

Termodynamika R 2021/2022

Kacper Cybiński

3 marca 2022

Spis treści

Organizacja wykładu:

1. Dwa kolokwia - po 40 % pkt
2. Zadania domowe - 20 % pkt

Strona wykładu

Suma - 100 %. Zaliczenie ćwiczeń > 50%, Egzamin 100 %. Propozycja oceny w zakresie 3 – 4.5 Po 5 przychodzimy na ustny. Ustny też dla plebsu, nie tylko dla tych z 4.5 (*Patrz Pawełczyk*)
Egzamin i kolokwia mają 2 części:

- Test ABCD, 1 lub wielokrotnego wyboru ~ 45 min.
- Zadania - $\sim 3h$

Zadania domowe: Jak na elektro, ale tylko 3 zadania na tydzień. Na wykładzie czwartkowym losowanie zadania zbieranego. Jest jedno dodatkowe, trudniejsze, "Joker".

Lecture 1

Problem wielu ciał

Dla problemu 3 ciał pierwsze znalezione stabilne rozwiązanie zostało opisane przez lagrange'a. Jest to ruch po okręgu **Wstaw rysunki z wykładu**, a w ~ 1990 opisano też stabilną orbitę po ósemce. Historia superkomputerów:

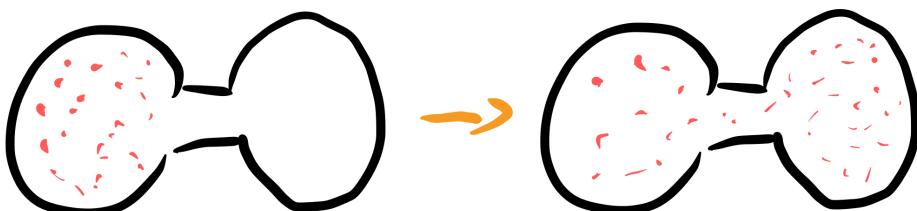
- Anton (2008) - Daniel Shaw
 - Problem zwijania białek
 - 10 ms zwijania - 5 min obliczeń
 - $10^4 - 10^5$ atomów - 1 ms w 100 dni. Tj. 10 ns/dzień
- Summit (2018)
 - 27 tys. GPU + 9 tys. CPU.
 - $200 \cdot 10^6$ 32 ns/dzień

Dla skali -> kubek z herbatą ma $\sim 10^{25}$ **atomów**

Demon Laplace'a: Laplace mówił, że symulacja, która by знаła położenia i pędy wszystkich cząstek by znała przeszłość i przyszłość \rightarrow przeszłość i przyszłość by stała przed nią otworem. Jest to wizja świata skrajnie deterministycznego. Obecnie raczej upadłej. **Wniosek:** Kupując kefir nie obchodzi nas położenie wszystkich atomów, a właściwości makroskopowe.

Fizyka statystyczna: Jest dziedziną zajmującą się przejściem z informacji mikroskopowej do informacji makroskopowej, która jest obiektem naszego zainteresowania.

Proces nieodwracalny ?



Rysunek 1.1: Proces nieodwracalny?

1.0.1 Pokazy

Cylindry z ulepkiem cukru

Widzimy tu na demonstracji [odwracalność](#). Są dwa rodzaje:

- [odwracalność dynamiczna](#) :

