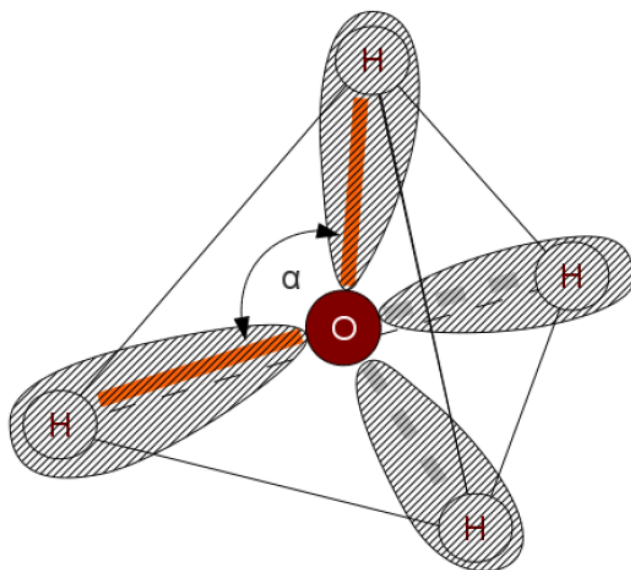


O topljenju leda

Akoš Kemiveš, Arpad Takači



Sadržaj

1	Uvod u strukturu materije	4
1.1	Istorija čestice	4
2	Osnovne strukture	5
2.1	Rutherfordov model atoma	5
2.2	Kvantna teorija zračenja	5
2.3	Bohrov atomski model	6
2.4	Kvantno mehanički atomski model	7
3	Osnovne osobine	8
3.1	Elektronska konfiguracija	8
3.2	Hemijska veza	10
3.3	Hibridizacija atomskih orbitala	10
4	Struktura vode	12
5	Struktura leda	12
6	Topljenje leda	13
6.1	Proces topljenja	13
6.2	Brzina topljenja	14
7	Simulacija	15
7.1	Simulacija pomoću alata AnyLogic	15
7.2	Simulacija topljenja	15

Tema ovog rada je voda i specifičnost njenog ponašanja na različitim temperaturama. U sledećem odeljku upoznavamo sa osnovnim pojmovima kvantne teorije i fizičke hemije. Potom objasnimo kako neke ekstremno "sitne" osobine utiču na postajanje života na ovoj planeti. Činjenica je da anomalija vode je veoma važna za život svih vodenih stvorenja. U poslednjem odeljku preko jedne simulacije pokazaćemo kako se odigrava proces topljenja na različitim figurama.

1 Uvod u strukturu materije

1.1 Istorija čestice

Savremeno shvatanje strukture materije izgrađeno je na eksperimentalnim otkrićima, hipotezama i teorijskim postavkama koje su rezultate poslednjih dva stoleća. Naravno, sama ideja o deljivosti materije na diskretne, nedeljive čestice je znatno starija i pojavljuje se prvo u filozofskim tekstovima koje su nastale pre naše ere. Ne ulazeći u detalje tih otkrića, koje čine osnovu savremene fizike i hemije, rezimiraćemo neke karakteristike koje su doprinete prilikom formiranja osnovne ideje o strukturama:

- korpuskularna priroda materije
- neposredna veza između materije i elektriciteta
- periodična ponavljanja strukture i osobine materije
- kvantne uslove razmene energije
- dualna - korpuskularna i talasna priroda materije i energije

U prvo vreme smatralo se da atom je najmanja nedeljiva čestica i da elementi se sastoje od pojedinačnih *atoma elementata*. Na primer, atom vode je zamišljen kao *HO*. Međutim eksperimentalna ispitivanja o težinskim odnosima je ukazala da su ti pretpostavci bili pogrešni, naravno u to vreme atom je bio nevidljiv i o njegovoj strukturi se nije znalo ništa.

Na značajnu vezu koja postoji između atomskih težina i osobina elemenata ukazao je *periodični sistem elemenata*, koji su, nezavisno jedan od drugoga otkrili *Mendeljev* (1869) u Rusiji i *Lothar Mayer* (1870) u Nemačkoj. Oni su ređali do tada poznate elemente po atomskim težinama, i upoređujući njihove fizičke i hemijske osobine.

Reihen	Gruppe I. — R ⁰	Gruppe II. — R ⁰	Gruppe III. — R ⁰	Gruppe IV. RH ⁴ R ⁰	Gruppe V. RH ³ R ⁰	Gruppe VI. RH ² R ⁰	Gruppe VII. RH R ⁰	Gruppe VIII. — R ⁰
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=63)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	So=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pd=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Tu=125	J=127	
8	Cu=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140	—	—	—	—
9	(—)	—	—	—	—	—	—	—
10	—	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	—
12	—	—	—	Th=231	—	U=240	—	—

Slika 1: Prvi periodični sistem Mendeljeva iz 1869

Sistematizacijom elemenata po atomskoj težini i po osobinama dobili su sistem na slici 1, u kome su se pored već poznatih elemenata nalazila nepopunjena mesta u to vreme još neotkrivenih elemenata.

Kao prvi periodični sistem, imao je izvesne nedostatke. Ali značajnost te strukture je ostao nepromenjen. Sistematizovanje elementata po atomskoj težini i po fizičkim i hemijskim osobinama omogućilo je utvrđivanje spornih atomskih težina, otkriće novih elemenata i otkrivanje značajne veze između strukture atoma i fizičkih i hemijskih osobina elemenata.

2 Osnovne strukture

2.1 Rutherfordov model atoma

Na osnovu do tada poznatih otkrića, *Rutherford* (1920) je prikazao model atoma, koji je sagrađen slično planetarnom sistemu. Njegov model atoma bio je u saglasnosti sa tada poznatim eksperimentalnim činjenicama, i značio je znatan korak unapred u poznavanju strukture materije. Postojanje elektronskog omotača sastavljenog od elektrona koji kruže oko jezgra objasnilo je poreklo magnetnih i električnih osobina atoma. Detaljnija ispitivanja su pokazala da je elektronski omotač nosilac niza hemijskih i fizičkih osobina atoma.

U ovom modelu *elektroni kruže oko jezgra, pri čemu elektrostatička privlačna sila između jezgra i elektrona treba da bude u ravnoteži sa centrifugalnom silom elektrona.*

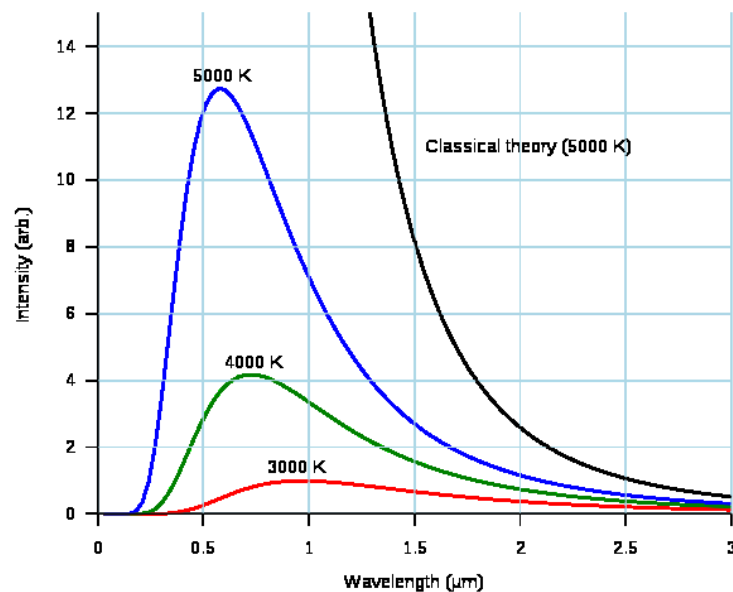
Međutim Rutherfordov model je imao i ozbiljne nedostatke. Pre svega, u ovom modelu elektroni mogu da zauzimaju bilo koji položaj izvan jezgra, što znači da njihova energija može imati različite vrednosti.

