

Projekat iz predmeta

13E063SF Statistička fizika

Elektrotehnički fakultet u Beogradu

Jednostavan model uspostavljanja termodinamičke ravnoteže

Posmatra se idealan gas identičnih, bezstrukturnih čestica, konfiniran u zatvorenu, savršeno izolovanu posudu. Neka je posuda pregradom podeljena na dva dela (dve particije) identičnih zapremina i neka se na početku svih N čestica idealnog gasa nalazi u levoj particiji posude. Na pregradi koja deli posudu na dve particije nalazi se mali otvor kroz koji čestice mogu da prelaze iz jedne particiju u drugu.

Pitanje 1: Kakva je očekivana raspodela čestica posle dovoljno dugačkog vremenskog intervala?

Složeni model dinamike čestica podrazumevao bi praćenje svake čestice, rešavanje jednačina njihovog kretanja, međusobnih sudara, kao i sudara sa zidom posude. Složenost ovog modela raste sa povećanjem broja čestica. Projekat se bavi pojednostavljenim modelom koji opisuje uspostavljanje termodinamičke ravnoteže.

Prva pretpostavka modela je da se međusobna interakcija između čestica zanemaruje (idealni gas), tj. da svaka čestica ima podjednaku verovatnoću po jedinici vremena da prođe kroz otvor na pregradi i pređe iz jedne particije u drugu. Dalja simplifikacija modela podrazumeva da se neće pratiti pozicija svake pojedinačne čestice u toku vremena, već će od interesa samo biti ukupan broj čestica u datom trenutku vremena u svakoj od particija. Stavise, dovoljno je pratiti broj čestica u (recimo) levoj particiji $n(t)$, dok će broj čestica u desnoj particiji u datom trenutku biti $N - n(t)$. Algoritam treba da iterativno posmatra dinamiku broja čestica po particijama u vremenskim koracima Δt koji treba da odgovaraju prosečnom vremenu koje je potrebno da čestica pređe iz jedne particije u drugu, što naravno zavisi od raznih parametara sistema, pre svega od temperature. Radi jednostavnosti, vremenska skala će biti posmatrana u inkrementima vremenskog koraka Δt . Premeštanje čestica može biti modelovano slučajnim izborom jedne čestice i njenim premeštanjem u drugu particiju. Ukoliko se u posmatranom vremenskom trenutku u levoj particiji nalazi $n(t)$ čestica, verovatnoća da će biti izabrana čestica iz ove particije (i premeštena u desnu particiju) iznosi $n(t)/N$. Na ovaj način, algoritam se može svesti na par jednostavnih koraka:

- Postaviti čestice u početnu poziciju: svih N čestica se nalazi u levoj particiji;
- Generisati slučajni broj r između 0 i 1;
- Ako je $r \leq n(t)/N$, čestica se pomera iz leve particije u desnu: $n(t + \Delta t) = n(t) - 1$, u suprotnom čestica se premešta iz desne particije u levu: $n(t + \Delta t) = n(t) + 1$;
- Prethodna dva koraka se iterativno ponavljaju u dovoljno velikom broju vremenskih koraka.

Pitanje 2: Napraviti programski kod koji za $N = 200$ čestica simulira opisani algoritam. Uzeti dovoljno veliki broj iteracija (vremenskih koraka) za koje će sistem ući u ravnotežno stanje. Prikazati grafik zavisnosti procenta čestica u levoj particiji u funkciji vremena (vremenskih koraka simulacije). Prokomentarisati dobijeni grafik u smislu datog odgovora na **Pitanje 1**.

Odrediti fluktuaciju (standardno odstupanje) procenata broja čestica u levoj particiji u stacionarnom stanju.

Pitanje 3: Povećati ukupan broj čestica na $N = 1000$. Ponoviti simulaciju iz prethodnog pitanja za tri različita početna uslova: broj čestica u levoj particiji na početku iznosi $n(0) = 990, 500$ i 10 . Na istom grafiku prikazati zavisnosti procenta čestica u levoj particiji u funkciji vremena (vremenskih

koraka simulacije) za sva tri slučaja početnih uslova (linije nacrtati različitim bojama i na grafik ubaciti legendu).

Određiti fluktuaciju (standardno odstupanje) procenata broja čestica u levoj particiji u stacionarnom stanju za dinamiku dobijenu iz prvog početnog uslova. Komentarisati dobijenu vrednost u odnosu na vrednost iz prethodnog pitanja. Komentarisati “memoriju” sistema, odnosno sposobnost sistema da “pamti” svoju istoriju.

Pitanje 4: Ispitati dinamike sistema za 8 različitih vrednosti ukupnog broja čestica $N = 20, 200, 500, 1000, 2500, 5000, 10000$ i 20000 . Za svaku od pomenutih vrednosti, uzimajući početni uslov da su u trenutku $t = 0$ sve čestice u levoj particiji, nacrtati na zasebnim graphicima zavisnosti procenta čestica u levoj particiji u funkciji vremena (vremenskih koraka simulacije). Grafike složiti kao 4×2 matricu.

Za svaku od dobijenih dinamika (za svaku vrednost ukupnog broja čestica) izračunati fluktuaciju (standardno odstupanje) procenata broja čestica u levoj particiji u stacionarnom stanju. Na osnovu ovog rezultata, prikazati grafik zavisnosti ove fluktuacije od ukupnog broja čestica.

Procesom fitovanja (metodom najmanjih kvadrata) kroz dobijene podatke provući teorijski očekivanu funkciju. Obrazložiti izbor funkcije. Na istom grafiku crvenim markerima prikazati dobijenu zavisnost fluktuacije od ukupnog broja čestica, a punom, plavom linijom fitovanu funkciju.

Izveštaj sa urađenim projektom treba da na naslovnoj strani sadrži naslov “PROJEKTNI ZADATAK IZ STATISTIČKE FIZIKE, Elektrotehnički fakultet u Beogradu, školska 20xx/xx godina”, kao i ime, prezime i broj indeksa studenta. Projekat se predaje mejlom, predmetnom nastavniku Marku Krstiću, kao .pdf dokument.

Tekst projektnog zadatka treba da sadrži odgovore na postavljena pitanja, tražene grafike, diskusiju dobijenih rezultata i programski kod u programskom jeziku po izboru, sa komentarima linija/segmenata programskog koda koji detaljno objašnjavaju linije/segmente programskog koda. Svi grafici treba imaju detaljno obeležene ose (veličina koja se prikazuje na osi i odgovarajuće merne jedinice) i odgovarajuće naslove.