

气体碰撞和扩散模拟

黄宏达¹

(1. 复旦大学, 物理学院, 物理系, 上海市 200433)

摘要: 本实验使用 HTML5, CSS, JavaScript 模拟粒子自由碰撞和气体扩散过程, 计算压强与温度和分子密度关系。模拟理想碰撞条件下气体热的传导过程, 实现温度的动态平衡, 与理论相符。

关键词: HTML5; 粒子碰撞; 气体扩散; 热平衡

1. 引言

HTML5 技术结合了 HTML4.01 的相关标准并革新, 符合现代网络发展要求, 在 2008 年正式发布。HTML5 由不同的技术构成, 其在互联网中得到了非常广泛的应用。^[1]

广义的 html5 包含 HTML5、CSS3、JavaScript 在内的一套技术组合。CSS 指层叠样式表, 是一种用来表现 HTML 或 XM 等文件样式的计算机语言。CSS 不仅可以静态地修饰网页, 还可以配合各种脚本语言动态地对网页各元素进行格式化。

JavaScript (简称“JS”) 是一种具有函数优先的轻量级, 解释型或即时编译型的编程语言。JavaScript 被广泛用于 Web 应用开发, 常用来为网页添加各式各样的动态功能, 为用户提供更流畅美观的浏览效果。^[2]

通过 HTML5, CSS, JavaScript 的结合, 可以建立网页并在网页中进行许多物理过程的模拟, 具有轻量, 有效, 直观的优点。本项目结合弹性碰撞原理, 模拟了粒子碰撞过程, 可以直观的展示在弹性碰撞条件下粒子的运动过程。此外, 通过统计动量的变化, 获得了在弹性碰撞条件下压强与粒子密度和温度的关系。本项目还模拟了不同分子的扩散过程, 展现了温度的动态平衡过程。

2. 实验原理

2.1 弹性碰撞

一维条件下, 质量为 m_1, m_2 , 速度为 v_1, v_2 的小球发生对心弹性碰撞, 如图 1 所示, 碰撞后的速度为 v'_1, v'_2 , 通过动量守恒和能量守恒原理, 可以得到关系:

$$v'_1 = \frac{(m_1 - m_2)v_1 + 2m_2v_2}{m_1 + m_2} \quad (1)$$

$$v'_2 = \frac{(m_2 - m_1)v_2 + 2m_1v_1}{m_1 + m_2} \quad (2)$$

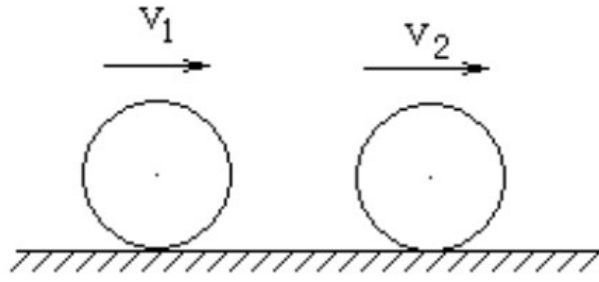


图 1 一维对心弹性碰撞

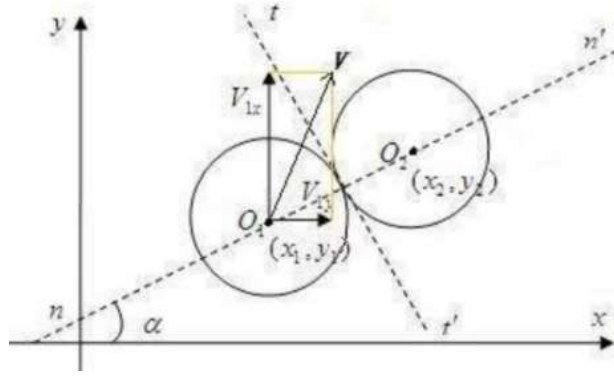


图 2 二维弹性碰撞

在二维条件下，如图 2 所示，设碰撞时两个小球的坐标为 $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ ，速度为 $(v_{1x}, v_{1y}), (v_{2x}, v_{2y})$ ，质量为 m_1, m_2 ，碰撞后的速度为 $(v'_{1x}, v'_{1y}), (v'_{2x}, v'_{2y})$ 。将两个小球的速度分解为沿小球中心连线方向 v_{1n}, v_{2n} 和垂直方向的速度 v_{1t}, v_{2t} 可得：

