

1 слайд

0) Здравствуйте, глубокоуважаемые преподаватели

1) Поляченко Юрий

2) Доклад посвящен изучению процесса самодиффузии в ЛДЖ системе. Это результат вопроса по выбору со 2 семестра – Термодинамика и начала статфизики.

План

0) мы хотим изучать процесс диффузии

1) надо сперва определить, в какой модели мы работаем.

2) Эта модель будет выходить за рамки модели, принятой в нашем курсе общей физики. Поэтому далее можно посмотреть, как сказываются эти отличия на предсказаниях, даваемых моделью.

3) Чтобы проверить данные предсказания, нужен аппарат. Соответственно нужно создать его, проверить, что он адекватно моделирует реальность (~~верно моделирует поведение реальности с устраивающей нас точностью~~), и использовать его для проведения численных экспериментов для проверки данных выше предсказаний.

4) По результатам численных экспериментов можно сделать выводы о верности предсказаний, полученных во 2 пункте.

“Модель”

Поговорим о модели, в которой будет выполнена вся дальнейшая работа.

ЛД потенциал

- 1) частицы взаимодействуют попарно по потенциалу ЛДЖ, вид которого здесь приведен.
 - 2) Все дальнейшие формулы для удобства приведены в системе единиц ЛДЖ – сигма, эpsilon и масса. Рассматривается газ одного вида, поэтому массу можно принять за 1.
 - 3) взаимодействия попарное, поэтому считать много частиц невозможно из-за ограниченности вычислительных ресурсов. А диффузия – процесс в однородной бесконечной среде, поэтому для его верного воспроизведения нужно смоделировать бесконечную ($L \gg L_{md}$) среду.
-

ПГУ

- 1) Сделать это предлагается с помощью введения ПГУ. Идея показана на рисунке. Считаемая ячейка копируется сдвинуто на свою длину по всем осям, и реально хранящиеся в памяти частицы могут взаимодействовать и с образами частиц. Т.о. при достаточно большой (подробнее в вопросах) ячейке всем частицам кажется, что они находятся в бесконечной среде.
 - 2) формула показывает математический способ введение ПГУ.
-

Газ

- 1) Здесь представлен довольно плотный газ
 - 2) на анимации наглядно видно, как работают ПГУ
 - 3) газ действительно выглядит так, как это представляют себе люди
-

Жидкость

- 1) Сконденсировавшаяся капля жидкости
 - 2) это реально похоже на жидкость
-

Тв. тело

- 1) Кристалл.
 - 2) Явно видно дефекты, что опять подтверждает наши представления.
-

Уравнения Ньютона и Верле

- 1) Парное взаимодействие дает систему из N векторных уравнений Ньютона и $2N$ векторных начальных условий.
 - 2) При хорошем начальном состоянии (подробнее в вопросы) система хорошо решается численными методами. В данном случае использована описанная на слайде численная схема (почему – в вопросы).
-

Итог модели

- 1) Попарное взаимодействие по ЛДЖ
 - 2) Дает систему уравнений Ньютона
 - 3) Решаемую численно ...
 - 4) ... довольно долго, поэтому для оптимизации введены ПГУ.
-

“Теоретический анализ модели”

- 1) Мы описали модель, в которой работаем. Она выходит за рамки модели из нашего курса. Основное отличие – потенциал.
 - 2) у нас был либо ИД, либо в лучшем случае вандерваальс, у которого есть притяжение, но модель столкновения твердых шаров.
 - 3) у нас граница довольно резкая – 12 степень, но не как у вандерваальса.
 - 4) Также у нас известен конкретный вид потенциала, чего не было в нашем курсе.
 - 5) посмотрим, как эти дополнения скажутся на теоретических предсказаниях.
-

Оценки Lmd

- 1) Потенциал конкретизировался и уточнился. Одно из последствий – можон точнее оценить Lmd в таком газе.
 - 2) Известная нам Lmd (зеленая формула) не зависит от T. Также есть известная формула Сазерленда с коэффициентом, зависящим от рода газа.
 - 3) Конкретизация вида потенциала позволяет оценить этот коэффициент из ЗСЭ и ЗСМИ, что и описано на данном слайде. Результат для Lmd – синия формула.
- Взаимодейсвия парные, что говорит о модели $n \ll 1$.
-