2.2 Kvantna teorija zračenja

Osnovne karakteristike zračenja su brzina prostiranja c , talasna dužina λ i frekvencija ν .

Vrsta zračenja	$\nu(cm)$
Rentgenski zraci	1×10^{-8}
Ultra ljubičasta svetlost	2×10^{-5}
Vidljiva svetlost	5×10^{-5}
Infra crvena svetlost	1×10^{-3}
Radar	1
Radio	3×10^5

Osnovni zakoni zračenja otkriveni su ispitivanjem toplotnog zračenja crnog tela. Crno telo se predstavlja šupljinom, čiji se crni zidovi i unutrašnjost nalaze na istoj temperaturi.



Slika 2: Raspodela energije u zračenju crnog tela

Crno telo emituje zračenje različitih talasnih dužina. Raspored ukupne energije koju crno telo emituje po talasnim dužinama je neuniformna i menja se, kao što je pokazano na slici 2 u zavisnosti od temperature. Za svaku temperaturu postoji karakteristična talasna dužina kojoj pripada maksimum zračenje energije. Sa povišavanjem temperature ovaj maksimum se pomera ka manjim talasnim dužinama i sve je izrazitiji. Ovakav način raspodele energije zračenja nije mogao biti objašnjen klasičnim teorijama radiacije.

Objasnio ga je *Max Planck* (1900), koji je utvrdio da crno telo ne zrači energiju kontinualno nego u određenim iznosima, tzv. *kvantima*, definisanim proizvodom frekvence zračenja i jedne konstante:

$$E = h\nu. \quad (1)$$

Konstanta h je *Planckova konstanta*, a njena vrednost je $h = 6,6256 \cdot 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{sec}$. Energija koja se emituje data je proizvodom frekvence vibracije ν i kvantna dejstva h , ili je ceo umnožak ove vrednosti:

$$E_n = nh\nu. \quad (2)$$

Planckova teorija o kvantnoj prirodi zračenja crnog tela dobila je (1905) potvrdu kada je Albert Einstein (1879) objavio opšti uslov, po kome zračna energija može biti absorbovana ili emitovana samo u kvantima, čija je veličina data sa (1) ili (2).

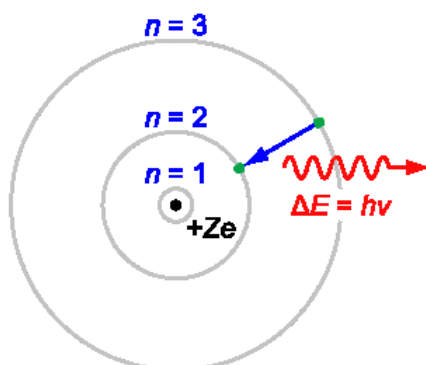
2.3 Bohrov atomski model

Povezujući ranije predstave o atomu, sastavljenom od pozitivnog jezgra oko koga kruže elektroni, sa saznanjem o kvantnoj prirodi absorpcije i emisije energije, *Niels Bohr* (1913) dao savršeniji model atoma.

Bohr je pošao od tri osnovna uslova o kretanju elektrona:

1. elektron koji kruži oko jezgra ne može se kretati po proizvoljnim putanjama
2. kada se elektron kreće po dopuštenoj putanji, čiji je obrtni impuls jednak celom umnošku kvantna dejstva on se nalazi u stacionarnom stanju, niti gubi, niti dobija energiju.
3. do promene energije elektrona može da dođe pri prelazu sa jedne stabilne putanje na drugu. Ovaj prelaz praćen je absorpcijom ili emisijom zračenja, čija je frekvencija određena razlikom energetske nivoa:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu.$$



Slika 3: Rutherford-Bohr model vodonika i moment emitovanja energije prilikom prelaza sa jedne stabilne putanje na drugu.

Poluprečnik prve orbite Bohrovog modela za atom vodonika je

$$R = 0,52917 * 10^{-8} \text{ cm.} \quad (3)$$

Ovaj rezultat dobiće značaj prilikom razmatranja atoma sa kvantno mehaničkog gledišta.

2.4 Kvantno mehanički atomski model

Werner Heisenberg je pokazao da je nemoguće istovremeno meriti položaj i impuls elektrona. Da bi se pomoću nekog zamišljenog mikroskopa tačno odredio položaj jednog elektrona u atomu trebalo bi upotrebiti svetlost čija je talasna dužina kraća od dimenzija putanje elektrona, znači manje od 10^{-8} cm . U tu svrhu moglo bi da posluži rentgensko zračenje, ali kvantni dejstva (ν) rentgenskog zračenja su tako veliki da moraju izmeniti impuls elektrona. Da bi impuls ostao nepromenjen trebalo bi primeniti veoma meko zračenje. Ali njegova talasna dužina bi bila reda veličine 10^{-3} cm , dakle suviše velika za utvrđivanje tačnog mesta elektrona.

Heisenberg u 1927 je formulisao Princip neodređenosti, koji glasi:

Nemoguće je istovremeno odrediti impuls (p) i položaj (q) jedne čestice.

Proizvod grešaka koje se čine pri određivanju impulsa (Δp) i položaja (Δq) ima najmanje vrednost kvantna delovanja:

$$\Delta p \Delta q \geq h.$$

Ne ulazeći u detalje kvantno, talasne-mehaničke interpretacije strukture materije, umesto *Schrödingerove* jednačine:

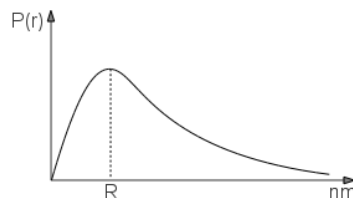
$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \Psi = 0 \quad (4)$$

objasnićemo princip kroz primera vodonika, posmatranjem pojednostavljenu formu jednačine (4):

$$\Delta x m \Delta v \geq h \quad (5)$$

gde h je Planckova konstanta, sa Δx smo obeležili prostor koji je potrebno za kretanje talasa u sve tri dimenzije, u jednačinu (4) označen sa ∇^2 , m označava masu delića analogno i Δv se odnosi na kinetičku energiju čestice - polazeći od toga da je ukupna energija čestice jednaka zbiru kinetičke i potencijalne energije, $E = E_k + E_p$ i da je $E_k = \frac{mv^2}{2}$ - dolazimo do nejednakosti (5).

Atom vodonika sadrži jedan neutron, jedan proton i jedan elektron. Masa elektrona je mala odakle sledi da on kreće brže i oduzima veći prostor prilikom kretanja oko jezgra. Proton ima veću masu zbog toga on oduzima manji prostor za kretanje oko jezgra. Tako dolazimo do kvantno-mehaničkog atomskog modela gde suprotno sa Bohrovom, konstatno, unapred zadato orbitom imamo prostor verovatnoće $P(r)$ pojave elektrona, tzv. elektronska oblaka. Možemo primetiti da ta verovatnoća zavisi od udaljenosti elektrona od atomskog jezgra - ili ekvivalentno, od rastojanja prve orbite -, koja je prikazana na sledećoj grafici:



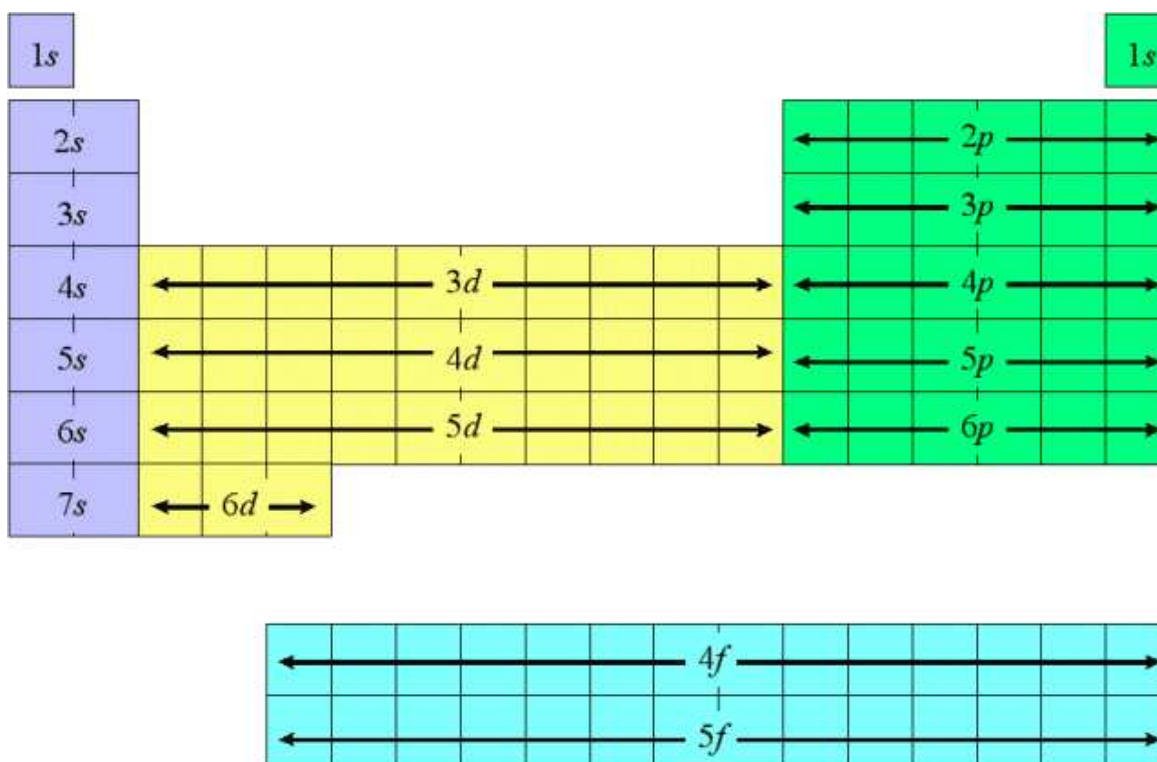
Slika 4: Verovatnoća nalaženja elektrona u zavisnosti od veličine poluprečnika orbite u vodoniku

Vidimo da verovatnoća pojavljivanja elektrona prvo povećava i kada postiže svoj maksimum počinje da se opada, i kako udaljimo od jezgra uzima sve manje i manje vrednosti. Interesantno da je rastojanje poluprečnika u tački gde verovatnoća pojavljivanja elektrona postiže svoj maksimum je jednaka sa rastojanjem prve orbite vodonika u Bohrovom atomskom modelu, takođe i energija elektrona na ovoj orbiti je jednaka sa energijom elektrona na prvoj orbiti u Bohrovom atomskom modelu (3).

3 Osnovne osobine

3.1 Elektronska konfiguracija

Elektronska konfiguracija elementa je raspored elektrona koji pripadaju atomu datog elementa na njegovim elektronskim orbitalama. Svi elementi u periodnom sistemu mogu se grupisati prema osobinama koje protiču iz njihove elektronske konfiguracije. Elektronsku konfiguraciju pojedinačnih elemenata možemo pročitati iz sledeće tabele:


















































Slika 5: Tabela elektronske konfiguracije

Na primer kiseonik se nalazi u četvrtoj koloni grupe $2p$. On takođe sadrži i jednostavnije konfiguracije sa manjim brojem elektrona koje nalaze pored njega. Prema tome elektronska konfiguracija kiseonika je $1s^2 2s^2 2p^4$. Brojevi koji se javljaju ispred slova označavaju energetske podnivoje. Numerizacija počinje od orbite najbliže jezgru i raste sa udaljavanjem od njega. Mala slova s, p, d i f označavaju vrste orbitala, a gornji brojevi indeksi označavaju broj elektrona koji se nalaze na datoj orbitali. Pored energetske podnivoje postoje i osnovne energetske nivoe. Oni se označavaju pomoću slova K, L, M, N ili sa celim brojevima počev od 0 respektivno. Odnos osnovnih energetskih i energetskih podnivoja je dat u sledećoj tabeli:

Ljuska	Podljuska	Moguće vrednosti
K	s	0
L	s	0
	p	-1, 0, 1
M	s	0
	p	-1, 0, 1
	d	-2, -1, 0, 1, 2
N	s	0
	p	-1, 0, 1
	d	-2, -1, 0, 1, 2
	f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3

Verovatnoća nalaženja elektrona u atomu vodonika u zavisnosti od osnovnih energetske i energetske podnivoa:

s	p	d	
			1
			2
			3

	s (l=0)	p (l=1)			d (l=2)				f (l=3)							
	m=0	m=0	m=±1		m=0	m=±1		m=±2	m=0	m=±1		m=±2		m=±3		
	s	p _z	p _x	p _y	d _{z²}	d _{xz}	d _{yz}	d _{xy}	d _{x²-y²}	f _{z³}	f _{xz²}	f _{yz²}	f _{xyz}	f _{z(x²-y²)}	f _{x(x²-3y²)}	f _{y(3x²-y²)}
n=1	•															
n=2	•															
n=3	•															
n=4																
n=5									
n=6				
n=7	

Slika 6: Tabela mogućih elektronskih konfiguracija orbitala

3.2 Hemijska veza

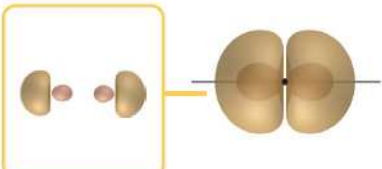

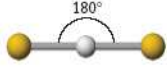
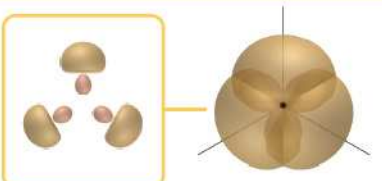
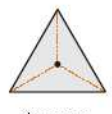
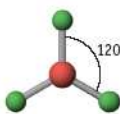
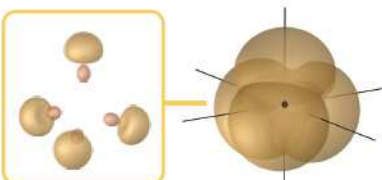


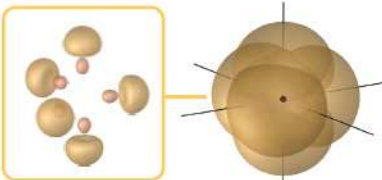

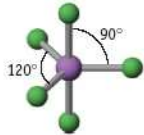
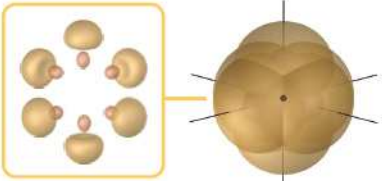

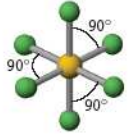
Hemijskom vezom naziva se veza koja se uspostavlja između atoma uz učesće njihovih perifernih elektrona. Od broja i načina na koji se elektroni raspoređuju među atomima koje vezuju zavisne vrste veze, kao i hemijske osobine i prostorna gradnja nastalih molekula.

Prema načinu raspodele elektrona razlikuju se tri osnovna tipa hemijske veze: *jonska*, *kovalentna* i *metalna*. U jonskoj vezi jedan ili više valentnih elektrona jednog atoma potpuno se prenose na drugi atom koji učestvuje u vezi. Gustina elektronskog oblaka između ova dva atoma je vrlo mala. U kovalentnoj vezi valentni elektroni atoma koji učestvuju u vezi zajednički su za oba atoma, a gustina elektronskog oblaka među atomima najveća. U metalnoj vezi valentni elektroni atoma raspoređeni su po celom kristalu, delokalizovani, tako da grade jedan zajednički elektronski oblak koji obuhvata sve vezane atome.