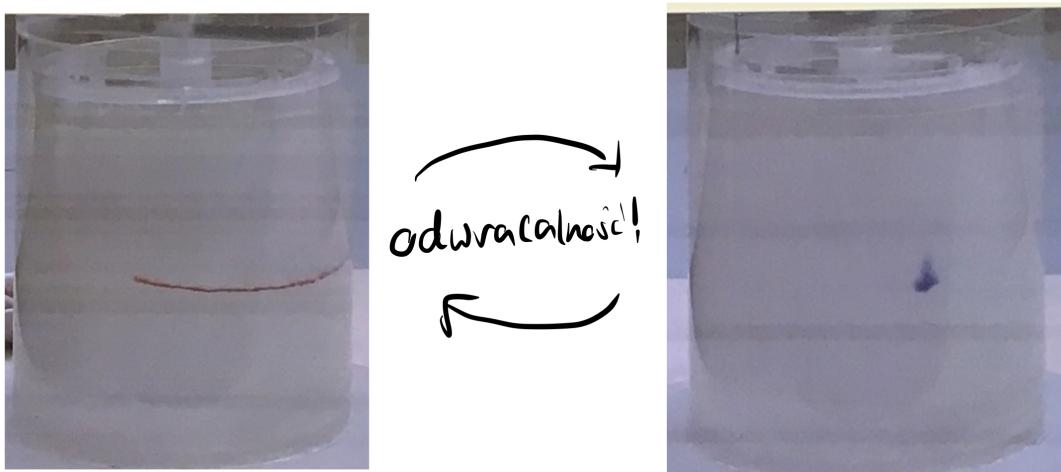
$$m \frac{dv}{dt} = F$$

Wynika ona z dynamiki Newtonowskiej, jest symetryczna względem transformacji $t \rightarrow -t$, $v \rightarrow -v$.

- [odwracalność kinematyczna](#) :

$$0 = m \frac{dv}{dt} = F - \gamma v \implies v = \frac{F}{\gamma}$$

Gdzie γ jest współczynnikiem oporu. Ta odwracalność jest symetryczna względem przekształcenia $F \rightarrow -F, v \rightarrow -v$. Ten rodzaj odwracalności zachodzi w lepkich cieczach. Symetryczny względem zmiany kierunku siły i prędkości, ale z czasem nieodwracalnym.



Rysunek 1.2: Demonstracja odwracalności kinematycznej. Działa to tylko dla **lepkiej cieczy**

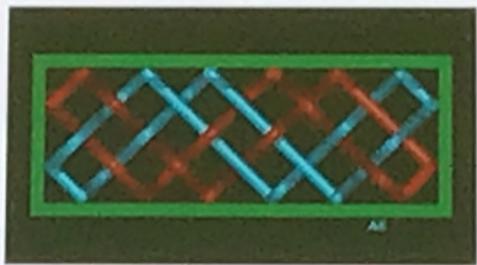
Kolejnym pojęciem które się pojawia jest [ergodyczność](#). Oznacza to, że średnia $\langle x \rangle$ z układu po czasie jest równa średniej po powierzchni. Przykładem takiego układu jest zasadniczo **Bilard bu-nimowicza** (Patrz Rysunek ??). Układ ergodyczny to taki, który po odpowiednio dużym czasie osiąga stan równowagi.

Model Ehrenfestów:

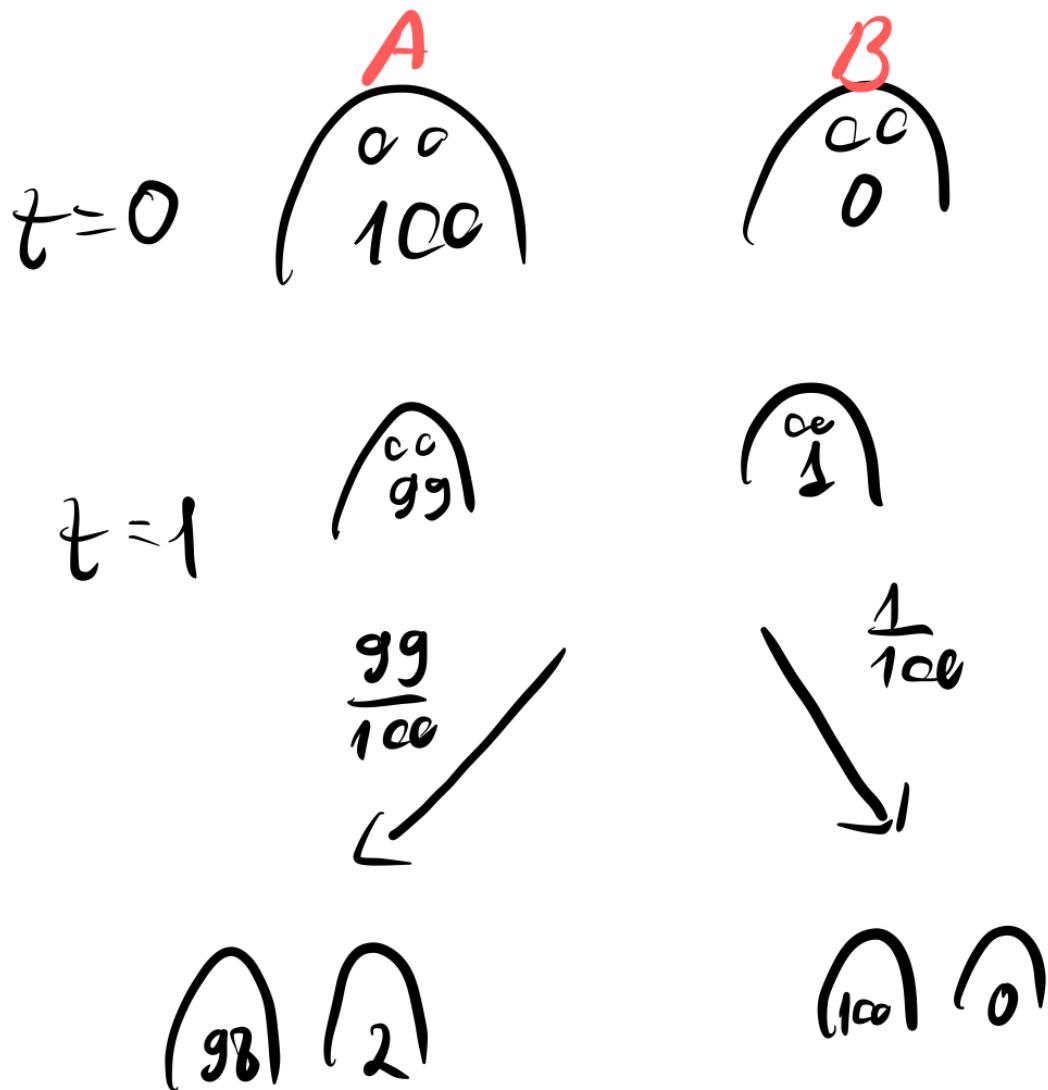
Ergodyczne bilardy



bilard Bunimowicza



Rysunek 1.3: Demonstracja **Bilardu Bunimowicza**. Po prawej bilard prostokątny - Nie Ergodyczny, ponieważ po odpowiednio długim czasie nie uśrednia się rozkład częstek - Nie osiąga równowagi.

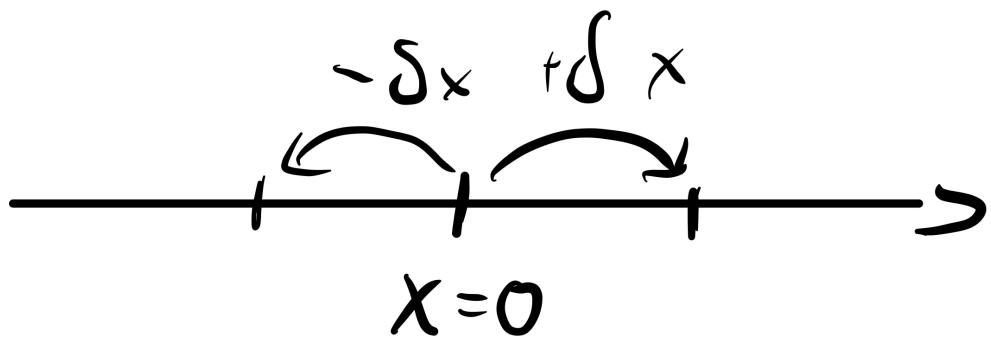


Rysunek 1.4: Demonstracja **Modelu Ehrenfestów**. Bierzemy dwa psy i liczymy sobie $\langle n_a(t) \rangle$. W tym celu patrzymy sobie na [ansambl](#) (zespół) dwójkę psów.

