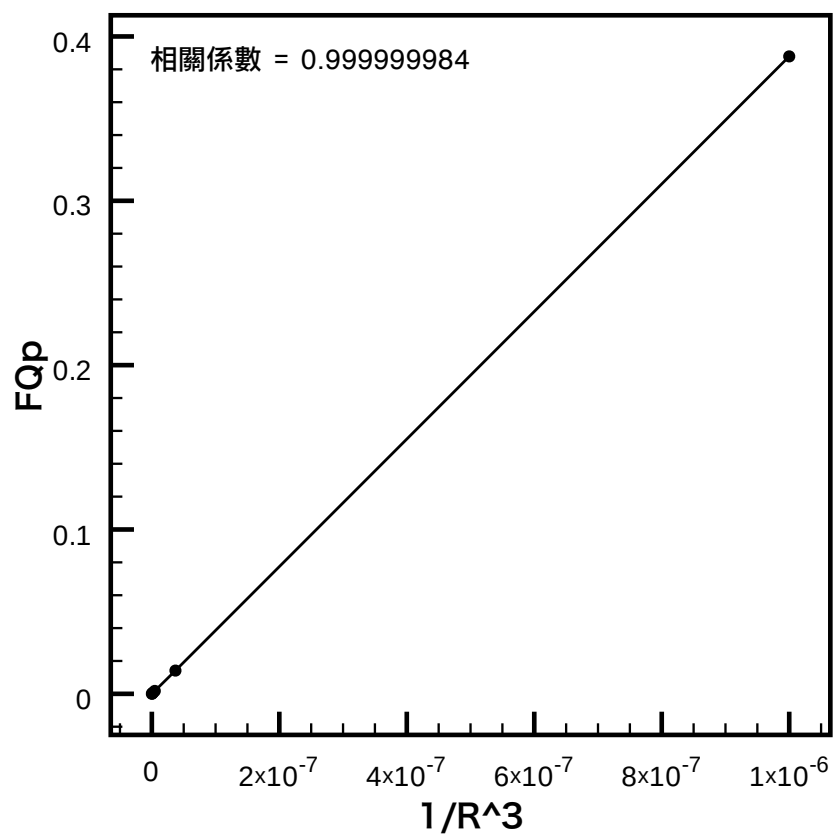


2. 容器半徑 R 為操作變因 ($R = 100, 300, 600, 800, 1200, 2400$)

(1) $1/(R-r)$ vs. FQ_w (圖 20)

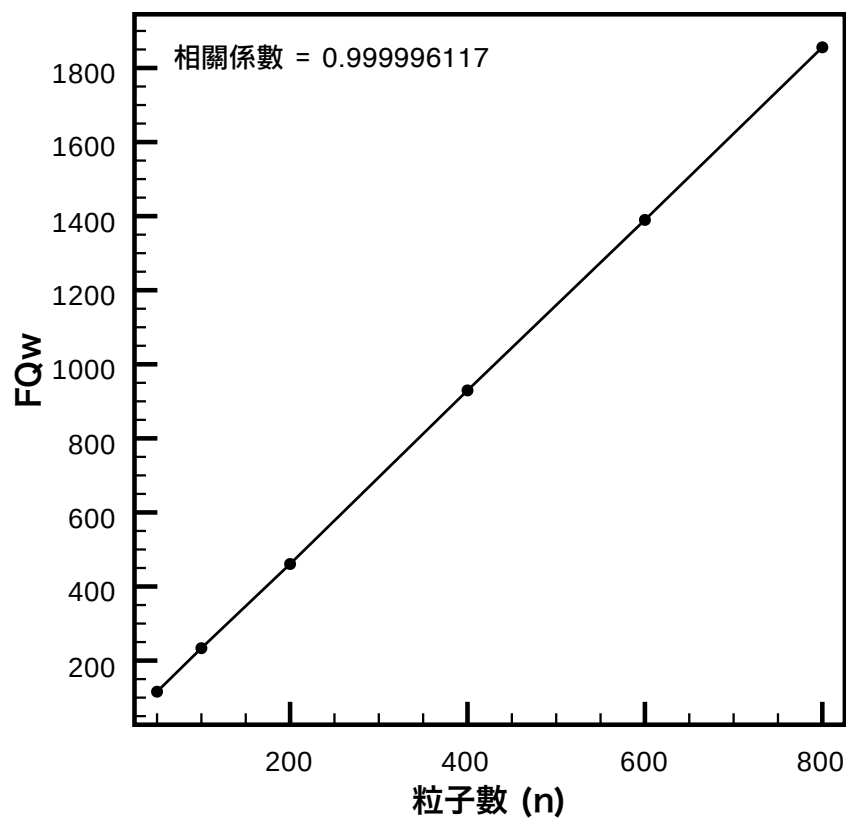


(2) $1/R^3$ vs. FQp (圖 21)