3.3 Hibridizacija atomskih orbitala

Prema *Paulingu* i *Slateru*, u izvesnim slučajevima događa se da se atomske orbitale izmešaju, dođe do preraspodele njihovih energija i do stvaranja novih, hibridnih, međusobno identičnih orbitala. U zavisnosti od broja i vrste orbitala koje podležu hibridizaciji, mogu se razlikovati različiti oblici hibridizacije kao što su sp^3 , sp^2 i sp hibridizacija.

U sledećoj tabeli su date moguće prostorne orijentacije hibridizovane orbitale.

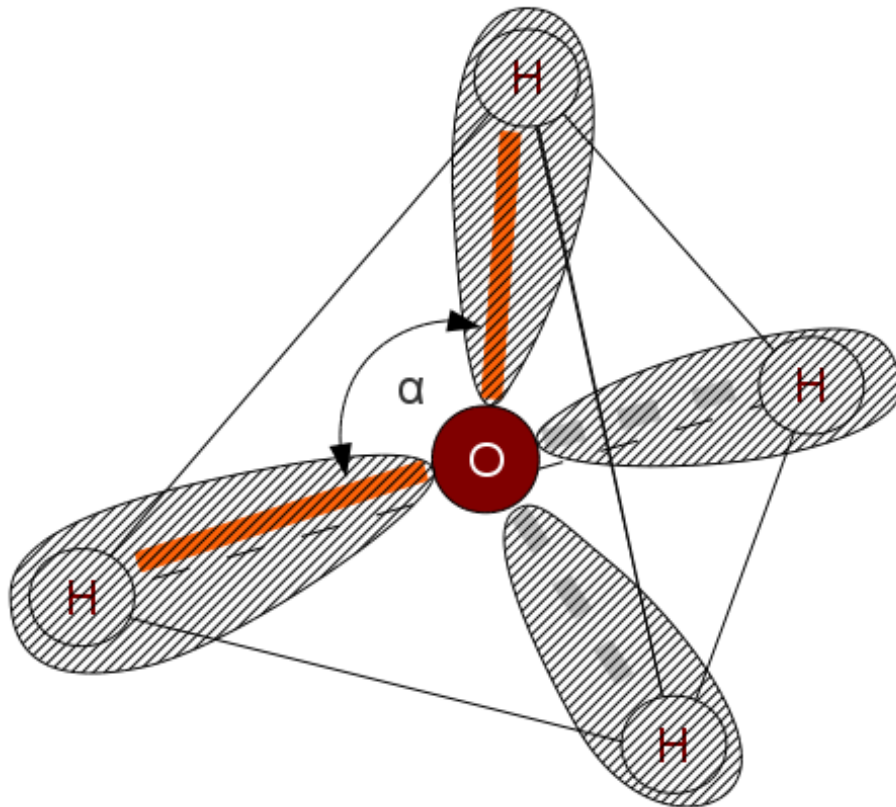
	raspored hibridne orbitale	geometrijska figura	primer
sp		 pravolinijski	 180° <chem>BeCl2</chem>
sp^2		 trougao	 120° <chem>BF3</chem>
sp^3		 tetraedar	 109.5° <chem>CH4</chem>
sp^3d		 heksaedar - bipiramid	 90° 120° <chem>PF5</chem>
sp^3d^2		 oktaedar	 90° 90° <chem>SF6</chem>

Slika 7: Interpretacija prostornih položaja orbitala prilikom hibridizacije

Različite vrste hibridizacije daju različite uglove između atome neke molekule. Te karakteristične uglove određuju konačan oblik zadate molekule.

4 Struktura vode

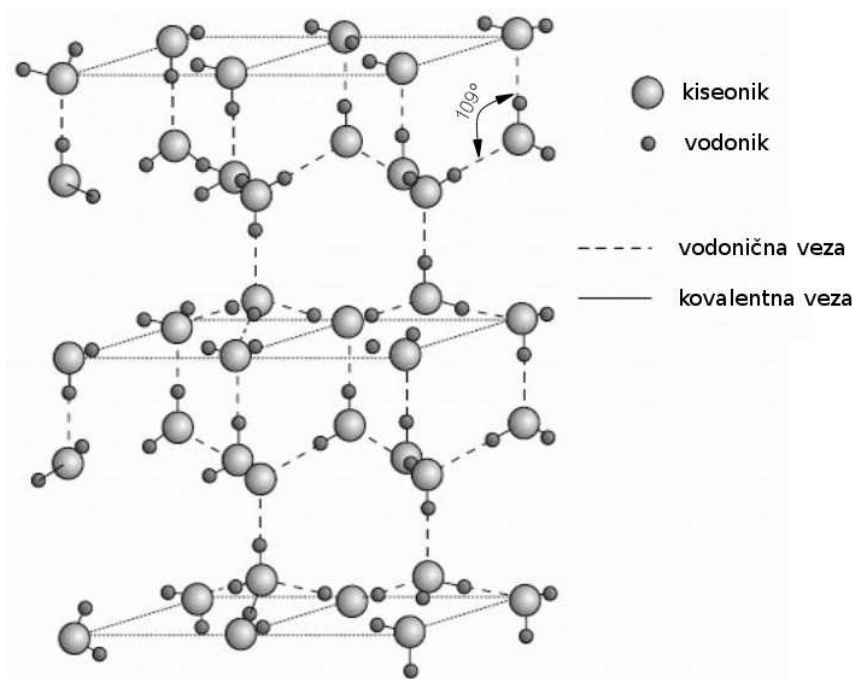
Molekul vode sastavljen je od jednog atoma kiseonika čiji su valentni elektroni u L ljusci, $2s^2 2p^4$, i dva atoma vodonika čije valentne elektrone možemo obeležiti sa $1s_a$ i $1s_b$. Prema tome u ovom molekulu ima ukupno 8 valentnih elektrona, odnosno 4 elektronska para. Metodom valentne veze došlo je do zaključka da su ova 4 elektronska para smeštena u četiri sp^3 hibridne orbitale kisonika; dve orbitale su vezivne i grade vezu sa dva atoma vodonika, a dve su nevezivne i u svakoj je smešten po jedan nepodeljen elektronski par kisonika. Na slici 7 je prikazana molekulska orbitala sp^3 koja gradi tetraedarsku strukturu. Na dva susedna vrha tetraedera nalaze se atomi vodonika, dok druga dva vrh zaposeđuje nepodeljene elektronske parove kisonika. Ugao između veza O-H koji u tetraedarskoj strukturi treba da iznosi $109,5^\circ$ smanjuje se na 105° , koliko je utvrđeno u molekulu vode.



Slika 8: Posebna tetraedarska struktura molekula vode za $\alpha = 105^\circ$, umesto standardnog $\alpha = 109,5^\circ$

5 Struktura leda

Svaki molekul vode povezan je sa 4 druga molekula što formira tetraedarsku prostornu strukturu. Razmak između atoma kiseonika u ledu je $0.276nm$, a između je vodonikov atom. Razmak između O i H (to su oni koji su kovalentnom vezom povezani za kiseonik) je $0.96nm$, što znači da H atom nije tačno na polovini rastojanja O-O veze. Druga dva vodonikova atoma su na udaljenosti od $0.180nm$, i oni pripadaju dvema susednim molekulima vode. Ugao O-O-O veze je oko 109° . Na osnovu opisanih podataka možemo konstruisati strukturu leda:



Slika 9: Struktura leda u prostoru

6 Topljenje leda

6.1 Proces topljenja

Tetraedri se kombinuju poput saća formirajući heksagonalnu strukturu leda. Kada se led topi ova se struktura narušava, ali ne u potpunosti. Time se povećava gustina vode. Ako se temperatura dalje povećava dolazi do daljeg narušavanja tetraedarske strukture i gustina vode se dalje povećava. Istovremeno sa ovim efektom javlja se i suprotan efekat. Povećavanjem temperature povećava se i kinetička energija molekula. Dolazi do kidanja pojedinih vodonikovih veza pa se oslobođeni molekuli vode udaljavaju jedni od drugih, čime se smanjuje gustina vode. Ovaj efekat preovlađuje pri temperaturama većim od 3.98°C . Zbog toga voda ima najveću gustinu oko ove temperature.

