

Model termodinamičke rešetke

Makroskopski fenomeni u idealnom gasu se uvek mogu simulirati kao više-čestični sistemi, međutim ovakav pristup je prilično „skup“. Ideja ovog rada je aproksimiranje gasa rešetkom termodinamičkih sistema koji razmenjuju čestice i toplotu sa susednim sistemima, odnosno ćelijama. U konkretnom slučaju 2D gas je modeliran kvadratnom rešetkom. Model je testiran jednačinom difuzije.

1. Ideja. Posmatrajmo zatvoreni termodinamički sistem (gas) sa konstantnim brojem čestica u svakom podsistemu konstantne zapremine. Neka se, usled delovanja spoljašnjih faktora, temperatura svake tačke sistema menja po poznatoj funkciji $T = T(\mathbf{r}, t)$ gde je \mathbf{r} radijus-vektor posmatrane tačke a t vreme. Početno stanje sistema karakteriše početna raspodela koncentracije $n(\mathbf{r}, 0)$. Ideja ovog rada je da se posmatra evolucija funkcije raspodele tokom vremena, tj. evolucija sistema. Realna dešavanja u gasu su predstavljena sledećim modelom:

2. Model termodinamičke rešetke. Neka je V deo prostora u kome se nalazi gas. Izdelimo V na $n \in \mathbb{N}$ disjunktnih delova V_1, V_2, \dots, V_n (dakle $V = V_1 + V_2 + \dots + V_n$) koje ćemo nazvati ćelije.

Neka je $\mathbb{V} = \{V_1, V_2, \dots, V_n\}$ skup svih ćelija.

Svaku ćeliju V_i karakteriše (srednja) koncentracija čestica u toj ćeliji $n_i(t)$ i temperatura te ćelije $T_i(t)$.

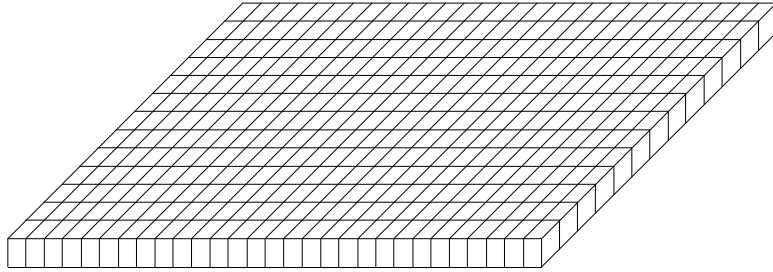
Neka je $\mathbb{N} = \{n_i(0) \mid i = 1, 2, \dots, n\}$ skup početnih uslova a $\mathbb{T} = \{T_i(t) \mid i = 1, 2, \dots, n\}$ skup funkcija temperatura.

Zatim, definišemo binarnu relaciju direktne povezanosti π nad skupom $\mathbb{V} \times \mathbb{V}$. $(V_i, V_j) \in \pi$ čitamo: ćelija V_i je direktno povezana sa ćelijom V_j .

Sada za svake dve direktno povezane ćelije $V_i, V_j \in \pi$ možemo da definišemo pravilo prelaska $P_{i,j} = P_{i,j}(n_i, T_i, \Delta t)$ po kome se menja koncentracija čestica u V_i i V_j u vremenskom intervalu $(t, t + \Delta t)$.

Neka je $\mathbb{P} = \{P_{ij} \mid (V_i, V_j) \in \pi\}$ skup svih pravila prelaska.

*Vanević Mihajlo (1978),
Beograd, učenik 3. razreda
matematičke gimnazije u Beogradu*



Slika 1.
Oblik rešetke.

Figure 1.
Lattice Outlook

Skupovi V , N , T i P potpuno određuju evoluciju $n_i(t)$, tj. model termodinamičke rešetke je uređena četvorka (V, N, T, P) .

3. Realizacija modela. Realizovan je specijalan slučaj modela termodinamičke rešetke, tzv. kvadratna rešetka sa $50 \times 50 = 2500$ ćelija, numerisanih kao $V_{i,j}$, $(i, j) \in \{1, 2, \dots, 50\}^2$.