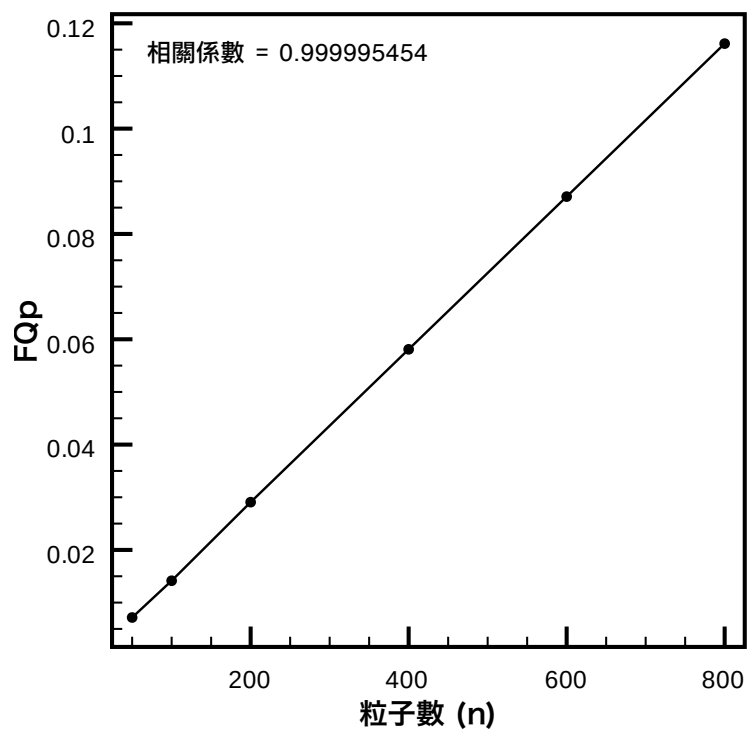


3. 粒子數 n 為操作變因 ($n = 50, 100, 200, 400, 600, 800$)

(1) n vs. FQw (圖 22)



(2) n vs. FQp (圖 23)



二、非理想容器

(一) 粒子無體積, $r = 0$

1. 粒子速度 v 為操作變因 ($V_{rms} = 100, 500, 1000, 5000, 10000, 20000$)

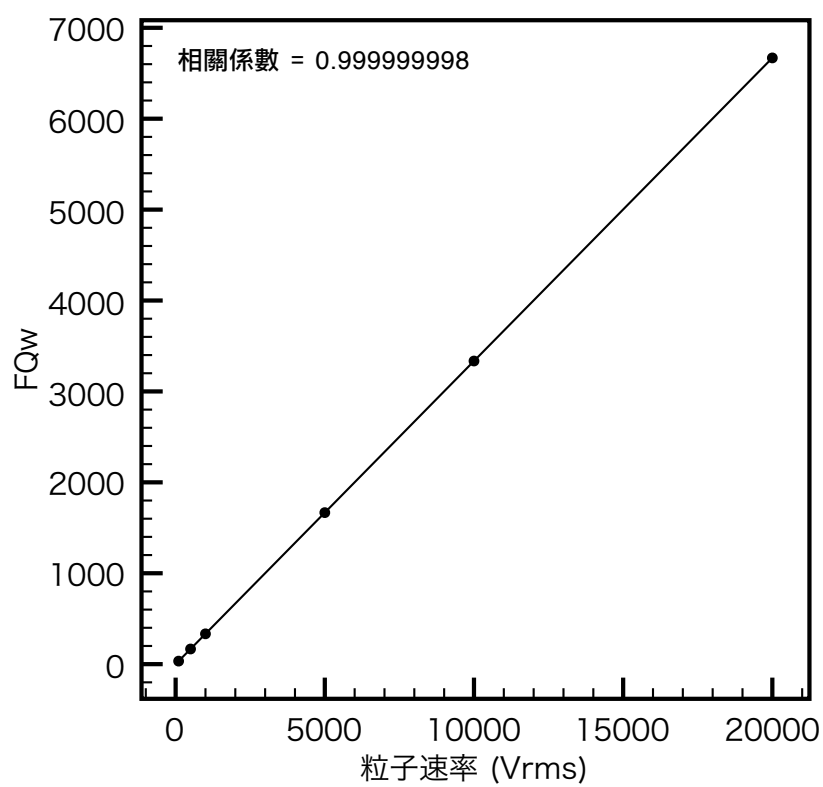


圖 24 粒子速率與器壁碰撞頻率關係圖

2. 容器半徑為操作變因 ($R = 100, 300, 600, 800, 1200, 2400$)

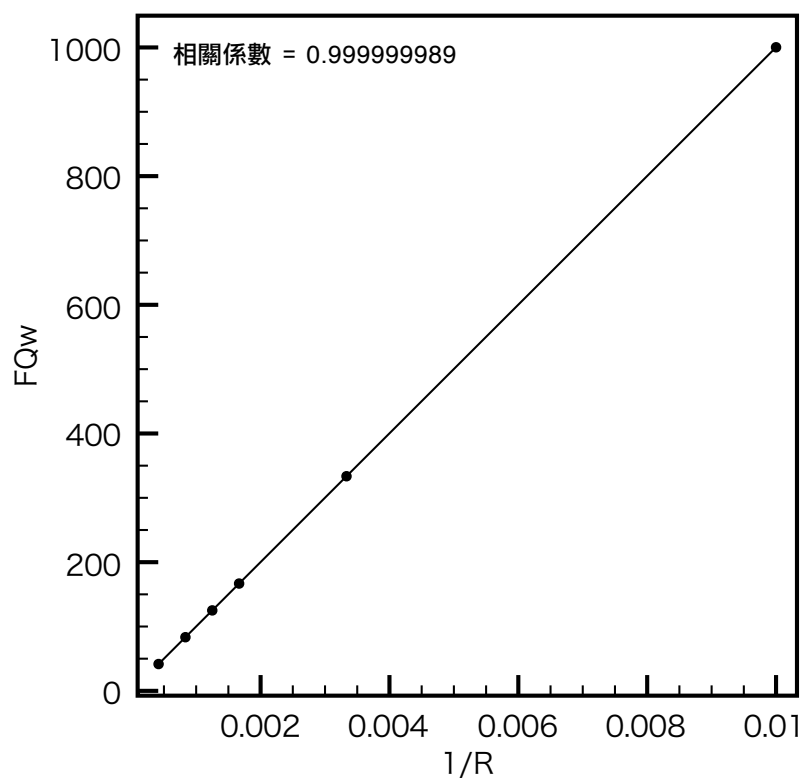


圖 25 容器大小與器壁碰撞頻率關係圖

3. 粒子數為操作變因 ($n = 50, 100, 200, 400, 600, 800$)

