

Практическое задание
«Проверка эргодической гипотезы на примере
газа Лоренца».

Курс «Введение в термодинамику и статистическую
физику».

Авторы:

Лунин Дмитрий, 317 группа
Никишин Евгений, 317 группа

Руководитель:

доцент Полякова Марина Сергеевна

Содержание

1. Теоретическая часть. Эргодическая гипотеза.	2
2. Схема работы с программой	3
3. Упражнения	4
3.1. Наблюдение установления состояния равновесия в системе	4
3.2. Исследование зависимости времени установления равновесия в системе от параметров	4
3.3. Сравнение средних давлений (по ансамблю и по времени)	4
4. Требования к оформлению отчёта	5

Москва, 2015

1. Теоретическая часть. Эргодическая гипотеза.

В статистической физике для вероятностного описания термодинамической системы вводят понятие статистического ансамбля. Это совокупность очень большого числа идентичных термодинамических систем с одинаковыми внешними термодинамическими параметрами, но отличающихся друг от друга микросостоянием, т.е. значениями координат и импульсов частиц, составляющих систему. При таком подходе термодинамическая система представляется точкой в фазовом пространстве (пространстве координат и импульсов всех частиц системы \vec{z}), а статистический ансамбль — "облаком" точек в фазовом пространстве. Функция распределения вероятностей $w(\vec{z})$ для фазовых переменных \vec{z} является фактически нормированной на 1 плотностью частиц с фазовом пространстве, а полученные с её помощью средние значения внутренних термодинамических параметров

$$\langle B \rangle = \int B(\vec{z})w(\vec{z})d\vec{z} \quad (1)$$

называют фазовыми средними, или средними по ансамблю.

При экспериментальных исследованиях, как правило, повторные измерения проводятся на одной системе и определяется временное среднее значение внутреннего термодинамического параметра

$$\tilde{B} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T B(t)dt. \quad (2)$$

Усреднение по времени может быть осуществлено лишь по конечному интервалу времени. Усреднение по формуле (2) предполагает, что интервал усреднения T много больше всех характерных времен рассматриваемой системы, в частности, времени релаксационных процессов, приводящих к установлению равновесного состояния. Благодаря этому предельное значение \tilde{B} , определяемое формулой (2), не зависит от распределения координат и импульсов частиц системы в начальный момент времени.

Вопрос о соотношении временных и фазовых средних возник в самом начале развития статистической физики. При этом отправным пунктом служила так называемая эргодическая гипотеза, согласно которой для равновесного состояния временные и фазовые средние внутренних параметров совпадают, т.е.

$$\tilde{B} = \langle B \rangle. \quad (3)$$

В настоящей работе на примере газа Лоренца вам следует убедиться в справедливости эргодической гипотезы.

Пусть в двумерном евклидовом пространстве, случайно разбросано бесконечное множество шаров (рассеивателей). Между ними случайно разбросано большое число точечных частиц. Величина скорости каждой частицы постоянна и одинакова для всех частиц. При столкновении с рассеивателем частица отражается от него по закону упругого удара. Масса рассеивателя много больше массы частицы.

Газ Лоренца из n частиц — это хорошая модель для отслеживания свойств термодинамической системы. Так как наша модель не может содержать очень много частиц, то за термодинамическую систему будем принимать систему, содержащую 100 - 150 частиц.

В качестве внутреннего термодинамического параметра выбирается давление на стенку сосуда, вычисляемое как средний импульс силы, передаваемый за малое по сравнению с временем между последовательными соударениями частицы с рассеивателями время.

2. Схема работы с программой

Для выполнения задания следует использовать программу-визуализатор, которая позволяет промоделировать движение частиц в модели газа Лоренца.

В правой части экрана находятся окна, в которых можно задавать следующие параметры системы:

- Количество электронов (от 0 до 9999)
- Скорость электронов (от 0 до 1000)
- Направление начальной скорости электронов, то есть угол между скоростью частицы и выбранной осью (от 0 до 360 градусов)
- Радиусы шаров (рассеивателей) (от 0 до 33)
- Количество систем в ансамбле (от 1 до 10000)
- На экран выводится поведение частиц среди рассеивателей одной из систем ансамбля. Можно посмотреть на любую из них (от 0 до $n - 1$, где n — количество систем в ансамбле)

Для демонстрации необходимо задать, как минимум, количество электронов, остальные параметры будут иметь значения, набранные ранее в соответствующих окнах.

Зависимость изменения давления со временем иллюстрируется графиками, которые рисуются в левом нижнем углу экрана. Синим обозначается среднее по ансамблю, зеленым — среднее по времени, красным — давление в системе, демонстрируемой на экране.

Когда устанавливается равновесие, программа приостанавливается, и на экране появляется время установления равновесия.

Критерий остановки. Система вычисляет разность давления в демонстрируемой на экране системе и среднего давления по ансамблю и усредняет это значение по времени. Когда модуль этой разности становится меньше порога (экспериментально подобранного создателями программы и зависящего от количества электронов), программа приостанавливается.

3. Упражнения

3.1. Наблюдение установления состояния равновесия в системе

Предлагается несколько раз запустить моделирование для того, чтобы удостовериться в том факте, что система приходит в равновесие.

В программе показаны графики:

- 1) График давления в наблюдаемой на экране системе (красный).
- 2) Усредненный по времени график давления в этой системе (зеленый).
- 3) Усредненный по ансамблю график давления в системах (синий).

По этим графикам можно оценить момент наступления равновесия в выбранной системе (см. критерий останова).

3.2. Исследование зависимости времени установления равновесия в системе от параметров

Примечание. Удобно одновременно выполнять упражнения 2 и 3. Поэтому проделайте сначала 1-2 раза эти упражнения и только затем выполняйте их.

Время наступления равновесия зависит от разных параметров, например, от количества электронов, радиусов атомов, начального расположения и направления начальных скоростей частиц. Чем более в начальный момент система далека от равновесного состояния, тем больше время его достижения. По умолчанию в программе начальные условия для частиц задаются случайным образом. Однако вы можете задавать начальное положение и начальную скорость каждой частицы с экрана. Примером сильно неравновесного состояния системы в начальный момент времени будет расположение частиц в малой по сравнению со всей доступной частицам области экрана. Предлагается исследовать, от каких параметров и как зависит время наступления равновесия. Выберите 2 набора начальных условий, при которых времена установления равновесия будут сильно отличаться (в 5-10 раз). Запишите эти времена и соответствующие начальные условия, так как для них вы будете выполнять упражнение 3.

3.3. Сравнение средних давлений (по ансамблю и по времени)

Как уже было сказано, после установления равновесия в системе программа останавливается. Однако моделирование можно продолжить, снова нажав на клавишу "Запуск". Вы увидите, что средние давления по ансамблю и по времени сближаются. Можно посмотреть и качественно оценить, через какое время они начнут совпадать.

4. Требования к оформлению отчёта

Решение практического задания должно быть оформлено в виде отчета, содержащего указание на авторство, конкретное задание, данное преподавателем, и результаты измерений (в виде краткого текста, графиков, таблиц).