$$v_{1n} = \frac{(x_2 - x_1)v_{1x}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} + \frac{(y_2 - y_1)v_{1y}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} \quad (3)$$

$$v_{2n} = \frac{(x_2 - x_1)v_{2x}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} + \frac{(y_2 - y_1)v_{2y}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} \quad (4)$$

$$v_{1t} = -\frac{(y_2 - y_1)v_{1x}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} + \frac{(x_2 - x_1)v_{1y}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} \quad (5)$$

$$v_{2t} = -\frac{(y_2 - y_1)v_{2x}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} + \frac{(x_2 - x_1)v_{2y}}{\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} \quad (6)$$

考虑动量守恒原理和能量守恒原理，认为 v_{1n}, v_{2n} 符合一维对心碰撞公式， v_{1t}, v_{2t} 不变。根据（1）式，可知碰撞后的速度为：

$$v'_{1n} = \frac{(m_1 - m_2)v_{1n} + 2m_2v_{2n}}{m_1 + m_2} \quad (7)$$

$$v'_{2n} = \frac{(m_2 - m_1)v_{2n} + 2m_1v_{1n}}{m_1 + m_2} \quad (8)$$

$$v'_{1t} = v_{1t} \quad (9)$$

$$v'_{2t} = v_{2t} \quad (10)$$

根据式(7) (8) (9) (10)，可推得最后碰撞后的速度为

$$v'_{1x} = \frac{(x_2-x_1)v'_{1n}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} - \frac{(y_2-y_1)v'_{1t}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} \quad (11)$$

$$v'_{2x} = \frac{(x_2-x_1)v'_{2n}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} - \frac{(y_2-y_1)v'_{2t}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} \quad (12)$$

$$v'_{1y} = -\frac{(y_2-y_1)v'_{1n}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} + \frac{(x_2-x_1)v'_{1t}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} \quad (13)$$

$$v'_{2y} = -\frac{(y_2-y_1)v'_{2n}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} + \frac{(x_2-x_1)v'_{2t}}{\sqrt{(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2}} \quad (14)$$

根据式(1)–(14)可以获得碰撞后的速度。

2.2 温度

为了研究粒子自由碰撞的压强和扩散过程的热量传导，还需要考虑分子平均动能与温度关系。温度是分子平均动能的标志。在常温条件下，分子平均动能与温度符合关系式(15)

$$\bar{\varepsilon}_k = K_B T \quad (15)$$

本项目中，假定各粒子速度相同，由式(15)，可得分子速度与温度的关系为

$$v = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (16)$$

2.3 压强

压强定义为单位时间内，单位面积器壁因分子与器壁间的碰撞而引起的动量变化，压强 p 与动量 P 满足关系(17)

$$p = \frac{dP}{dsdt} \quad (17)$$

用过统计一段时间内接触容器壁的粒子总动量的变化量可以得到压强。

3. 实验方法与步骤

首先，使用 HTML5 和 CSS 搭建网页框架，建立目录和操作指南，添加控件和画布。

接着，根据粒子弹性碰撞原理，通过 JavaScript 模拟粒子碰撞，通过统计一定时间内平均动能的改变来计算压强，得到压强和温度密度的关系。在 HTML5 中嵌入 JavaScript 脚本实现动画效果，显示 $P - \frac{NRT}{V}$ 图。

最后，根据粒子弹性碰撞原理，通过 JavaScript 模拟不同分子融合扩散的

过程，实时统计分子平均动能得到温度，在画布中显示隔板两侧温度，展现温度的传导和动态平衡过程。

4. 实验结果和分析

(1)最后所获得的页面框架如图 3，图 4，图 5 所示，在顶部设置目录和超链接进行跳转。在粒子碰撞中，采用滑条和数字框来对参数进行控制，可控参数为分子个数和速度，而在气体扩散的模拟中，则使用数字框实现交互，可控参数为两侧分子质量，个数和温度。