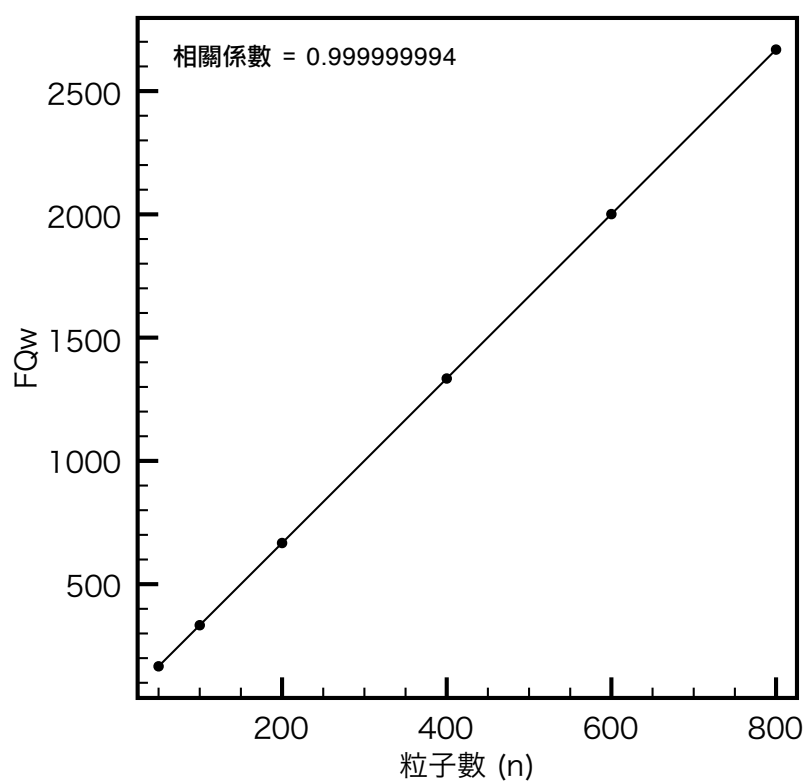
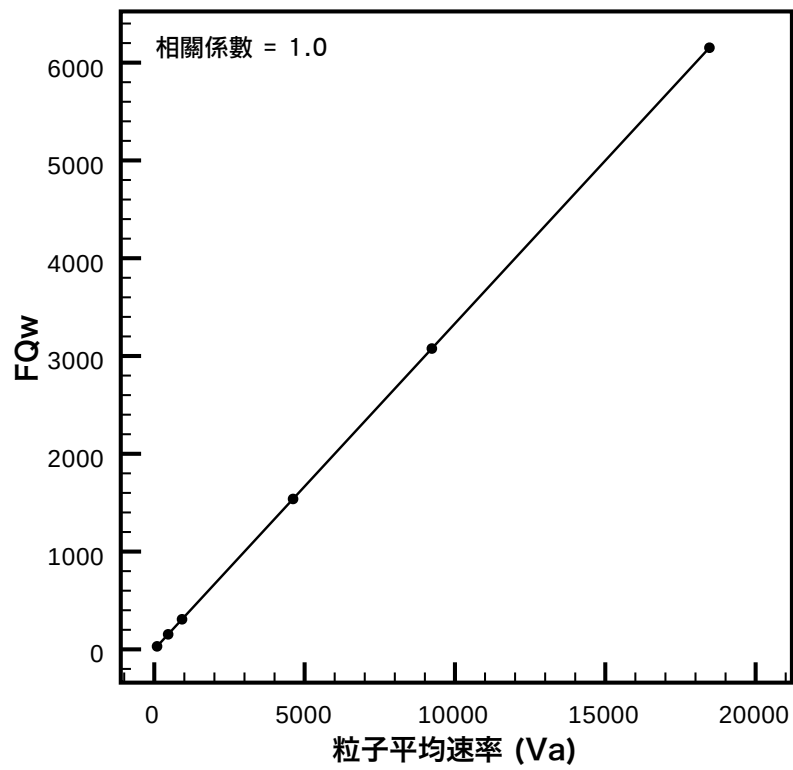


圖 26 粒子數與器壁碰撞頻率關係圖

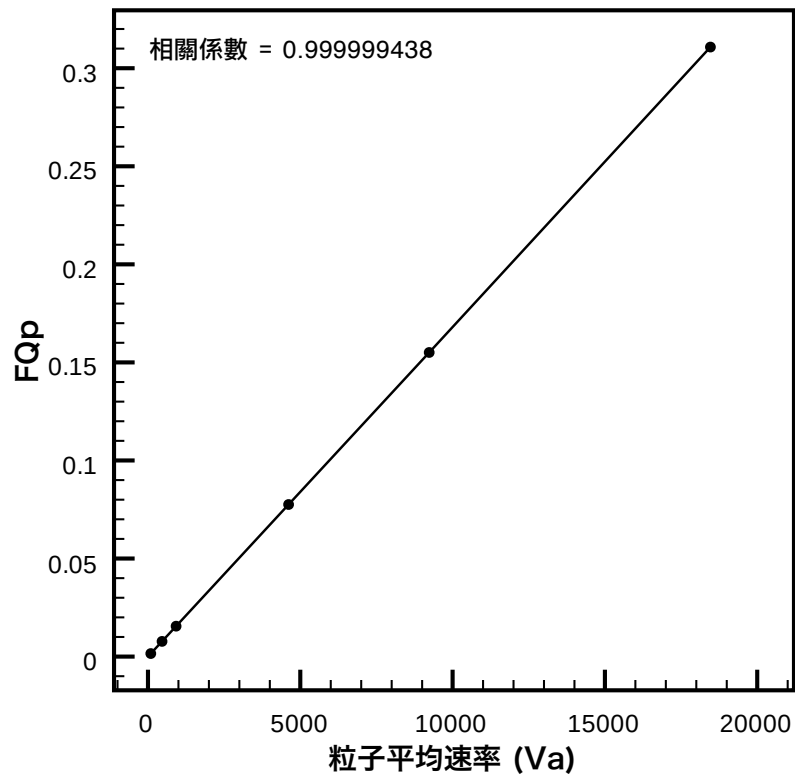
(二) 粒子具有體積, $r > 0$

1. 粒子速率為操作變因 ($V_{rms} = 100, 500, 1000, 5000, 10000, 20000$)