Oblik rešetke prikazan je na crtežu (slika 1). Ćelije su povezane po principu najbližih suseda u vrsti i koloni, tj. ćelija $V_{i,j}$ je direktno povezana sa ćelijama $V_{i-1,j}$, $V_{i+1,j}$, $V_{i,j-1}$, $V_{i,j+1}$ (ako postoje). (3) Takođe, uzeto je $V_{i,j} = V_0$, $(i, j) \in \{1, 2, \dots, 50\}$, tj. sve ćelije su iste.

Pravilo prelaska čestica iz ćelije $V_{i,j}$ u susednu ćeliju $V_{k,l}$ označimo sa $P_{i,j \rightarrow k,l}$ i možemo ga dobiti na sledeći način:

Srednja brzina kretanja čestica u ćeliji $V_{i,j}$ na temperaturi $T_{i,j} = T_{i,j}(t)$ je $v_{i,j}(t) \sim \sqrt{T_{i,j}(t)}$

Ako pretpostavimo da su svi pravci kretanja čestice jednako verovatni, dobijamo

$$P_{i,j \rightarrow k,l} : \Delta n_{i,j} = -\Delta n_{k,l} \sim -n_{i,j} \bar{v}_{i,j} \Delta t \sim -n_{i,j} \sqrt{T_{i,j}} \Delta t$$

$$P_{i,j \rightarrow k,l} : \Delta n_{i,j} = -\alpha n_{i,j} \sqrt{T_{i,j}} \Delta t$$

$$\Delta n_{k,l} = \alpha n_{i,j} \sqrt{T_{i,j}} \Delta t$$

gde je $\alpha > 0$ konstanta ista za sve ćelije, pa je možemo „ubaciti“ u funkcije, tj. pisati ih u obliku:

$$P_{i,j \rightarrow k,l} : \Delta n_{i,j} = -n_{i,j} \sqrt{T_{i,j}} \Delta t$$

$$\Delta n_{k,l} = n_{i,j} \sqrt{T_{i,j}} \Delta t$$

(1)

gde sada pod $T_{i,j}(t)$ podrazumevamo samu funkciju $T_{i,j}(t)$ pomnoženu konstantom α^2 . *

Uočimo da svaka primena pravila $P_{i,j \rightarrow k,l}$ smanjuje koncentraciju u $V_{i,j}$ za isti iznos, a pravila $P_{k,l \rightarrow i,j}$ povećava koncentraciju u $V_{i,j}$. Dakle, ukupna promena koncentracije u $V_{i,j}$ u intervalu $(t, t + \Delta t)$ je:

* Ovde $\Delta n_{i,j}$ i $\Delta n_{k,l}$ ne treba shvatati kao ukupne promene koncentracije u $V_{i,j}$ i $V_{k,l}$ – već vezano za pravilo $P_{i,j \rightarrow k,l}$ kao promenu koncentracije $V_{i,j}$ i $V_{k,l}$ zbog prelaska čestica iz $V_{i,j}$ u $V_{k,l}$. Ukupna promena koncentracije data je u (2).

$$\frac{\Delta n_{i,j}}{\Delta t} = -4 n_{i,j} \sqrt{T_{i,j}} + n_{i-1,j} \sqrt{T_{i-1,j}} + n_{i+1,j} \sqrt{T_{i+1,j}} + n_{i,j+1} \sqrt{T_{i,j+1}} \quad (2)$$

gde je:

$$\Delta n_{i,j} = n_{i,j}(t + \Delta t) - n_{i,j}(t), \quad n_{i,j} = n_{i,j}(t), \quad T_{i,j} = T_{i,j}(t),$$

$$(i, j) \in \{1, 2, \dots, 50\}^2$$

Jednačina (2) napisana je za ćeliju koja ima sva 4 suseda; ćelija na ivici sa 3, tj. 2 suseda imaće nešto drugačiju jednačinu: koefijent uz na desnoj strani će biti -3 , tj. -2 i dalje će biti još 3, tj. 2 sabirka koji odgovaraju postojećim susedima od $V_{i,j}$.

Jednačina (2) za relativno malu fiksnu vrednost Δt daje osnov za računarsku simulaciju kojom se računaju vrednosti $n_{i,j}(k \Delta t)$, $k \in \mathbb{N}$ u zavisnosti od $n_{i,j}(0)$ i $T_{i,j}(t)$, $(i, j) \in \{1, 2, \dots, 50\}^2$.