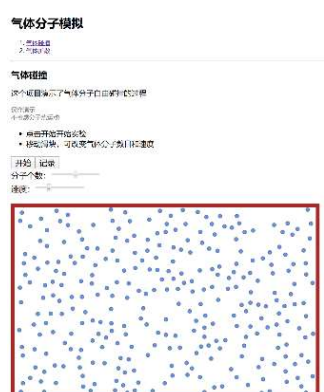


图 3 页面框架

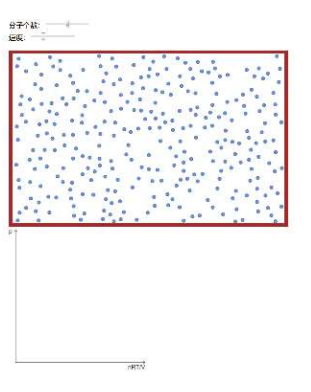


图 4 页面框架

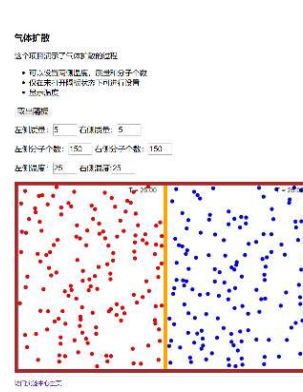


图 5 页面框架

(2)在分子碰撞的模拟过程中，希望能够实现对于运动状况的细致观察，因而设置开始按钮以实现对于动画的开和关的控制，便于观察瞬时的运动状态。当按下开始按钮时则动画开始，同时按钮变为停止，再次按下则可使画面停止来进行观察。

(3)在模拟中，发现存在多粒子碰撞之后不分离相嵌的现象，如图 6，原因在于 JavaScript 不是真正的连续时间，所以相碰时两粒子距离不是严格等于两倍半径，而是存在一定的相互嵌套，当多粒子碰撞之后，可能下一帧时两粒子仍旧相互嵌套，导致二次判定，然而实际上两粒子运动趋势为分离。解决方案为添加两粒子间的相对速度的判断，除了距离小于两倍半径之外还要求两粒子相对运动趋势为分离才进行碰撞判定。

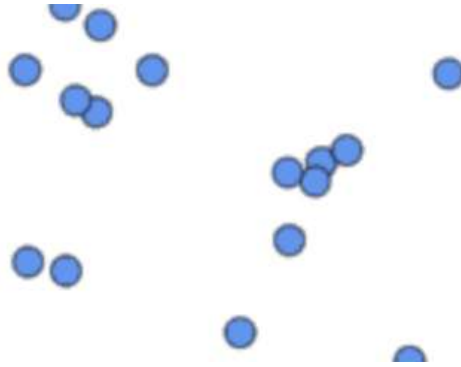


图 6 多例子同时碰撞造成嵌套

(4) 由于 JavaScript 性能所限，在大量粒子模拟时难以实现流畅的动画效果，因而采用的粒子数较少。在粒子碰撞中最大粒子数量为 600，因而统计压强时有较大的随机涨落。图 7, 8 展现了选择不同时间长度求压强所获得的 $P - \frac{nRT}{V}$ 图，可以看到由于随机涨落导致压强分布较为分散。此外，还可以发现，随统计时间的增加，可以减少随机涨落的影响。考虑到较长时间的均值可以减小涨落的影响，因而在碰撞模拟实验中加入了记录按钮，用于控制时间，并在表上实时显示当前的数据点，便于用户控制。通过较长时间的平均，最后获得的 $P - \frac{nRT}{V}$ 图如图 9 所示，基本符合线性关系，与实际相符。