Ranije smo već naveli da je ugao između svake H-O-H molekule iznosi 105° u vodi. Iz strukture vode znamo da dva vodoničkog atoma povezani su sa kiseonikom pomoću vodonične veze. Na osnovu slike 9 može da se pretpostavi da ugao u ledu koji zatvara H-O-H veza je ekvivalentno sa uglom O-O-O veze. Odavde može se zaključiti da α ugao u strukturu vode (videti sliku 8) je ekvivalentno sa O-O-O vezom u strukturi leda, dakle ugao α od 109° smanjuje se na 105° . Ovaj fenomen odigrava se na temperaturi između 0° i 3.98° . Za objašnjenje povećavanja gustine može se krenuti iz:

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (6)$$

koja je najobičnija formula gustine, gde m označava masu na datoj površini, ili u našem slučaju zapremini V . Zamislimo na trenutak da u prostoru imamo neku količinu molekule leda, i počinjemo polako da povećavamo temperaturu leda. Dva efekata se dešavaju paralelno, sa jedne strane kao što smo već naveli, ugao O-O-O veze prilikom povećavanja temperature se smanjuje, s druge strane povećavanje temperature dovodi do povećavanje kinetičke energije molekule, posledica toga da na većim temperaturama kinetička energija je dovoljno velika za pokidanje hemijske veze, naravno ako se to desi molekule se razdvajaju. Za bolje shvatanje paralelnog procesa posmatraju se različiti momenti topljenja. Pretpostavi se da je temperatura sistema 1°C . Ugao O-O-O veze je već manji od 109° , ali kinetička energija još nije dovoljno velika da pokida te vodonične veze. Pošto O-O-O uglovi su se smanjivali, na zadatoj zapremini možemo imati veći broj molekule leda, dakle u (6) povećava se m , V ostaje konstantno, pa ρ se takođe povećava. Neka je sada temperatura sistema 3.98°C . O-O-O uglovi su se smanjivali na nešto veće od 105° , analogno sa slučajom pod 1°C masa m se dalje povećavala dok zapremina V je ostala ne-

promenjena, vodonične veze su i dalje neoštećene. U trenutku kada temperatura prekorači 3.98°C uglovi postaju 105° i bilo bi logično da gustina leda u ovom trenutku bude veća nego na temperaturi 3.98°C , ali to nije slučaj. Prilikom prekoračenja ove granice paralelan efekat, povećavanja kinetičke energije, je u takvoj meri povećavala da bila je dovoljna za raskidanje vodoničnih veza, i pored daljeg povećavanja mase m (posmatranog sistema) pošto molekuli leda su razdaljali jedan od drugoga, povećavala i zapremina V (posmatranog sistema) što je prouzrokovao smanjenje gustine ρ .

6.2 Brzina topljenja

Poznavanjem procesa topljenja na molekulskom nivou je jeste deo topljenja, ali kada posmatramo led u prirodnoj sredini prvi stvar koji vidimo jeste to kako se ta količina leda topi. Mogli bi smo pretpostaviti da led na nekoj površini topi se sa jednakom brzinom. Naravno za proveravanje pretpostavke moramo konstruisati i rešiti model topljenja pomoću diferencijalne jednačine.

Znamo kako možemo odrediti zapreminu proizvoljne prostorne figure. Zbog jednostavnosti modela posmatraćemo pravilne prostorne figure, znajući da proces konstruisanja i rešavanja modela za proizvoljne figure je analogan.

Propozicija 6.1 *Prepostavimo da mera topljenja je proporcionalna u odnosu na površinu date figure:*

$$\frac{dV}{dt} = -kS \quad (7)$$

gde k je koeficijent proporcionalnosti izražen kao brzina topljenja date figure.

Sa V i S smo označavali redom zapreminu i obim tela. Očigledno da su obe opadajuće funkcije po vremenu t . U (7) imamo dve nepoznate funkcije V i S , dakle moramo dalje precizirati naš model. U ovom trenutku dolazi u obzir koju figuru posmatramo.

Recimo da posmatrana količina leda je sfernog oblika, za sferu koji ima poluprečnik r . Sada iz osnovne geometrije zapremina datog leda je:

$$V = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad (8)$$

i sa

$$S = 4\pi r^2 \quad (9)$$

data je površina. Uvrstavanjem (8) i (9) u (7) dobijamo jednačinu:

$$\frac{d(\frac{4}{3}\pi r^3)}{dt} = -k(4\pi r^2)$$

koja je jednaka sa

$$\frac{d(\frac{4}{3}\pi r^3)}{dr} \frac{dr}{dt} = -k(4\pi r^2)$$

koja posle izvršenja izvoda postaje:

$$4\pi r^2 \frac{dr}{dt} = -k(4\pi r^2)$$

posle skraćivanja

$$\frac{dr}{dt} = -k$$

dobili smo diferencijalnu jednačinu koja razdvaja promenljive. Rešavanjem dobijamo

$$\int dr = -k \int dt$$

$$r = -kt \quad (10)$$

odakle vidimo da r je linearna funkcija po t sa nagibom k . Za početni vrednost ove diferencijalne jednačine možemo uzeti poluprečnik sfere r_0 . Topljenje leda se završava kada poluprečnik sfere postaje nula. Dakle ako $r(t) = 0$, odakle iz

$$r(t) = r_0 - kt$$

dobijamo

$$t_s = \frac{r_0}{k} \quad (11)$$

za leda sfernog oblika. Interesantno da je ova brzina je jednaka sa topljenjem leda polusfernog oblika, gde sa uvrstavanjem $S = 2\pi r^2$ i $V = \frac{2}{3}\pi r^3$ u (7) i posle sređivanja dobijamo identičnu jednačinu sa (10).

Sličnom postupkom možemo dolaziti do potrebnog vremena topljenja neke druge figure, recimo kocke. Uzimajući za $V = a^3$ i za $S = 6a^2$ dobijamo diferencijalnu jednačinu:

$$\frac{d(a^3)}{da} \frac{da}{dt} = -k(6a^2)$$

koja posle rešavanja ima sledeći oblik

$$t_k = \frac{r_0}{2k} \quad (12)$$

odatle možemo videti da pošto $t_k < t_s$, kocka topi se brže od sfere.

7 Simulacija

Simulacija je skup metoda i alata pomoću kojih možemo imitirati ponašanje nekog sistema ili podsistema iz realnog sveta. Simulacija obuhvata i proces izgradnje modela datog sistema. U slučaju kada se te simulacije realizovane pomoću računara pričamo o računarskom modeliranju i simulaciji. Razlozi za primenu modeliranja i simulacije su jasni: nad realnom sistemom izvođenje neke simulacije može da bude skup, nemoguć ili opasan, može da se desi da u nekom momentu moramo zaustaviti eksperiment, pošto vidimo da dovodiće nas do pogrešne rezultate, moguće je da sistem za koju kreiramo model uopšte ne postoji u našoj okolini. Naravno postoji još mnogo razloga pored korišćenja modeliranja i simulacije. Ako model opisuje realan sistem na prihvatljiv način, eksperimentisanje sa modelom daje rezultate koji su primenljivi na realnom sistemu, ali uvek moramo uzimati u obzir da model je skup aproksimacija i strukturnih i kvantitativnih pretpostavki o tome kako se sistem ponaša, dakle model ne može da garantuje analogno ponašanje sistema pod datim uslovima u realnom svetu.