Формула $T > 1$

- 1) замена жесткой стенки на более точный потенциал позволяет сделать еще одну оценку.
 - 2) L_{md} считалось расстоянием между столкновениями. У нас столкновений нет. За столкновения можно считать сильное ($dv \sim v$) изменение скорости.
 - 3) В газе ВДВ столкновение происходило при $d < 1$. У нас при $d = 0.99$ изменение скорости будет незначительно, поэтому это можно не считать столкновением. Оценить реальный радиус можно из соображение $\langle K \rangle \rightarrow E_{pot}$, что изображено на слайде. Это дает “высокотемпературную оценку” - красная формула.
-

Наглядное сравнение формул L_{md}

- 1) Обе полученные формулы не очень очевидны, поэтому здесь приведена их визуализация.
 - 2) Сазерленд дает заниженное по сравнению с нашим курсом значение, что логично, т.к. произошли столкновения, которых бы не было без притяжения.
 - 3) формула $T > 1$ дает завышение, что тоже логично, т.к. не произошло некоторых столкновений, произошедших в модели твердых шаров.
-

Вывод уточнения диффузии

- 0) Ещё одно уточнение, которое можно сделать – зависимость квадрата смещения от времени.
 - 1) В нашем курсе эта зависимость была линейной. Но это очевидно не может выполняться при малых ($t^* \ll \tau$) временах, т.к. на них частицы еще ни с кем просто не взаимодействовали и движутся по $x=vt$, что дает параболу а не прямую для квадрата смещения.
 - 2) Относительно честно решив уравнение Ньютона с начальными условиями, можно получить ...
 - 3) ... данную формулу.
 - 4) При больших временах она стремится к решению из нашего курса
 - 5) но на малых дает ожидаемую из физических соображений параболу. Тут есть параметр τ , которого нет в нашем курсе.
 - 6) Приведем его связь с известными величинами.
-

“Анализ численных экспериментов”

- 1) Мы сформулировали, что ожидаем увидеть в расчетах, и теперь собственно надо эти расчеты провести.
-

Проверка максвелла

- 1) Прежде чем проводить расчеты, проверяющие ответы на вопросы, которые нам заранее не известны, надо проверить, что созданный нами аппарат решения задачи действительно работает.
 - 2) Из не самых очевидных проверок можно примести распределения скоростей частиц по Максвеллу. Оно следует из ЗСЭ, ЗС_большого_числа_частиц, и однородности изотропности пространства, что очевидно должно присутствовать в верно реализованном аппарате.
 - 3) Слева – распределение максвелла в привычном виде
 - 4) Справа – в линеаризованном
 - 5) Видно, что на обоих масштабах совпадение хорошее.
 - 6) будем считать, что реализованная система моделируется раельность с достаточной для нас точностью.
-

Проверка уточненной диффузии

- 1) Променим созданный аппарат для проверки уточненной формулы диффузии
 - 2) Видно, что асимптотически (рис. слева) уточненный закон хорошо совпадает как с экспериментом, так и с предсказанием теории из нашего курса, а около 0 (рис. справа) наблюдается небольшое отклонение. Рассмотрим его внимательнее.
 - 3) Видно, что в отличие от формулы из нашего курса, уточненная формула хорошо описывает эксперимент при малых временах.
 - 4) Итак, предложенная формула работает верно. Она может быть использована для “экспериментальной” оценки Lmd по например наклону $r^2(t)$.
-

Проверка теория для Lmd

0) Теперь проверим сделанные ранее оценки Lmd.

0.1) Сначала опишем предлагаемый метод проверки:

Изначально мы задаем для моделирования системы 2 независимых параметра – T и n . Из них по предложенным теор. формулам можно посчитать ожидаемое Lmd – это теор. оценка. С другой стороны можно вычислить Lmd из например угла наклона $r^2(t)$ – это экспериментальная оценка.

1) Далее можно посчитать относительное отклонение этих величин, что и предлагается считать за ошибку теор.

Формулы. Цвет точки на диаграмме – относительная ошибка. Чем желтее – тем хуже.

1.1) Для ИДГ в области идеального (разреженного горячего) газа формула из нашего курса дает занижение ~60%.

1.2) Желтая область – неадекватные измерения.

2) Высокотемпературная формула же дает занижение ~40% и меньше.

3) Формула сазерледна неприменима (ошибка более 100%) в данном диапазоне температур.

Выводы

- 0) по приведенным результатам можно сделать ряд выводов.
- 1) Высокотемпературная формула дает лучшее предсказание, чем известная нам формула.
- 2) Формула Сазерленда неприменима в исследованном диапазоне температур.
- 3) Уточненная формула диффузии хорошо согласуется с экспериментом, что говорит в пользу линейной зависимости силы сопротивления от скорости в данном диапазоне плотностей и температур.