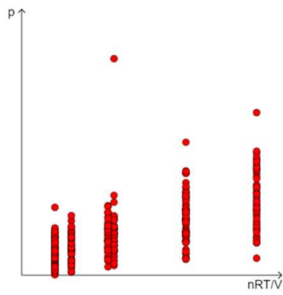


图 7 10 帧所得 $P - \frac{nRT}{V}$ 图

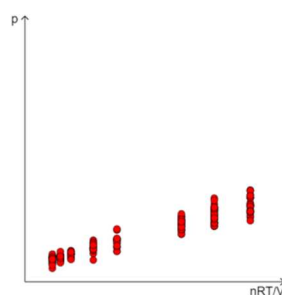


图 8 300 帧所得 $P - \frac{nRT}{V}$ 图

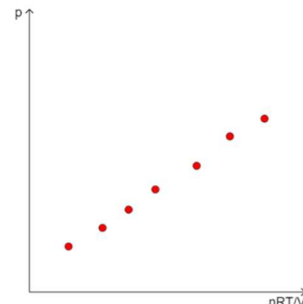


图 9 长时间记录所得 $P - \frac{nRT}{V}$ 图

(5)在分子扩散实验中，主要希望展现扩散的过程和温度的动态平衡，因而不设置暂停按钮，仅设置取出隔板按钮和重置按钮。在模拟过程中，对两侧温度进行实时的显示，便于观察。图 10，图 11 展现了两侧温度分别为 75℃和 25℃时的初态和终态。可以看到，在两侧质量和分子个数相等的情况下，最终温度稳定在 50℃左右，与实际相符。由于分子数目较少，因而温度的波动仍旧较大，最终平衡时仍旧有±10℃以内的波动，为本项目的缺点，通过增大粒子数量可以克服这一缺点，但对性能有较高要求。

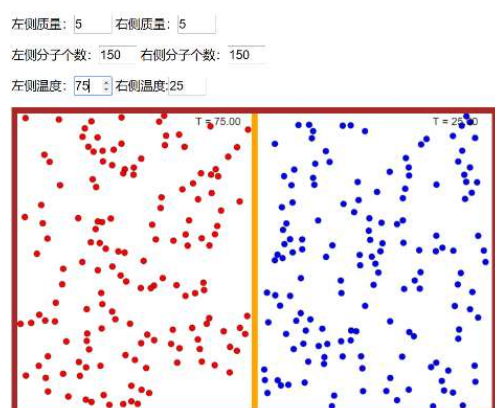


图 10 两侧温度为 75℃和 25℃时初态

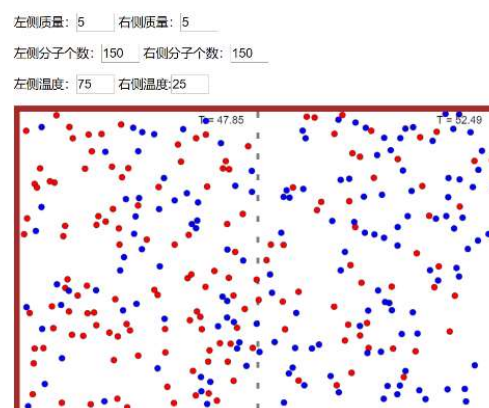


图 11 两侧温度为 75℃和 25℃时终态

(6)通过对两侧质量的控制，可以改变同一温度下两侧分子的速度，最后可以发现，随着质量的增加，达到热平衡的速度减慢。与气体分子量越小，导热系数越大^[3]的理论相符。

5. 实验结论

本项目根据弹性碰撞原理，模拟了粒子自由碰撞和不同分子间的扩散过程，基本与实际相符。同时，本项目计算了粒子自由碰撞过程的压强，发现随机涨落对结果有较大影响。通过较长时间取均值，得到的压强 P 与 $\frac{nRT}{V}$ 线性相关，与实际相符。扩散过程模拟中，实现温度的动态平衡，但由于性能所限，分子数较少，温度有±10℃的波动。通过改变隔板两侧分子的质量，可以发现随着质量增加，传导速率减少，与理论相符。

参考文献

[1]罗彪, 张宏涛. 基于 HTML5 的移动互联网应用发展趋势[J]. 信息与电脑:理论版, 2018, No. 404(10):134-136.

[2]https://developer.mozilla.org/zhCN/docs/Web/JavaScript/Language_Resources

[3] 杨世铭 陶文铨. 传热学(第4版)(BZ)(TB)[M]. 高等教育出版社, 2010.

代码上传于 <https://github.com/hhd88888/simulate-diffusion-and-collusion>。