Studiul distribuției moleculelor după componentele vitezei

Introducere teoretică

Fenomenele ce au loc într-un sistem cu un număr mare de particule se studiază cu ajutorul unor legi statistice .

Un eveniment ce poate avea loc într-un sistem statistic (de exemplu valoarea unei mărimi fizice) este determinat de variabila aleatoare, adică o mărime care poate lua valori dintr-o mulțime bine definita. Ea poate fi discretă (ξ) , sau continuă (η) adică poate lua valori izolate (x_i) sau toate valorile dintr-un interval dat (x, a) (de ex. ξ poate reprezenta număr de particule , nivelele de energie, iar η poate reprezenta temperatura, viteza).

Orice eveniment ce se poate realiza se caracterizează prin valoarea cea mai probabilă, dispersia și abaterea medie pătratică, noțiuni definite pentru variabilele aleatoare cu ajutorul probabilității P . Dacă $P_i = \dfrac{N_i}{\sum N_i}$ reprezintă probabilitatea realizării valorii x_i a variabilei aleatoare discrete (N_i fiind numărul de realizări a valorii x_i), atunci se definesc:

- valoarea cea mai probabilă: $M(\xi) = P_1X_1+...+P_nX_n = \sum_{i=1}^{n} P_iX_i$ (1)

- dispersia : $D(\xi) = \sqrt{D^2}(\xi)$ (2)

- abaterea medie pătratică : $D^2(\xi) = M(\xi - M(\xi))^2 = M(\xi^2) - M^2(\xi)$ (3)

Pentru o variabila aleatoare continuă (η) , probabilitatea ca ea sa aibă o valoare în intervalul (x , x + dx) este $\varphi(x)dx$. Astfel , pe baza definiției rezultă că :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)dx = 1 \qquad (4)$$

relație ce reprezintă condiția de normare . Acest rezultat se poate interpreta în felul următor : probabilitatea ca η sa ia valori în intervalul ($-\infty$, $+\infty$) este o certitudine . Analog , probabilitatea ca sa avem $\eta < x$ este

$$P(\eta < x) = F(x), \text{unde} F(x) = \int_{-\infty}^{x} \varphi(x)dx \qquad (5)$$

se numește funcție de repartiție.

Astfel , probabilitatea ca η sa aibă valori în intervalul (a , b) va fi :

$$P(a,b) = \int_{a}^{b} \varphi(x)dx \qquad (6)$$

şi vom obţine :

- valoarea cea mai probabilă: $M(\eta) = \int_a^b x\varphi(x)dx$ (7)

- dispersia: $D(\eta)=\sqrt{D^2(\eta)}$ (8)

- abaterea medie pătratică: $D^2(\eta) = \int_a^b [x-M(\eta)]^2 \varphi(x)\, dx$ (9)

Pentru sistemele statistice sunt definite diferite tipuri de distribuţii. Distribuţia în care valorile simetrice fata de valoarea cea mai probabila sunt egal probabile şi probabilitatea realizării unei valori este cu atât mai mica cu cat ea se abate mai mult de valoarea cea mai probabila , se numeşte distribuţie Gauss , sau distribuţie normală.

Densitatea de probabilitate va fi data de funcţia :

$$\varphi(x^2,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \qquad (10)$$

care este cunoscuta sub denumirea curba lui Gauss , data în Fig.1 Cu cât parametrul σ este mai mic, cu cât curba este mai ascuţită .

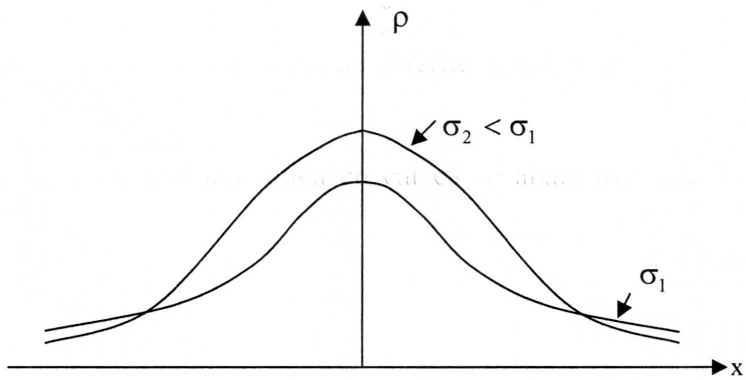

Fig. 1

Calculând dispersia pentru intervalul$(-\infty, +\infty)$ şi ştiind ca $M(\eta) = 0$, conform relaţiei (9) ,

rezultă $D^2(\eta) = \sigma^2$ (11)

Astfel se obţine semnificaţia parametrului σ ,el reprezentând chiar abaterea medie pătratică a variabilei η .