(1) 分子平均速率 V_a 與 粒子與器碰的碰撞頻率 FQ_w 關係圖 (圖 27)

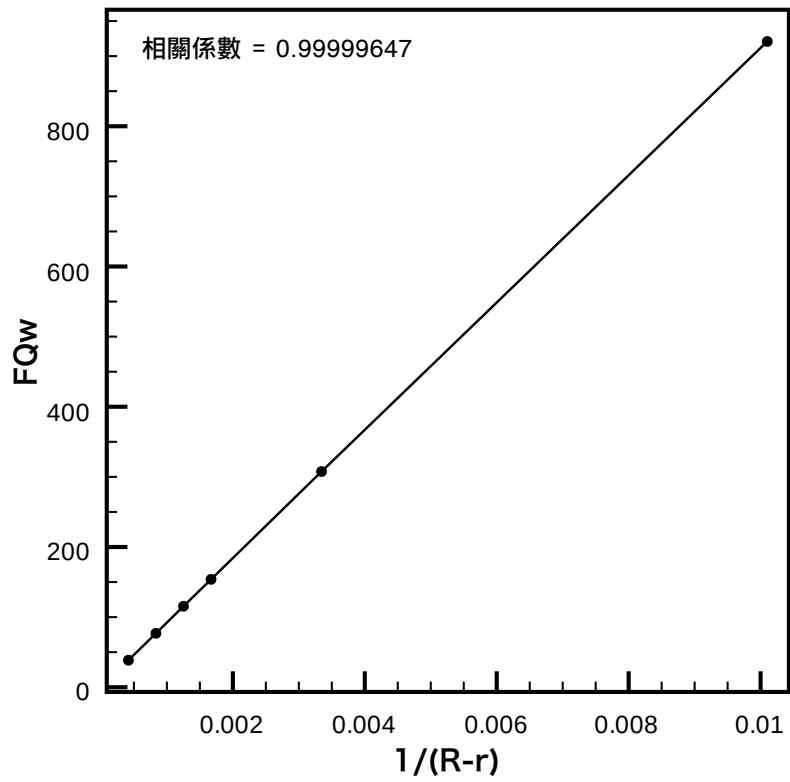


(2) 分子平均速率 V_a 與 粒子與粒子間的碰撞頻率 FQ_p 關係圖 (圖 28)

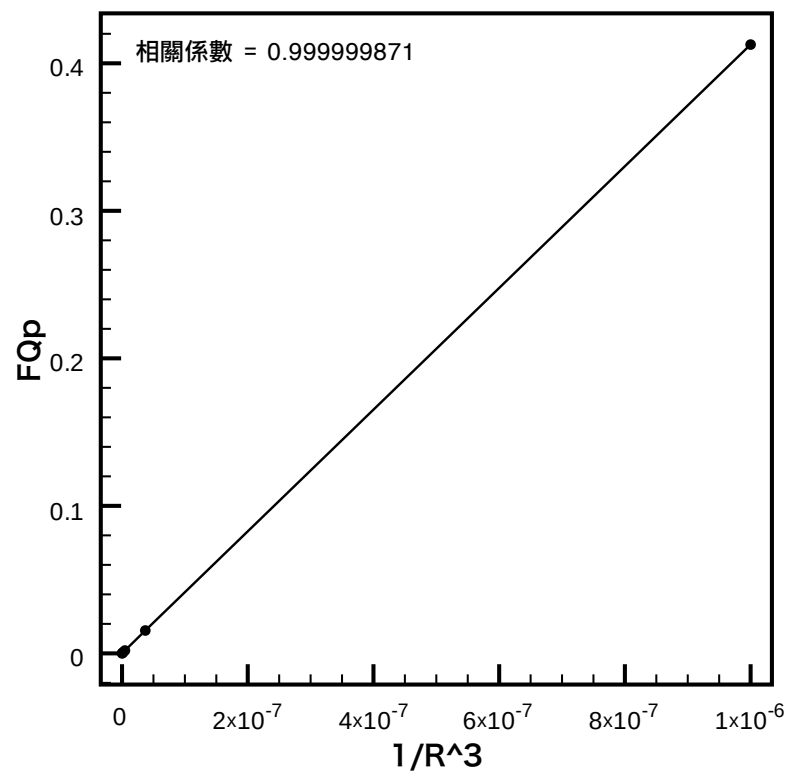


2. 容器半徑 R 為操作變因 ($R = 100, 300, 600, 800, 1200, 2400$)

(1) $1/(R-r)$ 與 FQ_w 關係圖 (圖 29)