Lecture 2

2.0.1 Ruch cząstek - Ruchy Browna

Wprowadzamy sobie jak propaguje się cząstka w cieczy w czasie.



Rysunek 2.1: Położenie cząstki

Skoki o δx następują co δt i mamy:

$$\Delta x = \begin{cases} \delta x, & \frac{1}{2} \\ -\delta x, & \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$x(n) = x(n-1) + \Delta x$$

$$\langle x(n) \rangle = \langle x(n-1) \rangle = \langle x(n-2) \rangle \cdots = \langle x(0) \rangle = 0$$

Wynika, że:

$$x(n)^2 = (x(n-1) + \Delta x)^2 = x^2(n-1) + 2x(n-1)\Delta x + (\Delta x)^2$$

$$\langle x^2(n) \rangle = \langle x^2(n-1) \rangle + 2 \langle x(n-1)\Delta x \rangle + \langle (\Delta x)^2 \rangle$$

Gdzie wiemy, że $2 \langle x(n-1)\Delta x \rangle = 0$ bo kolejne skoki są niezależne, a $\langle (\Delta x)^2 \rangle = (\delta x)^2$
Czyli:

$$\langle x^2(n) \rangle = \langle x^2(n-1) + (\delta x)^2 \rangle$$

$$\langle x^2(n) \rangle = n(\delta x)^2 + \langle x^2(0) \rangle$$

Ale $\langle x^2(0) \rangle = 0$, więc widzimy, że:

$$\langle x(n) \rangle = 0, \quad \langle x^2(n) \rangle = n(\delta x)^2$$

Teraz oznaczmy sobie $n = \frac{T}{\delta t}$, a $\frac{(\delta x)^2}{2\delta t} = D$ - stała dyfuzji. Wtedy dostajemy ruch dyfuzyjny ([Ruch Browna](#)).

$$\langle x^2(n) \rangle = 2T \frac{(\delta x)^2}{2\delta t}$$

Dokładna definicja ruchu Browna to:

$$\text{ruch Browna} = \begin{cases} \langle x^2(n) \rangle = 2DT \\ \langle x(n) \rangle = 0 \end{cases} \quad \text{gdzie } x = vt, \quad t = \frac{L}{v}, \quad T = \frac{L^2}{2D}$$

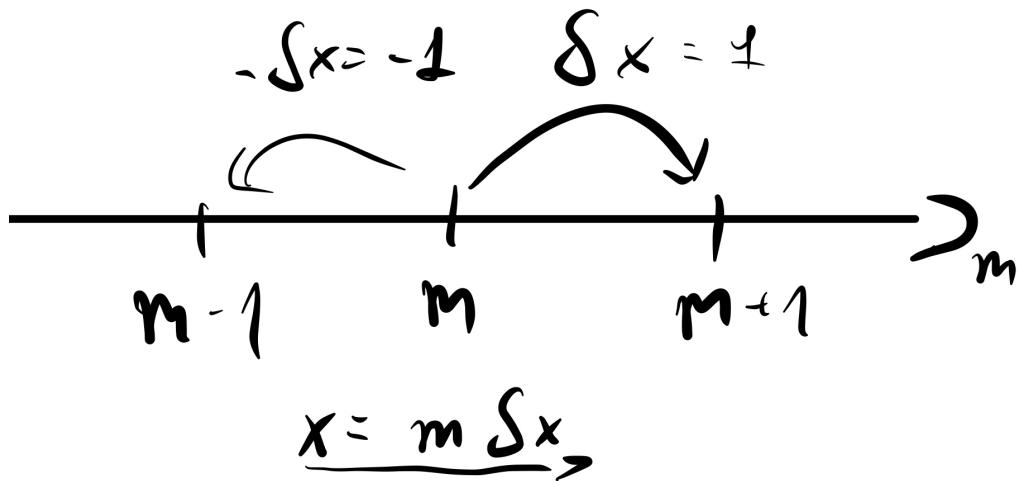
gdzie L - odległość.