Distribuţia normală (sau distribuţia Gauss) reprezintă un interes deosebit, deoarece majoritatea fenomenelor statistice au o distribuţie aproximativ gaussiniana .

Majoritatea erorilor de măsurare au o distribuţie normală. Probabilitatea din ecuaţia (6), în care se foloseşte densitatea de probabilitate data de relaţia (10), scrisă sub forma :

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{-\frac{u^2}{2}} du \qquad (12)$$

unde s-a folosit notația $u = \frac{x}{\sigma}$, se mai numeşte şi <u>funcția de eroare</u> ϕ (z) se notează şi sub forma

$$\text{erf}.\, z = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^z e^{\frac{-u^2}{2}} du \qquad (13)$$

("erf" provine de la prescurtarea denumirii engleze "error function ") . Deoarece integrala nu poate fi calculata direct ea se dezvolta intr-un şir convergent , iar valorile astfel obținute se tabelează , (vezi anexa II) .

Aparatura şi procedeul experimental

Distribuția normală se poate ilustra pe modelul mecanic numit <u>tabela lui Galton</u> - o tabla cu cuie, dispuse regulat , printre care se împrăştie un număr mare de sfere mici ("particule ", "molecule") . Acestea se aduna în compartimente simetric aşezate față de axa de simetrie a tabelei (Fig . 2) .

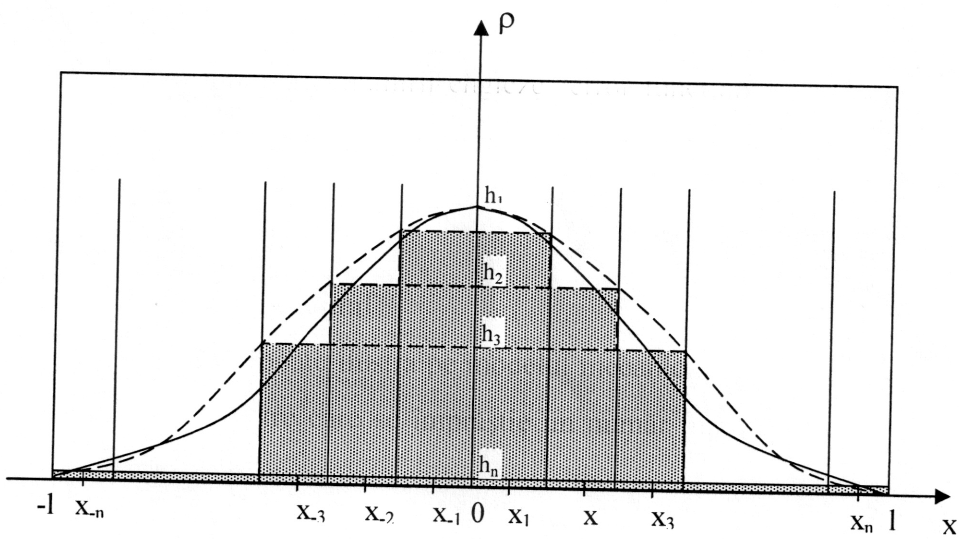

Fig. 2

Probabilitatea ca din cele N particule unele sa ajungă în compartimentul i este determinată de numărul de particule colectate N_i , şi anume $P_i = \frac{N_i}{N} = \frac{N_i}{\sum N_i}$, unde $N = \sum_{i=-n}^{n} N_i$ (n - numărul compartimentelor).

Deoarece N_i este proporțional cu înălțimea h_i a sferelor colectate în compartimente, se poate scrie

$$P_i = \frac{h_i}{\sum_{i=-n}^{n} h_i} = \frac{h_i}{H}, H = \sum_{i=-n}^{n} h_i \qquad (14)$$

În acest caz variabila aleatoare x_i (distanta dintre axa de simetrie a tabelei şi cea a compartimentului i) şi poate lua valori discrete în intervalul (-l , l).