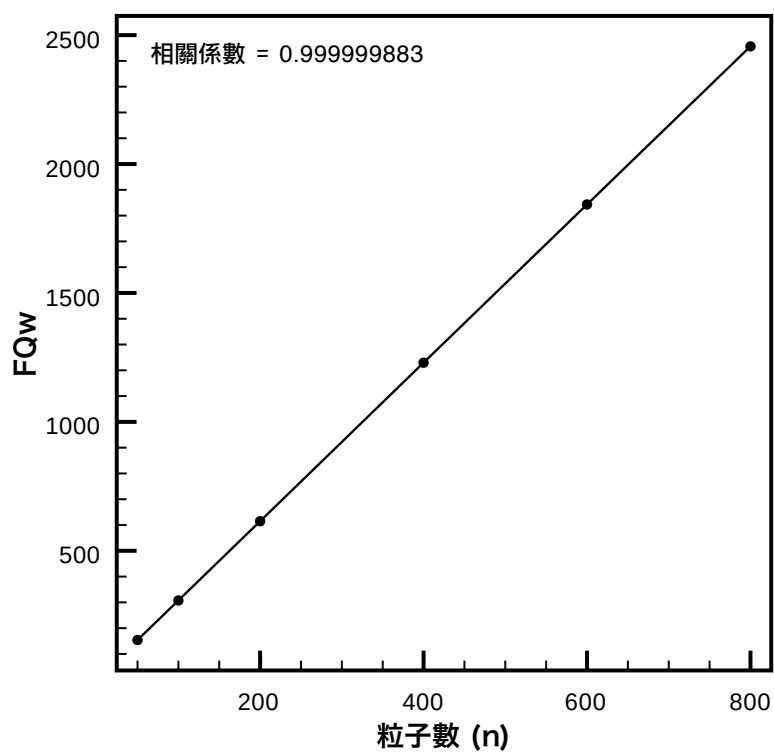


(2) $1/R^3$ 與 FQ_p 之關係圖 (圖 30)

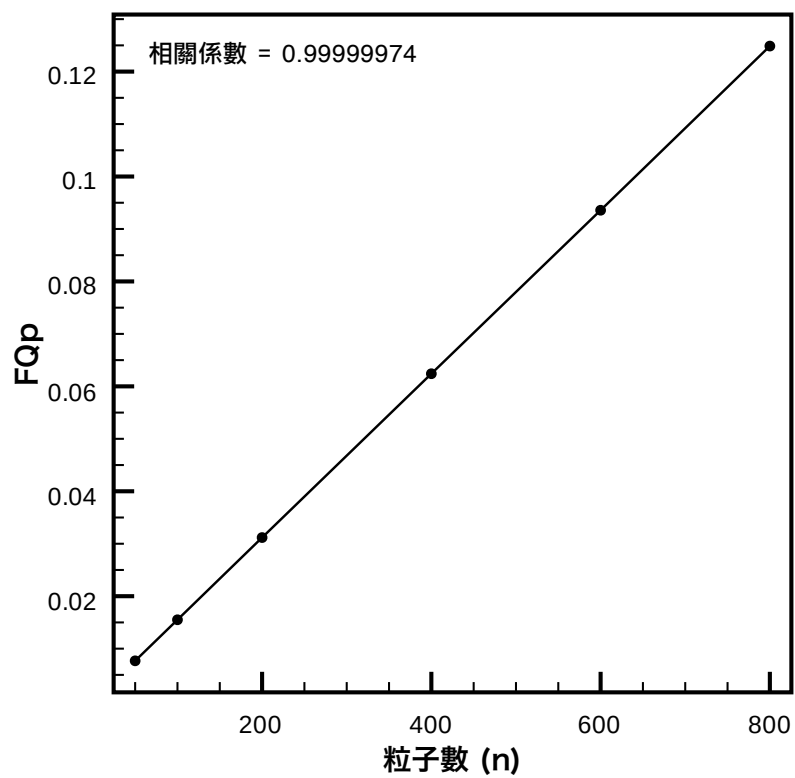


3. 粒子數 n 為操作變因 ($n = 50, 100, 200, 400, 600, 800$)

(1) n 與 FQ_w 關係圖 (圖 31)



(2) n 與 FQ_p 關係圖 (圖 32)



【柒】結果討論

一、理想與非理想容器

在 Maxwell 的理論中，氣體分子應是均勻分佈在容器中，當初 Maxwell 將分子速度分成 x, y, z 三方向，這三方向的反彈應是被推論成正負號的變換，屬於鏡面反射的理想容器。但我們認為，對氣體粒子而言，容器壁應不屬於平整無瑕的，雖然容器壁內的形狀不因碰撞而形變，而容氣內壁上同一位置要被分子撞擊二次的機率相當的低，故取電腦亂數求得的反彈方向來模擬非理想容器應當無太大問題。由圖 11 至 14 中發現，在非理想容器中，無論粒子是否有體積，粒子在器壁附近的密度高於他處，原因應該來自於不可預測的反彈方向；在理想容器的數據中可發現，由殼層內粒子密度近似於總體密度來看，理想容器中粒子是均勻的分佈於容器中。

二、平均速率 $\bar{v}$ 的求法

Maxwell 定義平均速率 $\bar{v} = \sqrt{\frac{8}{3\pi}} v_{rms}$ ，其中並沒有粒子數 n 的關係在其中，當初

Maxwell 應該將粒子數設定在 $n \rightarrow \infty$ ，但在我們的系統裡 n 最大也不過 800 個 (我們曾經設定到 1,000,000 個，然計算完成估算需要六個月以上的執行)，平均速率都不能到達 Maxwell 所述的平均速率，我們設計了一組實驗數據在理想與非理想容器系統中進行實驗，其結果如下兩表：

理想容器							
R	n	r	v	$\bar{v}$	FQw	FQp	平均自由徑
100	10	10	1000	928.95791	78.6215464	4.36554029	212.793342
100	20	7.071067812	1000	925.30826	151.850879	4.27968234	216.209565
100	40	5	1000	923.22349	294.648106	4.21578795	218.991918
100	80	3.535533906	1000	922.29699	579.342738	4.13484043	223.055037
100	160	2.5	1000	921.80812	1144.86700	4.06636942	226.690698
100	320	1.767766953	1000	921.63969	2266.78808	4.02216838	229.140006
100	640	1.25	1000	921.49457	4505.90122	3.98603162	231.180947