Przykładowe wartości:

Bakteria - $L \sim 10^{-4}$ wtedy $D \sim 10^{-5} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ a czas dyfuzji $t = \frac{L^2}{2D} = 5 \cdot 10^{-4} \sim (0.5) \text{ ms}$ ale np z jednego końca auli na drugi szło by to miesiąc.

Takeaway - Zapachy nie transportują się dyfuzyjnie!

2.0.2 Równanie Master



$$x = m\delta x \rightarrow, t \pm 1 = t \pm \delta t$$

$$P(m, t+1) = \frac{1}{2}P(m+1, t) + \frac{1}{2}P(m-1, t)$$

$$P(m, t+1) - P(m, t) = \frac{1}{2}(P(x+\delta x, t) - 2P(x, t) + P(x-\delta x, t))$$

co jest drugą pochodną w punkcie x :

$$P(m, t+1) - P(m, t) = \frac{1}{2}\delta x \left(\frac{P(x+\delta x, t) - P(x, t)}{\delta x} - \frac{P(x, t) - P(x-\delta x, t)}{\delta x} \right)$$

$$P(m, t+1) - P(m, t) = \frac{1}{2}(\delta x)^2 \left(P' \left(x + \frac{\delta x}{2}, t \right) - P' \left(x - \frac{\delta x}{2}, t \right) \right)$$

co na mocy *central limit theorem* tłumaczy się na:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{P(x, t+\delta t) - P(x, t)}{\delta t} = \frac{(\delta x)^2}{\delta t} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

po przejściu do granic: $\delta t \rightarrow 0$, $\delta x \rightarrow 0$, $\frac{\delta x^2}{\delta t} = \text{const.}$

Dostajemy równanie dyfuzji:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

Co dla

$$P(x, t=0) = \delta(x)$$

Daje nam rozkład prawdopodobieństwa występowania punktu w jakimś x przy dyfuzji wygląda:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (2.2)$$

Czyli rozkład Gaussa, widoczny na Rysunku ??.