Curba , care va fi înfăşurătoarea în partea superioara a particulelor adunate în compartimente va avea aspectul curbei lui Gauss . Pentru a se putea convinge de acest lucru , cu ajutorul mărimilor determinate (x_i , h_i , P_i) se poate construi şi curba teoretica (conform relației 13) , care poate fi comparata cu cea obținută experimental. În acest scop se calculează din datele experimentale $\sigma = D(\xi)$, folosind relațiile (1) , (2) , (3) . Deoarece $M(\xi)= 0$ (valoarea cea mai probabila a lui x_i) , conform relației (3) , $D^2 (\xi) = M(\xi^{\,2})$, iar pe baza relațiilor (1) şi (14)

$$M(\xi^2) = \sum_{i=-n}^{n} P_i X_i^2 = \sum_{i=0}^{n} [X_i^2 \frac{h_i}{H} + (X_{-i})^2 \frac{h_{-i}}{H}] \qquad (15)$$

Ştiind ca $x_i= -x_{-i}$ sau $|x_i| = |x_{-i}|$, astfel se obține

$$\sigma = \sqrt{x_1^2 \frac{h_1 + h_{-1}}{H} + ... + x_n^2 \frac{h_n + h_{-n}}{H}} = \sqrt{\frac{1}{H}[x_1^2 (h_1 + h_{-1}) + ... + x_n^2 (h_n + h_{-n})]} \qquad (16)$$

şi va fi posibilă reprezentarea funcției $\varphi(x_i,\sigma)$.

Măsura în care distribuția moleculelor după componentele vitezei satisface distribuția Gauss mai poate fi verificata şi prin compararea probabilităților obținute experimental şi teoretic. Conform relației (6) (aplicată pentru valori discrete) probabilitatea (experimentală) ca toate particulele sa se afle între compartimentul i şi -i, adică sa se adune în compartimentele k= -i,-i+1,...-1,1,2,...i-1, i va fi

$$P_{exp}(x_i) = \sum_{k=-i}^{i} \frac{h_k}{H} \qquad (17)$$

Probabilitatea teoretica se găseşte cu relația (6) în care densitate a de probabilitate $\varphi(x_i, \sigma)$ este cea pe care o obținem folosind σ dat prin relația (16) . Astfel

$$P_{teor}(x_i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{(x_{-i})=-x_i}^{x_i} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = \frac{2}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_0^{x_i} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx \qquad (18)$$

daca i ia valorile 1,2,...,n. Folosind substituția $\frac{x}{\sigma} = u, \frac{x_i}{\sigma} = u_i$ se obține:

$$P_{teor}(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{n_i} e^{-\frac{u^2}{2}} du = 2.\text{erf}.u_i = 2\text{erf}(\frac{x_i}{\sigma}) \qquad (19)$$

Astfel se pot compara probabilitățile obținute prin relațiile (17) şi (19), iar eroarea absoluta $\left|P_{teor}^{(x_i)} - P_{exp}^{(x_i)}\right|$ poate determina măsura în care distribuția moleculelor după componentele vitezei este normala sau nu.

Metoda experimentală

În lucrarea de față se foloseşte o tabela Galton cu 18 compartimente (n= ±9) lățimea fiecăruia fiind de 2cm. Astfel $|x_1| = |x_{-1}| = 1\text{cm}$ şi x_i = (2i-1)cm(i=1,2,...,9). Boabele de muştar ("particulele")se introduc în tabela cu ajutorul pâlnii al cărui ax se potriveşte în aşa fel ca să coincidă cu axul tabelei. Se urmăreşte ca debitul jetului de boabe sa fie cat mai constant!

Golirea tabelei se face prin orificiul existent prin peretele din a tabelei. După împrăştierea boabelor, cu o rigla gradata se măsoară înălțimile h_i.

Experiența se repeta de cel puțin 5-6 ori, cu aceeaşi cantitate de boabe, iar pentru înălțimi se considera valorile medii h_i .

Prelucrarea datelor experimentale

Cu ajutorul mărimilor măsurate (x_i,h_i) se calculează $\langle h_i \rangle$si$H = \sum_{i=-n}^{n} \langle h_i \rangle$.