7.1 Simulacija pomoću alata AnyLogic

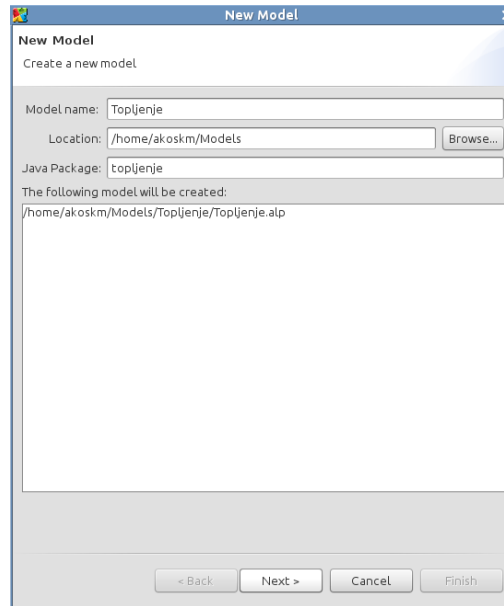
Postoji mnogo programskih jezika koji su predviđeni za kreiranje simulacije. Izbor odgovarajućeg simulacionog jezika često se zavisi od sistema koji simuliramo. *AnyLogic 6* zasovan na najnovijim saznanjima iz ovih oblasti, a razvijen je pomoću savremenih metoda informacione tehnologije i programiranja. Modeli se kreiraju vizuelno. *Aktivni objekti* čine glavni deo simulacije, oni predstavljaju objekte realnog sistema. Klase ovih objekata su identične klasama u Java jeziku odatle sledi da osobine objekata Java kao što su nasleđivanje, polimorfizam, interfejsi su prenete na aktivne klase. U sledećoj glavi pokazaćemo kako se gradi simulacija pomoću alata AnyLogic.

7.2 Simulacija topljenja

Za prikazivanje topljenja koristićemo kontinualan model. Karakteristika kontinualnog modela je da stanje sistema menja kontinualno u vremenu. Kreiramo novi prazan model sa proizvoljnom imenom i postojećim putanjem.

Prilikom konstruisanja modela koristićemo jednačine koje smo dobili u propoziciji 6.1. Iz prethodnog odeljka smo saznali da aktivni objekti su osnovi svake AnyLogic simulacije pošto oni reprezentuju realne objekte koje su učesnici posmatranog sistema. Aktivan objekat topljenja biće sama simulacija. Unutar aktivnog objekta možemo imati više elementa koje opisuju ponašanje datog modela.

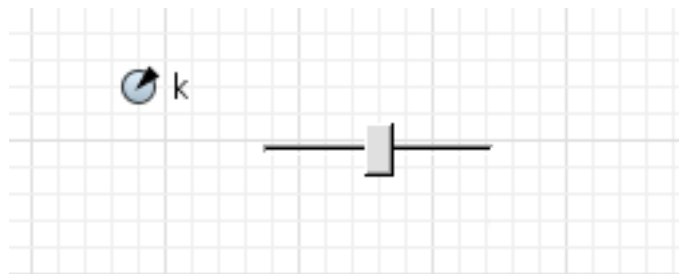
U našem modelu promenljive reprezentuju kocku i sferu. Karakteristika promenljive je da ona omogućava definisanje diferencijalne jednačine i podrazumevano je da ova diferencijalna jednačina menja se po vremenu dt . Koefficient $-k$ iz (7) će biti reprezentovan sa tipom parametra. Nakon toga što smo kreirali novi model možemo



Slika 10: Prozor za kreiranje novog modela

početi sastavljanje simulacije od gore opisanih elemenata.

Najpre kreiraćemo parametar k koji služiće za definisanje mere brzine topljenja. On je tipa double i za početni vrednost zadajemo jedan proizvoljan broj. Da bismo dobili što dinamičnu simulaciju za podrazumevan vrednost zadajemo nulu i pomoću jednog slajdera omogućavamo modifikovanje ovog parametra. Objekat slajder nalazi se u grupi *Controls* a parametar je u grupi *System Dynamics*. Potrebno je podesiti minimalne i maksimalne vrednosti

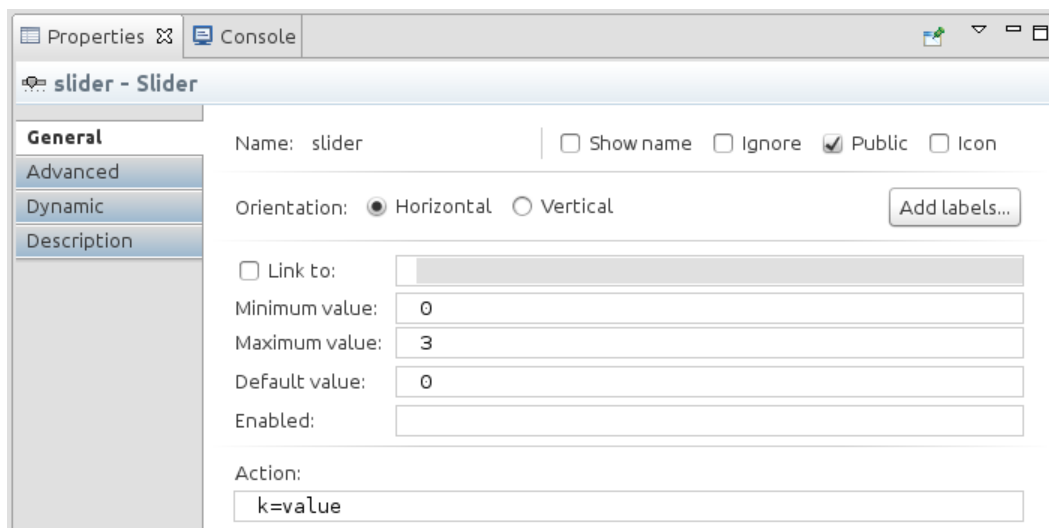


Slika 11: Parametar k i slajder

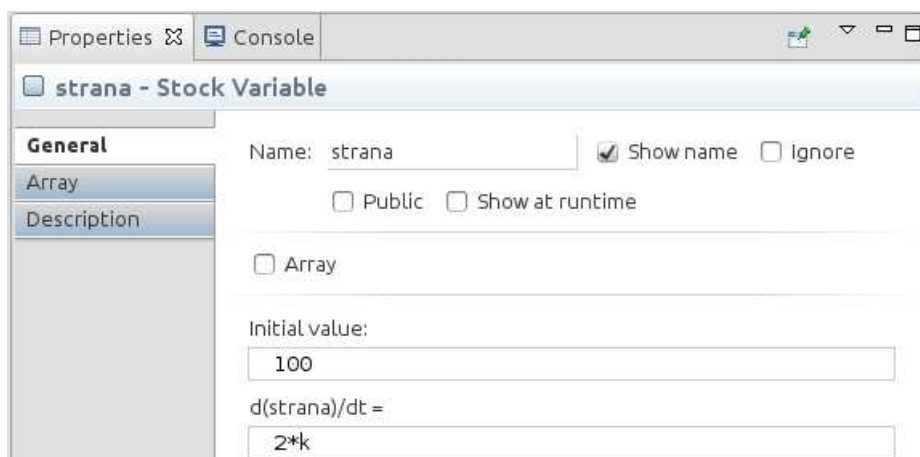
kao što i akciju koji će se izvršiti kada se slajder pomerava. U našem slučaju ova akcija biće promena vrednosti parametra k na tekući vrednost slajdera. Za minimalne i maksimalne vrednosti slajdera uzeli smo 0 i 3 redom pošto ispostavilo se da su ovi koefficienti odgovarajući za najbolji prikaz ove simulacije. Prilikom zadavanja akcije možemo koristiti Java sintaksu kao što smo već naglasili. Na slici 12 možemo videti da prilikom definisanja akcije koristili smo operaciju dodele vrednosti, gde tekući vrednost slajdera nalazi se u promenljivoj *value*.