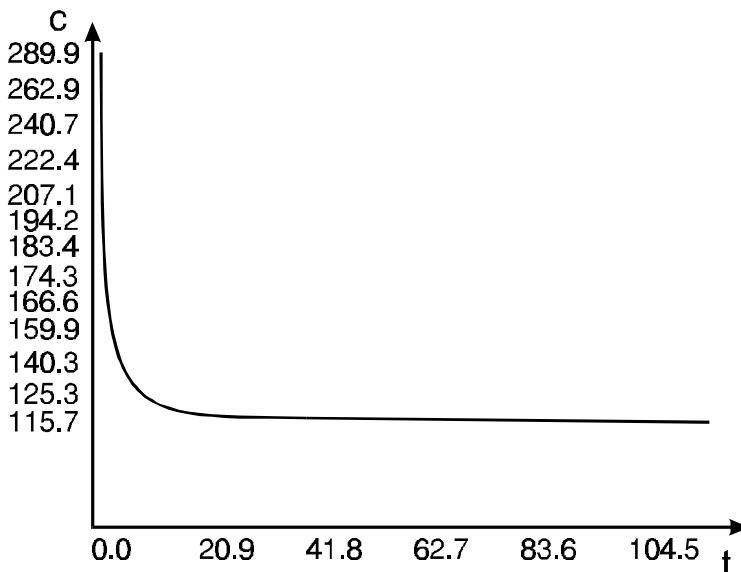
Računarska simulacija napisana je u programskom jeziku PASCAL.

4. Testiranje modela. Model je testiran za slučajeve $T_{i,j}(t) = \text{const}$:

1) $T_{i,j} = T$, $n_{i,j}(0) = n$, tj. sve temperature i sve koncentracije su jednake. Uočeno je da je i $n(i,j) = n$, tj. sistem je u ravnoteži.

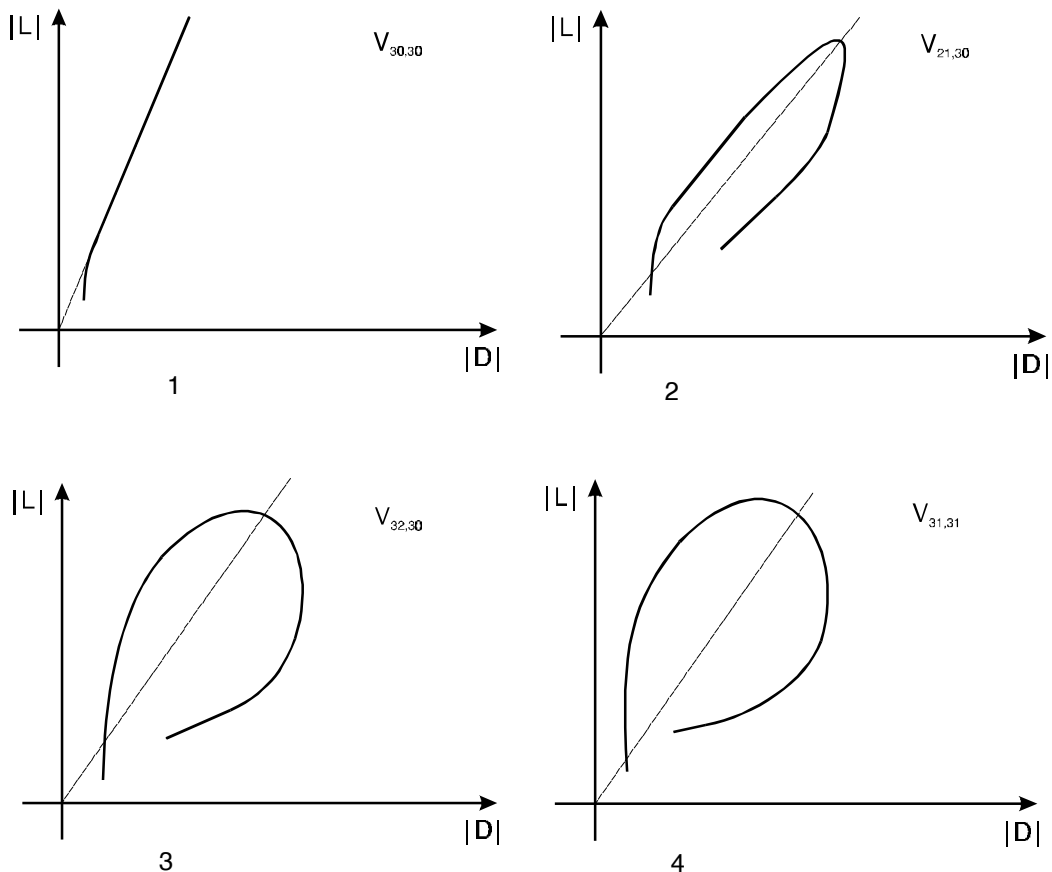
2) $T_{i,j} = T_1$, $T_{i,j} = T_2 < T_1$, $i = 2, 3, \dots, 50$ i $n_{i,j}(0) = n$, tj. prva kolona ćelija drži se na većoj temperaturi od ostalih. Uočeno je da dolazi do preraspodele koncentracija u ćelijama tako da koncentracija raste sa udaljavanjem od prve kolone.