Folosind relația (16) se găseşte σ şi $u_i = \frac{x_i}{\sigma}$.

Evaluând valorile $e^{-\frac{u_i^2}{2}}$ (cu ajutorul Anexei I) se obține $\varphi(x_i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \bullet e^{-\frac{u_i^2}{2}}$

Utilizând relațiile (17) şi (19) se determină probabilitatea experimentală şi cea teoretică pentru cel puțin 4-5 valori ale lui i .

Eroarea absoluta $\left|P_{teor}(x_i) - P_{exp}(x_i)\right|$ se compară cu eroarea absolută maximă a probabilității experimentale ΔP_{exp} (x_i), care se calculează cu relația:

$$\Delta P_{exp}(x_i)_{max} = \frac{2\Delta h}{H}\left(i + \frac{n}{H \sum\limits_{k=-i}^{i} h_k}\right), \qquad (20)$$

Δh fiind precizia instrumentului de măsura cu care s-au determinat valorile h_k.

Datele se trec în tabelul următor:

i	x_i	$\langle h_i \rangle$	H	σ	erf u_i	$\exp(-u_i^2/2)$	ρ(x_i)	$P_{exp}(x_i)$	$P_{teor}(x_i)$	P_{teor}-P_{exp}	ΔP_{exp}
-	cm	cm	cm	cm	-	-	cm^{-1}	-	-	-	-

Anexa II. Tabel cu valorile funcţiei de eroare.

$$\operatorname{erf} u = \Phi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^u e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

u	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0,0	0,00000	0,00399	0,00798	0,01197	0,01595	0,01994	0,02392	0,02790	0,03188	0,03586
0,1	03983	04380	04776	05172	05567	05962	06349	06742	07142	07535
0,2	07926	08317	08706	09095	09483	09871	10257	10642	11026	11409
0,3	11791	12172	12552	12930	13307	13683	14058	14431	14803	15173
0,4	15542	15910	16276	16640	17003	17364	17724	18082	18439	18793
0,5	19146	19497	19847	20194	20540	20884	21226	21566	21904	22240
0,6	22575	22907	23237	23565	23891	24215	24537	24857	25175	25490
0,7	25804	26115	26424	26730	27055	27337	27637	27935	28230	28524
0,8	28814	29103	29389	29673	29955	30234	30511	30785	31057	31327
0,9	31594	31859	32121	32381	32639	32894	33147	33398	33646	33891
1,0	0,34134	0,34375	0,34614	0,34850	0,35083	0,35314	0,35543	0,35769	0,35993	0,36214
1,1	36433	36650	36684	37076	37286	37943	37698	37900	38100	38298
1,2	38493	38686	38877	39065	39251	39435	39617	39796	39973	40147
1,3	40321	40490	40158	40824	40988	41149	41309	41466	41631	41774
1,4	41924	42073	42220	42364	42507	42647	42786	42922	43056	43189
1,5	43319	43448	43574	43699	43822	43943	44062	44179	44295	44408
1,6	44520	44630	44738	44845	44950	45053	45154	45254	45352	45449
1,7	45543	45637	45728	45818	45907	45994	46080	46164	46246	46327
1,8	46407	46485	46562	46638	46712	46784	46856	46926	46995	47062
1,9	47128	47193	47257	47320	47381	47441	47500	47558	47615	47670
2,0	0,47725	0,47778	0,47831	0,47882	0,47932	0,47982	0,48030	0,48077	0,48124	0,48169
2,1	48214	48257	48300	48314	48382	48422	48461	48500	48537	48574
2,2	48610	48645	48679	48713	48745	48778	48809	48840	48870	48899
2,3	48928	48956	48983	49010	49036	49061	49086	49111	49134	49158
2,4	49180	49202	49224	49245	49266	49286	49305	49324	49343	49361
2,5	49379	49396	49413	49430	49446	49461	49477	49492	49506	49520
2,6	49534	49547	49560	49573	49585	49598	49609	49621	49632	49643
2,7	49653	49661	49674	49683	49693	49702	49711	49720	49728	49736
2,8	49744	49752	49760	49767	49774	49781	49788	49795	49801	49807
2,9	49813	49819	49825	49831	49836	49841	49846	49851	49856	49861