U sledećem koraku definisaćemo ponašanje promenljive sfere i kocke. Element promenljiva nalazi se u grupi *System Dynamics* pod imenom *Stock variable*. Sfera je jednoznačno određena sa dužinom poluprečnika a kocka je sa jednom od njene stranice. Pomoću dobijenih rezultata za brzinu topljenja leda oblika sfere pod (11) i za kocku pod (12) možemo opisati ponašanje promenljive *strana* i *sfera*.

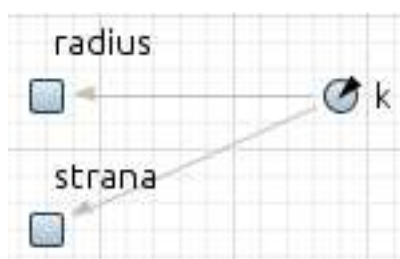
Za vizualizaciju promene u našem modelu koristićemo element *Time Plot* koji se nalazi u grupi *Analysis*. Karakteristična osobina grafika *Time Plot* je da horizontalna osa uvek označava vreme. Da bismo mogli prikazivati



Slika 12: Podešavanje slajdera

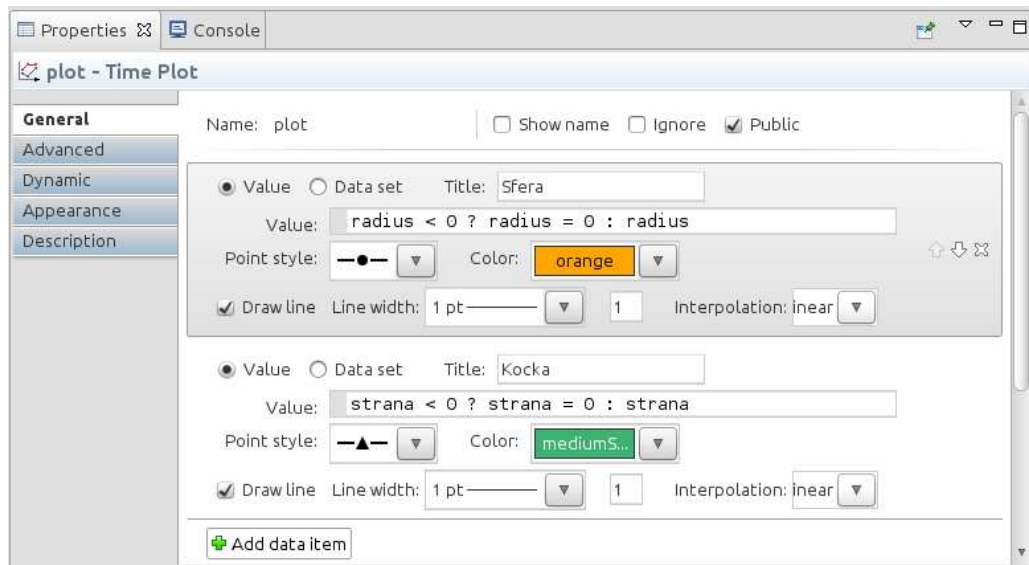


Slika 13: Podešavanje promenljive "strana"



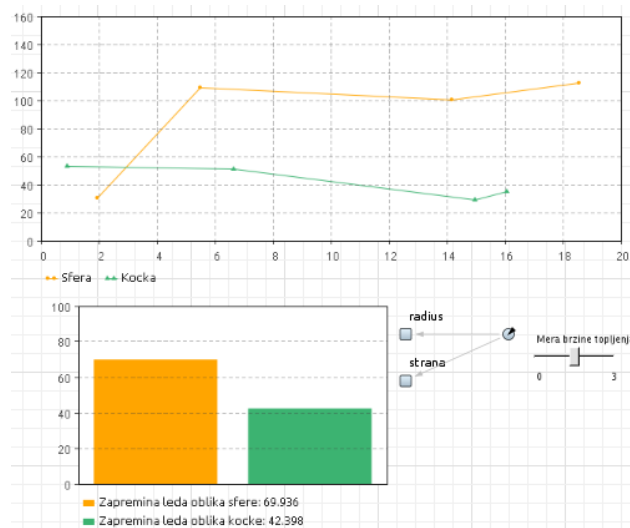
Slika 14: Promenljive "strana" i "radius" u zavisnosti od parametra k

neku informaciju na grafiku prvo moramo dodati ime traženog objekta. Kliknemo na dugme *Add data item* i za tip prikazanog objekta izaberemo *Value* i zadajemo ime parametra ili promenljive koju ćemo prikazivati. Takođe možemo koristiti Java sintaksu ako je potrebno dodatno preciziranje ponašanje date funkcije. U našem slučaju umesto korišćenja samo *radius* i *strana* (koje su na nekom intervalu negativne) sa *if* naredbom ograničili smo crtanje funkcije za vrednosti veće ili jednake od nule. Pored vrednosti elementa grafike možemo menjati način prikazivanja krive koji on izcrtava.



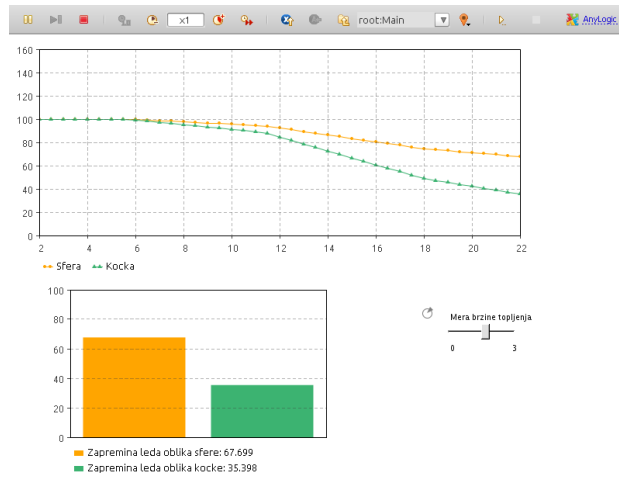
Slika 15: Dodavanje elementa koje ćemo prikazati na grafici

Za što bolji prikaz posmatranog događaja možemo dodavati više različite objekte iz grupe *Analysis* kao na primer *Bar Chart* ili *Plot*.

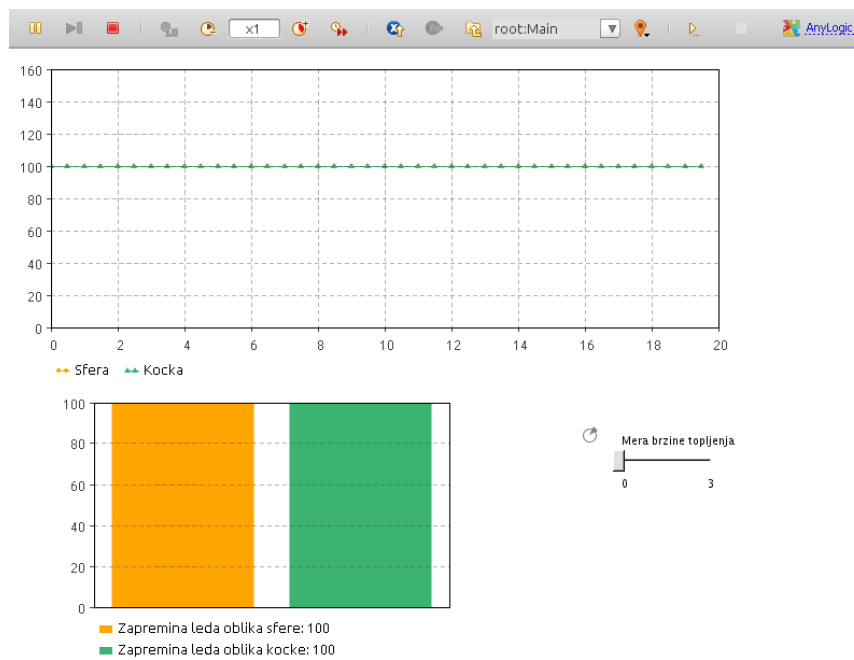


Slika 16: Korišćenje elemenata “Time Plot” i “Bar Chart”