非理想容器							
R	n	r	v	$\bar{v}$	FQw	FQp	平均自由徑
100	10	10	1000	929.40872	95.5075155	3.91953337	237.122288
100	20	7.071067812	1000	925.50959	187.715240	4.00593362	231.034679
100	40	5	1000	923.62698	371.279837	4.04412257	228.387483
100	80	3.535533906	1000	922.82110	737.266673	4.06548517	226.989167

100	160	2.5	1000	922.04133	1466.91974	4.08175868	225.893149
100	320	1.767766953	1000	922.20806	2925.58533	4.09280484	225.324221
100	640	1.25	1000	921.96997	5826.45267	4.10241349	224.738430

由上表實驗之後我們發現 $\bar{v} \propto \frac{1}{n}$ ，經過試算表的統計後，推出在理想容器與非理想容器中的粒子平均速率為：

$$\bar{v} = \left(\sqrt{\frac{8}{3\pi}} + \frac{1 - \sqrt{\frac{8}{3\pi}}}{n} \right) v_{rms}$$

三、粒子與器壁的碰撞頻率 FQw

無論粒子是否有體積，是否為理想或非理想容器的條件下，由實驗數據可知

$FQw \propto \bar{v}$ ， $FQw \propto \frac{1}{R-r}$ ， $FQw \propto n$ ，故可導出 $FQw \propto \frac{n\bar{v}}{R-r}$ ，在 Maxwell 的氣體

動力論所提到的器壁碰撞頻率 $f_w = \frac{n\bar{v}}{4Volumn} = \frac{3n\bar{v}}{16\pi R^3}$ ，將我們所定義的 FQw 與

f_w 整理後可得 $FQw = f_w \times 4\pi R^2$ ， $FQw = \frac{3n\bar{v}}{4R}$ ，若經過微觀的修正，此式要改成

$FQw = \frac{3n\bar{v}}{4(R-r)}$ 。我們先設定

$FQw = k_w \frac{n\bar{v}}{R-r}$ ，將討論二中的實驗

設計數值代入後，在理想容器系統中發現當粒子數愈來愈大時， k_w 值愈接近 0.75 (3/4)，與 Maxwell 推出的式子近乎相同 (圖 33)。將容器的半徑減去粒子的半徑等同於粒子球心的實際運動區域，因此我們認為在微觀的狀況下，理想容器中粒子與器壁的碰撞頻率需修正為：

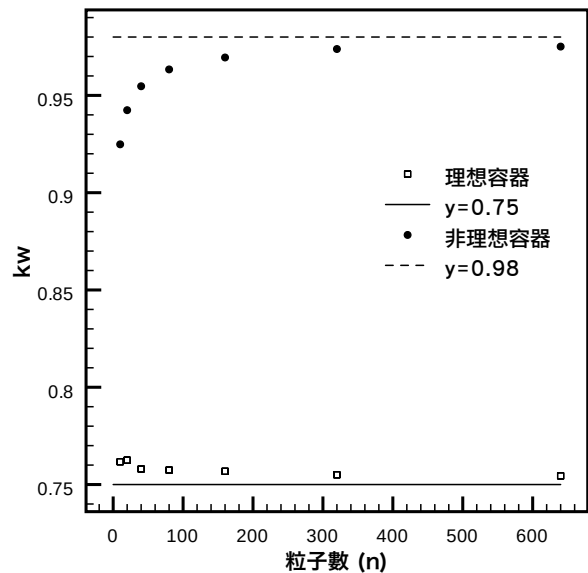


圖 33 FQw 的係數找尋圖 (理想容器)

$$FQ_w = \frac{3n\bar{v}}{4(R-r)}$$

而由圖 33 中粗略推論，非理想容器中粒子與器壁的碰撞頻率則為：

$$FQ_w = 0.98 \frac{n\bar{v}}{R-r}$$

四、粒子與粒子間的碰撞頻率 FQp

由圖 19, 21, 23, 28, 30, 31, 34 等九個圖看來， $FQ_p \propto n$ ， $FQ_p \propto \bar{v}$ ，

$FQ_p \propto \frac{1}{R^3}$ ， $FQ_p \propto r^2$ ，可整理成

$FQ_p \propto \frac{nr^2\bar{v}}{R^3}$ ，Maxwell 氣體動力論

中的粒子間碰撞頻率為

$f_p = \frac{3\sqrt{2}nr^2\bar{v}}{R^3}$ ，設 $FQ_p = k \frac{nr^2\bar{v}}{R^3}$ ，而

由討論二中的實驗數據代入後，在理想容器中，當粒子數愈來愈多時，常數項 k 愈來愈趨近 $3\sqrt{2}$ ，與 Maxwell 推論相符 (圖 34)。理想容器中粒子與粒子間碰撞的發生頻率為：

$$FQ_p = 3\sqrt{2} \frac{nr^2\bar{v}}{R^3}$$

而在非理想容器中，粒子與粒子間的碰撞頻率的係數會略低於 $3\sqrt{2}$ 。

由結果可知理想容器與非理想容器在 V_a , FQ_w , FQ_p 所取得的數值並不相同，而我們認為世界所有的容器都是非理想容器，此有待其他精確的實際實驗來証實。