2.0.3 Demonstracje



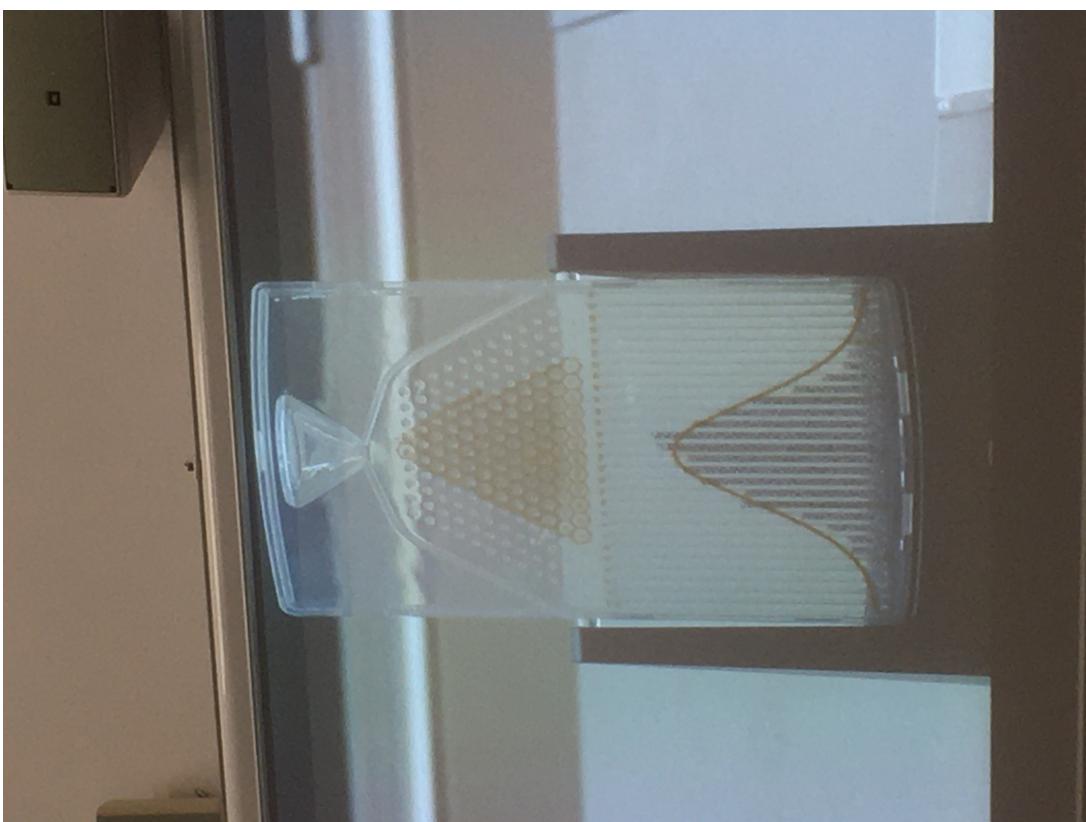
Rysunek 2.2: Jeden mol powietrza

Teaser na przyszłość, dyfuzja z dodatkowym członem od pola siły.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \frac{\partial F}{\partial \gamma} P \quad (2.3)$$



Rysunek 2.3: Jeden mol innych rzeczy
s



Rysunek 2.4: Przykładowy Rozkład Gaussa uzyskany ze spadających kulek

2.0.4 Wracamy do Modelu Erhnferstów

$$P(n, t+1) = \frac{n+1}{N} P(n+1, t) + \left(1 - \frac{n-1}{N}\right) P(n-1, t) \quad (2.4)$$

$$P(0, t+1) = \frac{1}{N} P(1, t) \quad (2.5)$$

$$P(N, t+1) = \left(1 - \frac{N-1}{N}\right) P(N-1, t) \quad (2.6)$$

szukamy rozwiązania niezależnego od czasu $p^{eq}(n)$ (2.7)

Z równania z powyżej wstaw referencje:

$$p^{eq}(0) = a, \quad p^{eq}(1) = N, \quad p^{eq}(n) = \binom{N}{n} a$$

Udowodnijmy przez indukcję:

$$\begin{cases} p^{eq}(n-1) = a \binom{N}{n-1} \\ p^{eq}(n) = a \binom{N}{n} \end{cases}$$

Teraz biorąc równanie 1 wyżej wstaw referencję:

$$p^{eq}(n+1) \frac{n+1}{N} = a \left[\binom{N}{n} \binom{N}{n-1} \frac{N-n+1}{N} \right]$$

Pamiętając o tożsamości:

$$\binom{N}{n} = \binom{N-1}{n} + \binom{N-1}{n-1} \quad \text{dostajemy:}$$

$$p^{eq}(n+1) = a \frac{N}{n+1} \left[\left\{ \binom{N-1}{n} + \binom{N-1}{n-1} \right\} - \left\{ \binom{N-1}{n-1} + \binom{N-1}{n-2} \right\} \cdot \frac{N-n+1}{N} \right]$$

$$p^{eq}(n+1) = a \frac{N}{n+1} \left[\frac{(N-1)!N}{n!(N-1-n)!(n+1)} + \frac{(N-1)!(n-1)N}{(n-1)!(N-n)!N(n+1)} \right]$$