

Московский государственный университет имени М.В Ломоносова

Физический факультет

Кафедра квантовой статистики и теории поля

Получение основных закономерностей поведения многочастичных систем на основе численного моделирования

Выполнил студент 407 группы, Супонин В.А.

Научный руководитель: д. ф. – м. н. проф. Савченко А.М.

Москва 2022

Введение в проблематику

Термодинамика и статистическая физика

Термодинамический предел

$$\begin{cases} N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty \end{cases}, \text{ при } \tilde{V} = \frac{V}{N} = \text{const}$$

Термодинамические системы

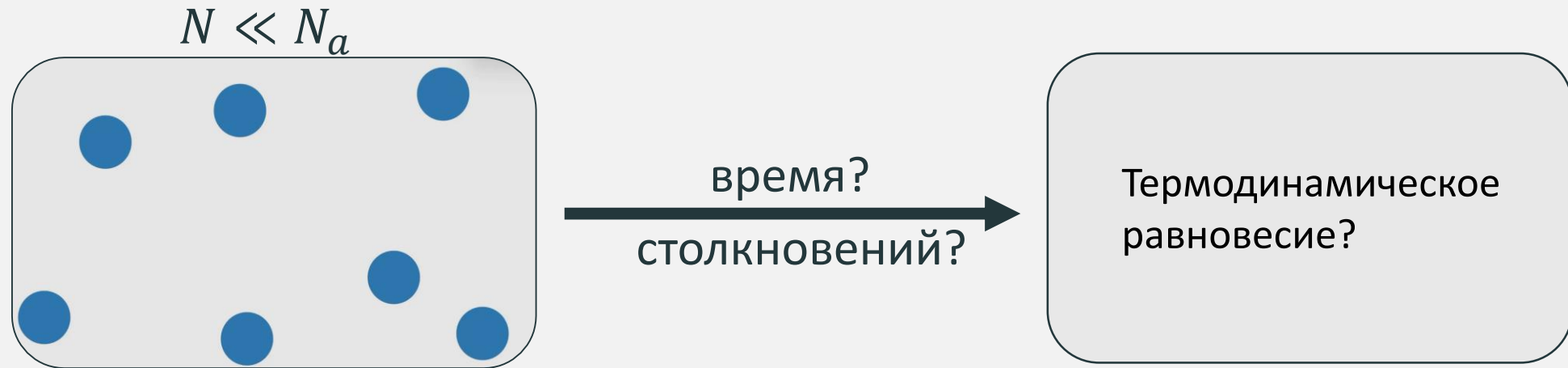
- порядка N Авогадро частиц
- свойство аддитивности
- с течением времени при фиксированных условиях обязательно достигает термодинамического равновесия

формализм



Системы малого
числа частиц

Цели проводимого исследования



- исследовать влияние количества и вида взаимодействия молекул на эволюцию статистической системы
- оценить характерное время релаксации
- оценить число соударений, необходимое для наступления равновесия
- оценить влияние размерности пространства на эти параметры
- найти и проверить критерии нарушения Н-теоремы Больцмана

Расстояние Кульбака - Лейблера

KL дивергенция – несимметричная положительная мера удаленности друг от друга двух вероятностных распределений

$$D_{KL}(P||Q) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^n p_i \log \frac{p_i}{q_i}$$

$$D_{KL}(P||Q) \stackrel{\text{def}}{=} \int p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

где Q, P – истинное и предполагаемое распределения

$p(x)$, $q(x)$ – функции плотности вероятности

Описание модели взаимодействия молекул

Рассмотрим систему молекул идеального газа, любое взаимодействие в которой вводится через потенциал

$$U(r) = c_{ab} \left(\frac{1}{r^a} - \frac{1}{r^b} \right)$$

$$\vec{F} = -gradU(r) = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{\partial U(r)}{\partial r}$$