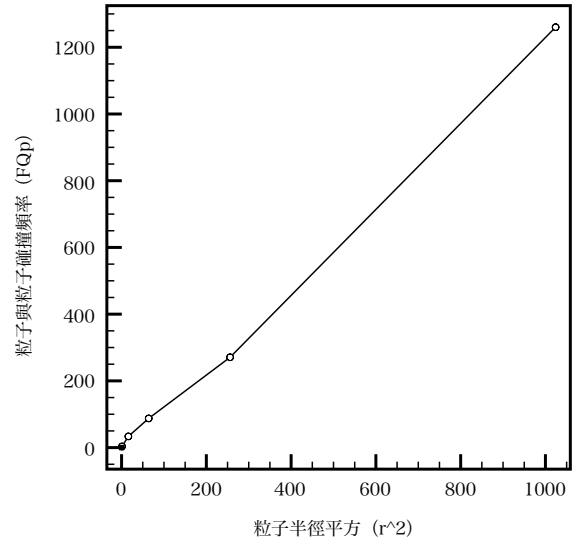


圖 34 FQp vs 粒子半徑 r

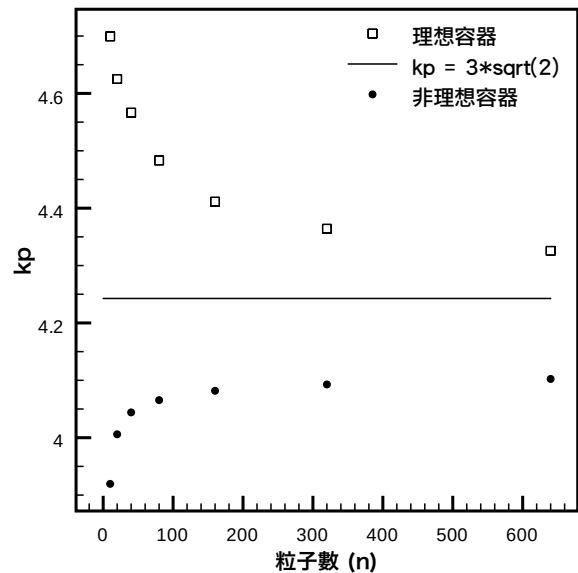


圖 35 FQp 的係數找尋圖

五、FQw 與壓力 P 之間的關係

由能量的因次著手，我們可以導出 $f_w \propto \frac{nv_{rms}}{R^3} \propto \frac{P}{mv_{rms}}$ (P 為壓力，m 為質量)，因

此若在同種氣體、相同的均方根速率，也就擁有相同的平均移動動能的情況下，則 $f_w \propto P$ 。

六、碰撞能量的轉換

粒子體積的有無，關係到粒子間是否發生碰撞，在粒子無體積的狀況下，粒子不發生碰撞，也無法將能量傳遞轉換，也不會有 Maxwell-Boltzmann 的速率分佈。

七、混合不同條件的兩種粒子

本模擬程式可以設定十種不同條件的氣體分子，在 $R = 300$, $n_1 = 50$, $r_1 = 1$, $v_1 = 10$, $n_2 = 50$, $r_2 = 1$, $v_2 = 1000$ 的設計中，由分子速率分佈圖來看可以發現圖形原有『雙峰』，依時間的延展『雙峰』的情況會回到鐘形的 Maxwell 曲線，但 $v_2=1000$ 峰值下降的速度比 $v_1 = 10$ 要來得快，原因來自於 $FQp \propto \bar{v}$ ，速率愈高，發生粒子間碰撞的頻率愈高，且兩高速粒子發生碰撞頻率最高，一高速一低速者次之，最低者為兩低速粒子。(本實驗需現場操作程式以觀察動態變化)。

八、二維平面碰撞與三維空間碰撞的結果差異

在網路上不斷找資料的過程中，發現了幾個由大學教授所寫的有關電腦模擬氣體動力論的程式，其中由匈牙利布達佩斯科技大學物理所的 Géza I. Márk 教授所寫的 TEDDY 程式與我們的程式有雷同之處，不同的是他的程式只能模擬二維平面碰撞，且並非使用 OpenGL 繪圖語言，我們的程式則模擬三度空間的碰撞及使用較有效率的 OpenGL 繪圖語言。發現這點後，我們加緊腳步將我們的程式改寫成可以模擬二維平面碰撞。

二維平面碰撞與三維空間碰撞的實驗結果大不相同。如圖 36 中 3D 是以三度空間模擬後所得到的粒子速率分佈圖，圖 36 中 2D 是以二維平面模擬所得的分佈圖。實驗設計為：三維中粒子的總體積與容器體積比為 $1/5$ ，同樣的，二維中粒子圓的總面積比容器圓的總面積也為 $1/5$ 。