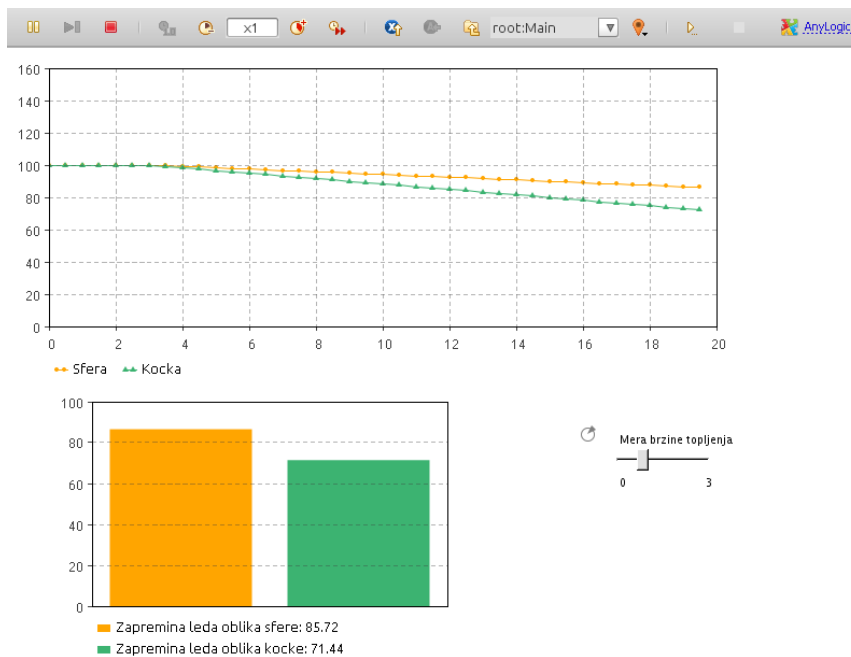
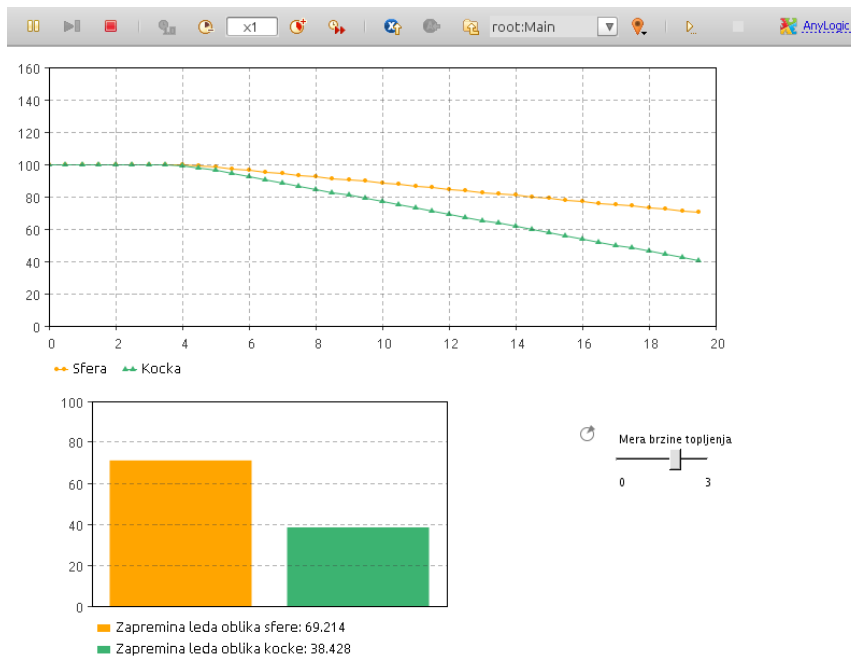
Konačno iz menija *Model* izabranjem opcije *Run* možemo pokretati našu simulaciju. Zahvaljujući za promenljivi vrednost parametra pomoću slajdera možemo promeniti ovaj parametar i posmatrati kako se topljenje odigrava za različite vrednosti *k*.

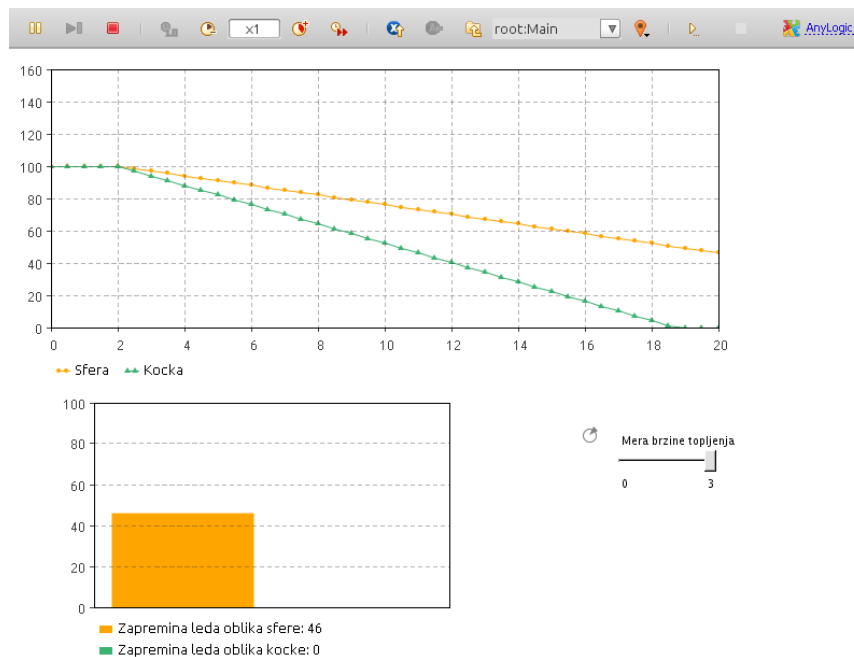


Slika 17: Animacija modela topljenja



Slika 18: Proces topljenja za $k = 0$

Slika 19: Proces topljenja za k oko $\frac{1}{3}$ Slika 20: Proces topljenja za k oko $\frac{2}{3}$

Slika 21: Proces topljenja za k oko 3

Literatura

- [1] Aleksei Beltukov - *Applied Differential Equations*
http://www1.pacific.edu/~abeltuko/math_57/handout1.pdf, 2010
- [2] Jasna M. Čanadanović-Brunet - *Prezentacije iz hemije hrane*, Tehnološki fakultet, Novi Sad.
- [3] Dr. inž. Paula Putanov - *Osnovi fizičke hemije*, Novi Sad, 1977.
- [4] Todd Stedl - *Intro to Quantum Mechanics* - <http://notendur.hi.is>
- [5] Dr. Arpad Takači - *Skripta za matematičko modeliranje*, Novi Sad, 2006.
- [6] *Hydrogen bonding in water: Introduction* - <http://www.btinternet.com>
- [7] Humboldt State University - *Water Properties*, <http://users.humboldt.edu>, California, 2010
- [8] *Led* - <http://sr.wikipedia.org>
- [9] *Voda* - <http://sr.wikipedia.org>
- [10] *The Water Molecule and its Properties* - <http://www.aquadyntech.com/watermolecule.html>