$$U_{min}(r_0, c_{ab}) = -1$$

$$\ddot{\vec{r}}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}$$

где c_{ab} - нормировочный коэффициент
 r_0 - точка минимума $U(r)$

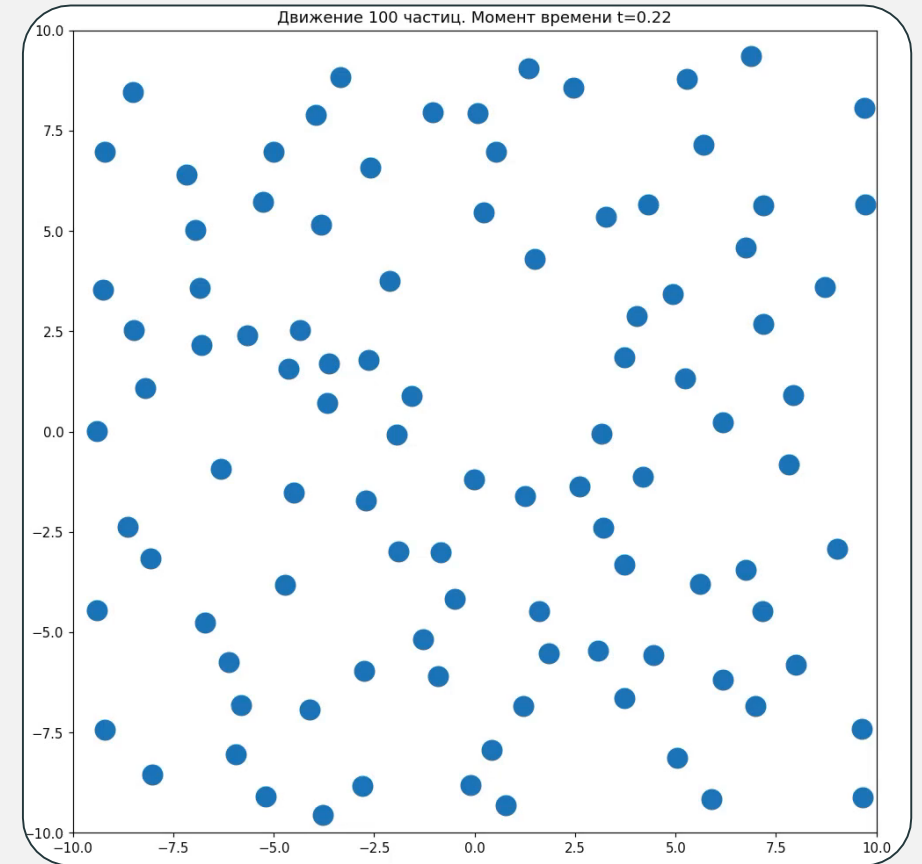


Рис. 1. Анимация движения 100 частиц, при степенях потенциала $a=12$, $b=6$

Интегрирование уравнений движения

Интегрирование уравнений движения будет производиться с помощью алгоритма Верле в скоростной форме

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2} \Delta t^2$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{f(t + \Delta t) + f(t)}{2} \Delta t$$

Основные свойства:

- имеет 2-й порядок точности по скорости и 3-й по координате
- принадлежит классу одношаговых линейных алгоритмов
- является обратимым
- сохраняет объем фазового пространства
- малая флуктуация энергии на больших временах

Приведенные переменные

Используемые приведенные переменные

- единица длины σ
- единица энергии ε
- единица массы m

$$t = \sigma \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}} t' \quad U(r') = \varepsilon U'(r')$$

$$T = \frac{\varepsilon}{k_b} T' \quad v = \sqrt{\frac{\varepsilon}{m}} v'$$

Величина	Приведенные	СИ
время	$\Delta t = 0.005$	$\Delta t' = 1.09 \times 10^{-14} \text{с}$
длина	$r = 1$	$r' = 3.405 \times 10^{-10} \text{м}$
температура	$T = 1$	$T' = 119.8 \text{ К}$
скорость	$v = 1$	$v' = 6.3 \times 10^{-3} \text{ м/с}$

Рис. 2. Перевод величин в приведенных единицах в реальные единицы СИ для аргона

Описание модели взаимодействия молекул

Рассмотрим систему гранулярного газа. Молекулы взаимодействуют путем упругих или неупругих соударений.