實驗條件	R	n	r	Vrms
3D	100	25	20	1000
2D	100	25	$4\sqrt{5}$	1000

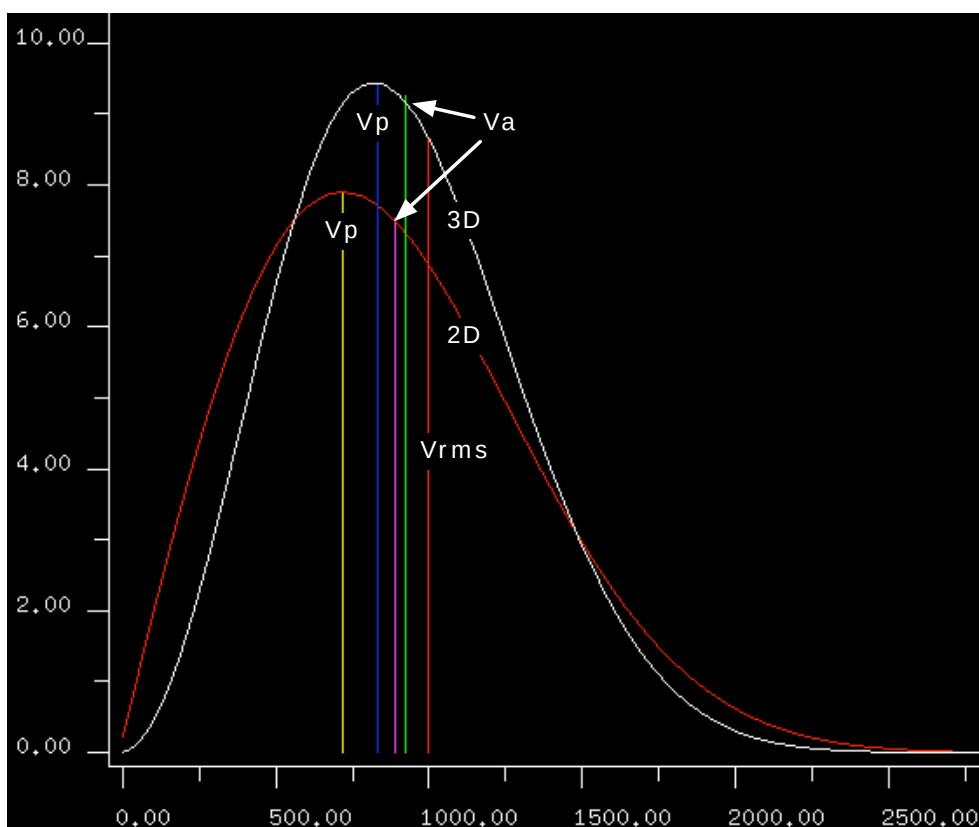


圖 36 二維平面與三維立體空間碰撞之粒子速率分佈圖

由圖 36 中發現二維平面碰撞的粒子速率分佈曲線較為寬扁，而三維空間碰撞的粒子速率分佈曲線較為高瘦，且在二維平面碰撞中發現較多速度為零的粒子。再者二維中的最大可能速率 V_p 及平均速率 V_a 均較三維空間碰撞的結果低。能量的交換與碰擊的角度有關，在二維的空間中， z 軸方向屬於「必然碰撞」，機率上比三維空間要來得高，能量的交換上也比較廣泛，故粒子速率因撞擊而靜止的機率大增，同時也會有較三維空間數量要多的高速的粒子，曲線向兩邊擴的結果讓曲線中 V_p 值與 V_a 值下降。我們認為二維平面碰撞與三維空間碰撞之間應可以利用數學關係式來表示，但目前我們的數學能力不足無法証實。

九、容器形狀的影響

在網路上所找到的模擬程式多以方型容器為系統，本實驗中的容器則以二維的圓形平面或三維的球狀容器為系統模擬，因此我們將原程式改寫成另一個可以以正方形平面或正方體 (與球或圓同體積或面積) 進行模擬。進行實驗之後結果發現，粒子平均速率 V_a 的計算、粒子間碰撞的頻率 FQ_p 的計算都相同，唯粒子與器壁的碰撞 FQ_w 因為球體表面積與正方體表面積不同，其正方體容器之 FQ_w / 球型

容器之 $FQ_w = \frac{3}{2}\pi\left(\frac{4}{3}\pi\right)^{\frac{2}{3}}$ ，只要進行表面積比值的修正後所得到的結果都一

樣，雖然我們的實驗只進行了正方體與球狀容器的模擬，但我們推測容器的形狀並不影響 Maxwell 的氣體動力論中所計算的結果。

【捌】模型程式未來的展望

- 一、相較於網路上找到的模擬程式多使用 JAVA 語言撰寫，但其限制是在三度空間繪圖方面執行能力較為薄弱，本實驗以 OpenGL 架構的模擬程式相當值得推廣，唯跨平台必須重新編譯程式。
- 二、既然粒子系統中粒子的個性可以被塑造，將來可以加入粒子間作用力的描述或粒子位能，使粒子能與現實條件更接近。甚至可以模擬到液態及固態物質的層面。
- 三、能向雙原子與多原子分子的模擬邁進，如 O_2 或 H_2O 分子。
- 四、不斷改寫程式：
 - (一) 以求執行效率的最佳化，以期能提高粒子數進行實驗。
 - (二) 讓壓力的計算成為可能，即時調整容器大小，觀察壓力與體積的關係。
 - (三) 加入更多熱力學的數值取得研究，如 entropy 或莫耳比熱等。
 - (四) 可以說明化學反應發生在分子碰撞中微觀的現象模擬。
- 五、希望能列入將來高中教材中有關氣體動力論這一部分的模擬實驗。

【玖】參考文獻

- Márk, Géza http://www.kfki.hu/physics/physedu/kinetic_gas_model/index.html
- Reeves, William T. 1983: "Particle Systems - A Technique for Modeling a Class of Fuzzy Objects", **Computer Graphics** 17:3 pp. 359-376 (SIGGRAPH 83)
- 梁森昌、郭青齡、李耀旭 1984 氣體模型製作與探討，民國 73 年全國科展作品
- 吳文政，熱學，建宏出版社，pp.76~133，2003
- 吳大猷，理論物理第五冊：熱力學、氣體運動論、統計力學，聯經出版社，1979
- 李怡嚴，大學物理學 (二)，東華書局，1970
- 黃定加，物理化學實驗，高力圖書有限公司，1982
- 張大同、楊介信，中學物理實驗大全，凡異出版社，1997
- 郭奕玲、沈慧君，物理通史，凡異出版社，1996
- 楊世瑩，Excel 在統計上的應用，旗標出版社股份有限公司，2004
- 陳正凱、陳錦輝，C/C++ 入門與應用，知城數位科技股份有限公司，2001

評	語
---	---

040103 由粒子系統微觀氣體動力論

本作品利用電腦模擬氣體分子的運動，現有成果已為難能可貴，盼能在既有基礎上更進一步，模擬真實氣體的運動。