

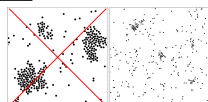
Výpočet kompresibilního faktoru plynu v NPT souboru

11/14
pch03

provedeme v periodických okrajových podmínkách. Za nízkého tlaku je vhodná MC simulace.

- Menu: **Boundary conditions** → **Periodic**
- V okénku cmd: nastavte teplotu na střední teplotu \bar{T} : $T=\bar{T}$ + **Enter**
- V okénku cmd: nastavte tlak na střední tlak \bar{p} : $P=\bar{p}$ + **Enter**
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NVT (Metropolis)**
- Slider " ρ " (rho) na nejmenší hodnotu (řídký plyn); zůstává-li velká kapka, nastavte v cmd: $\rho=0.001$ + **Enter**
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NPT (Metropolis)**. Kapky musí zmizet!
- Menu: **Show** → **Volume convergence profile** a **reset view** (vpravo dole)
- Lze trochu zkrátit slider "measurement block"
- Nechte ustábit, **zkontrolujte, zda vidíte stále plyn**, a vypněte **set MC move**
- Stiskněte **record** a simulujte 10–20 bloků
- Uložte výsledky pomocí **record**
- V posledním bloku dat v **simolant.txt** najděte hodnotu Z
- Také najděte entalpii H – bude potřeba k výpočtu později jako $H(g)$

V produkčním MC běhu musí být velikosti pohybů konstantní

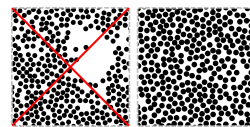


Výparná entalpie z NPT simulací

[start simolant/RESULTS.txt] 13/14
pch03

Opakujte postup ze slajdu 11 pro kapalinu. Periodické okrajové podmínky, teplotu a tlak již máte nastaveny. Pokračujte tedy takto:

- Stiskněte **set MC move**
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NVT (Metropolis)**
- Slider " ρ " posuňte nahoru tak, abyste dostali kapalinu **bez dutin** a tlak fluktuující okolo \bar{p} →
- Menu: **Method** → **Monte Carlo NPT (Metropolis)**
- Nechte ustábit a vypněte **set MC move**
- Stiskněte **record** a simulujte aspoň 10 bloků
- Uložte výsledky pomocí **record**
- Najděte entalpii H kapaliny
- Vypočtěte výparnou enthalpii: $\Delta_{\text{vap}}H_{\text{at}} = \frac{H(g) - H(l)}{N}$
- Vypočtěte standardní chybu výparné entalpie



V produkčním MC běhu musí být velikosti pohybů konstantní

Výpočet výparné entalpie z tlaků nasycených par

12/14
pch03

- Ze získaných hodnot vypočtete (používáme $k_B = 1$)
$$\Delta_{\text{vap}}H_{\text{at}} = -Z \frac{\ln(p_1/p_2)}{1/T_1 - 1/T_2}$$
- Nezapomeňte spočítat statistickou chybu výsledku! Ve výsledcích jsou uvedeny odhady standardních chyb¹ stanovené z bloků dat. Stačí uvažovat chyby v p_1 a p_2 , protože chyby v teplotách a Z jsou relativně malé:
$$\sigma(\Delta_{\text{vap}}H_{\text{at}}) = Z \frac{\sqrt{\sigma_{\text{rel}}(p_1)^2 + \sigma_{\text{rel}}(p_2)^2}}{|1/T_1 - 1/T_2|}$$
kde $\sigma_{\text{rel}}(p_i)$ jsou **relativní** chyby, v souboru **simolant.txt** jsou uvedeny v %

¹Standardní chyba = směrodatná odchylka průměru způsobená náhodnými vlivy. Celková nejistota výsledku zahrnuje kritické posouzení náhodných i systematických chyb.

Výsledky a diskuse

14/14
pch03

- Napište oba výsledky pro výparnou entalpii:
 - z Clausiovy–Clapeyronovy rovnice
 - z rozdílu entalpií plynu a kapaliny
- Souhlasí obě hodnoty na hladině spolehlivosti 95%? Abyste toto posoudili:
 - Vypočtěte rozdíl obou hodnot,
 - vypočtěte standardní chybu tohoto rozdílu,
 - vypočtěte interval spolehlivosti na hladině 95%.
- Která metoda stanovení výparné entalpie je přesnější?
- Která metoda je více zatížena systematickými chybami?
- Jaká metoda se nejčastěji používá v reálném experimentu pro stanovení výparné entalpie?
- Chcete-li zkontrolovat výpočty, pošlete mi **vyplněný protokol** a soubor **simolant.txt** e-mailem.