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 - \frac{1}{2}(1 + \epsilon)(\vec{v}_{12} \cdot \vec{e})\vec{e}$$

$$\vec{v}'_2 = \vec{v}_2 + \frac{1}{2}(1 + \epsilon)(\vec{v}_{12} \cdot \vec{e})\vec{e}$$

$$\epsilon = 1 - c_1|\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}|^{\frac{2}{5}} + c_2|\vec{v}_{12} \cdot \vec{e}|^{\frac{2}{5}} \pm \dots$$

где ϵ - коэффициент реституции

c_1, c_2 - постоянные, зависящие от параметров молекул

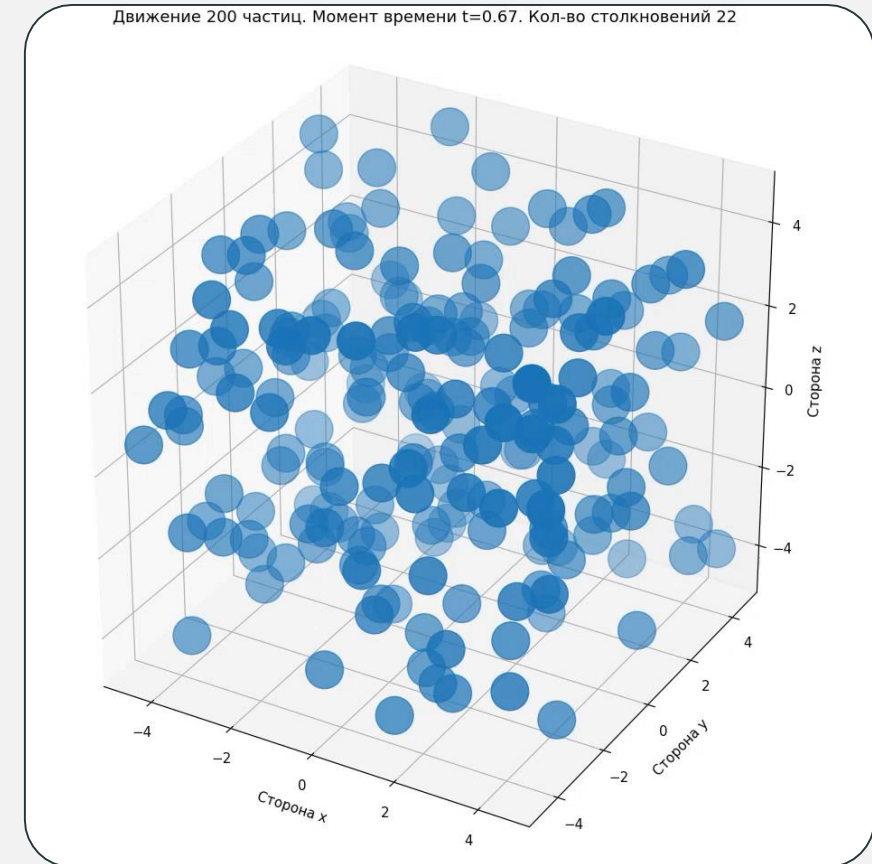
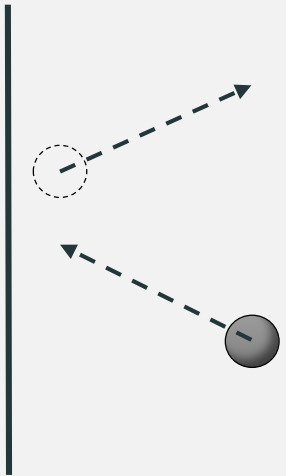


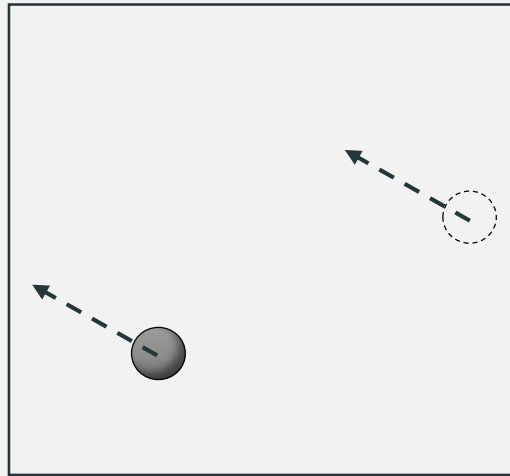
Рис. 4. Анимация движения 200 частиц в пространстве при неупругом взаимодействии

Взаимодействие со стенками

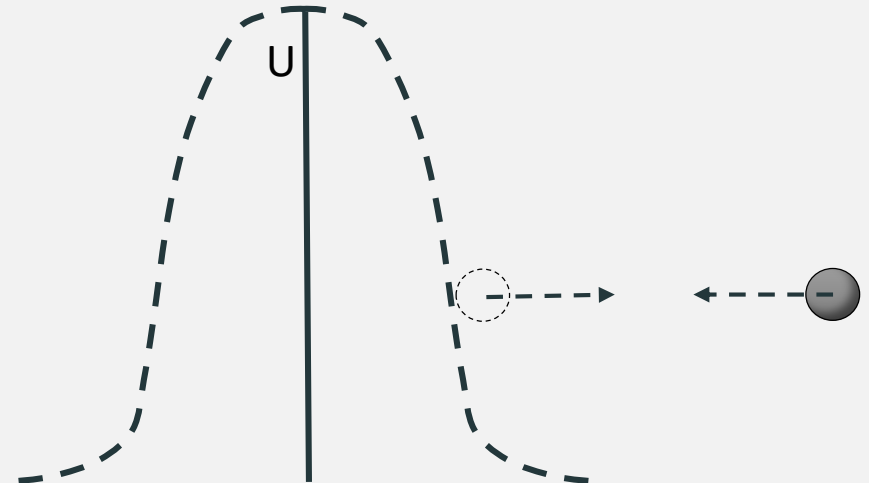
Во всех задачах реализовано упругое взаимодействие со стенками. При достижении определенных координат молекулами, проекция их скорости меняется на противоположную



Упругие стенки



Периодические стенки



Потенциальные стенки

Н-теорема Больцмана

Н-теорема описывает необратимость статистических систем

$$H \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^n p_i \ln p_i$$

$$H \stackrel{\text{def}}{=} \int p(v) \ln p(v) d^3v$$

$$S \stackrel{\text{def}}{=} -N k H$$

$$dH/dt \leq 0$$

$$\partial_t p + v \Delta p = St p$$

$St p$ – интегральный оператор

Фундаментальные критерии применимости

- бинарные упругие столкновения

Тройные столкновения

Интеграл столкновений не равен нулю при:

- тройные столкновения
- последовательность нескольких двойных столкновений

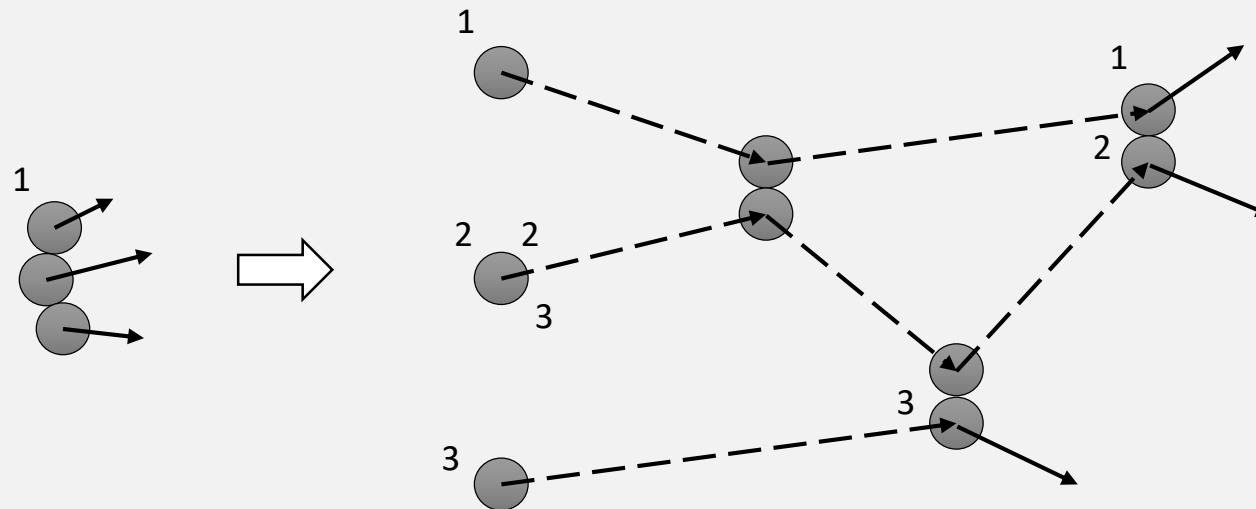
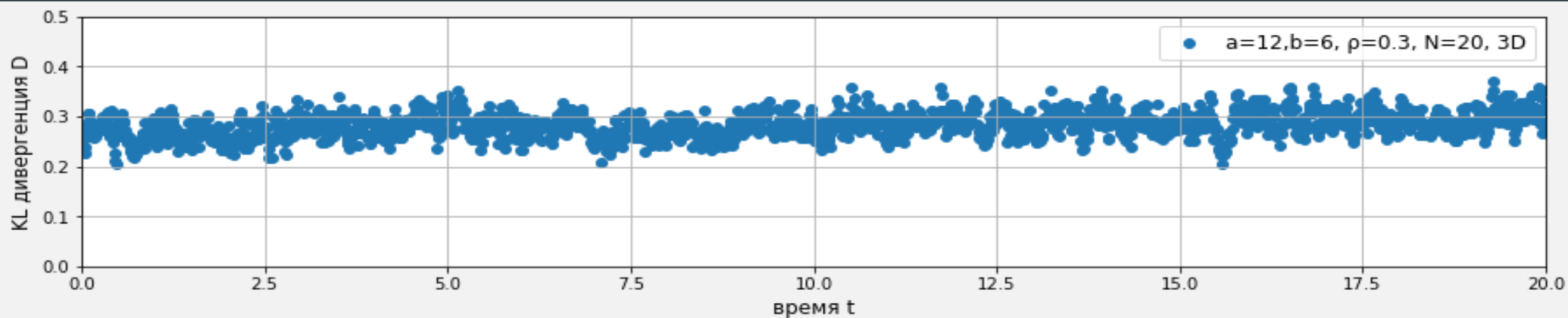


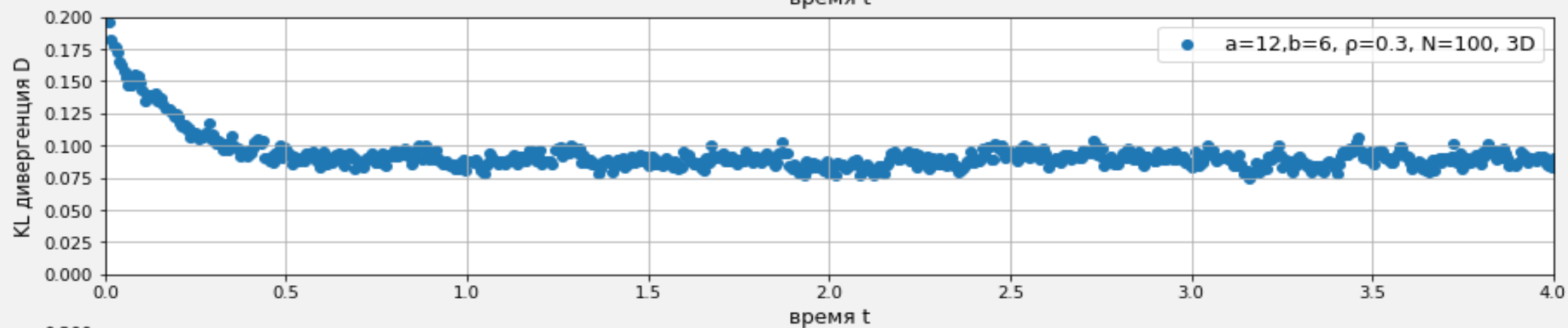
Рис. 5. модель тройных столкновений

Результаты

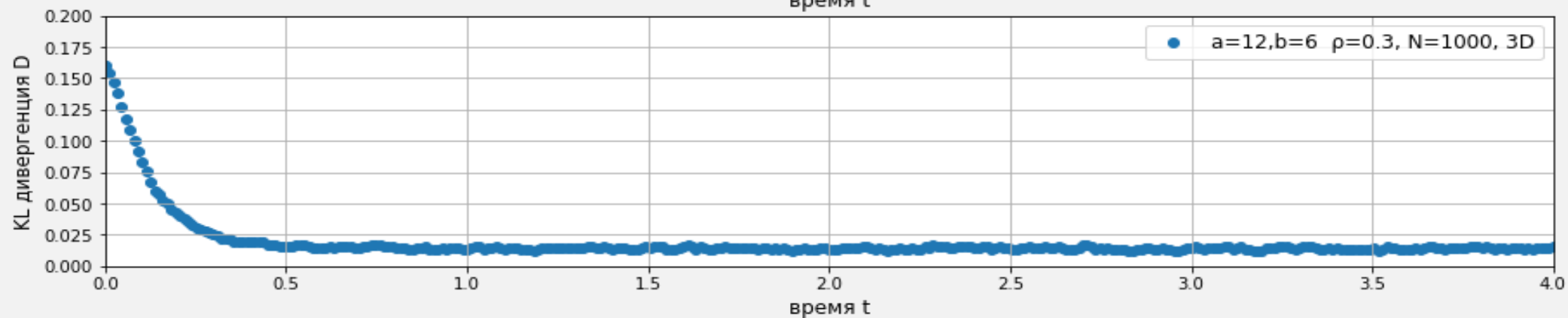
$N = 20$



$N = 100$

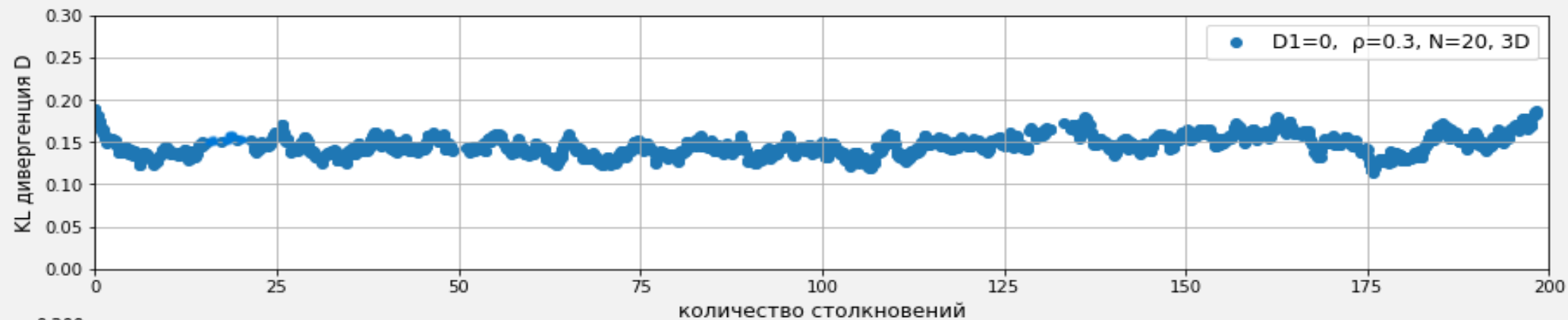


$N = 1000$



Результаты

N = 20



N = 100

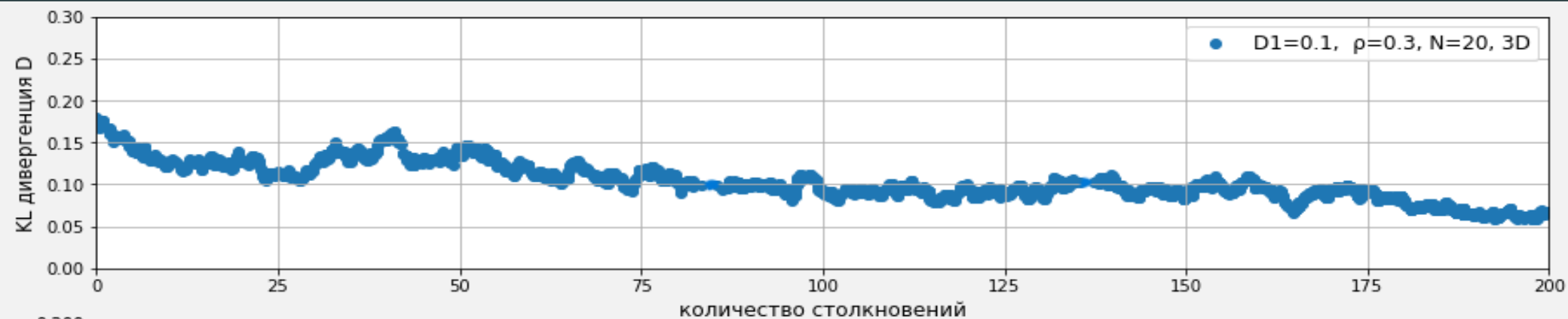


N = 1000



Результаты

N = 20



N = 100



N = 1000



Спасибо за внимание !