3) $T_{i,j} = T$, $n_{i,j}(0) = n_1$, $(i, j) \in \{1, 2, \dots, 50\}^2 \setminus \{(30, 30)\}$, $n_{30,30}(0) = n_2 > n_1$, tj. ćelija $V_{30,30}$ ima veću početnu koncentraciju od ostalih.



Slika 2.
Zavisnost
koncentracije od
vremena.

Figure 2.
Concentration
dependence on time



Uočeno je da se „višak“ koncentracije u preraspoređuje u okolne ćelije i da sistem teži stanju $n_{i,j}(t)$ gde sve ćelije imaju istu koncentraciju. Konkretno za vrednosti $T_{i,j} = 1$, $n_{i,j}(0) = 100$ ($i, j \in \{1, 2, \dots, 50\}^2 \setminus \{(30, 30)\}$) i $n_{30,30} = 300$, dobijen je grafik 1 zavisnosti koncentracije u $V_{30,30}$ od vremena (slika 2).

Osnovni testovi 1) – 3) su pokazali da se model (intuitivno) dobro ponaša, tj. uvek teži nekom ravnotežnom stanju. Ovde je trebalo proveriti i fizičku primenljivost modela. U tom cilju testirano je da li na modelu važi jednačina difuzije za dvodimenzionalni gas:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} \sim \frac{\partial n}{\partial t} \quad (3)$$

Postavljeno je početno stanje $T_{i,j} = 1$, $n_{i,j}(0) = 100$, ($i, j \neq (30, 30)$) i $n_{30,30}(0) = 300$. Drugi izvodi koncentracije u (3) predstavljeni su u vidu

Slika 3.

Parametarska zavisnost leve (L) od desne (D) strane u relaciji (4):

1. (i, j) = (30, 30)
2. (i, j) = (31, 30)
3. (i, j) = (32, 30)
4. (i, j) = (31, 31).

Pošto je za naše razmatranje bitan samo izgled grafika, brojne vrednosti nisu naznačene.

Figure 3.

Parametric dependence of left and right side in relation (4)

konačnih razlika tj. kao $\frac{\Delta^2 n}{h^2}$, gde je h konstanta koja karakteriše dimenziju

ćelije. Tako se (3) svodi na:

$$\Delta^2 n_{\text{po vrsti}} + \Delta^2 n_{\text{po koloni}} \sim \frac{\Delta n}{\Delta t}, \text{ tj.}$$

$$\left[(n_{i+2,j} - n_{i+1,j}) - (n_{i+1,j} - n_{i,j}) \right] + \left[(n_{i,j+2} - n_{i,j+1}) - (n_{i,j+1} - n_{i,j}) \right] \sim$$

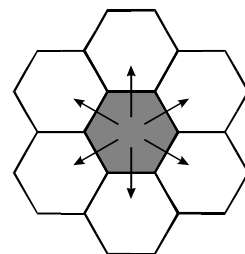
$$\sim \frac{n_{i,j}(t + \Delta t) - n_{i,j}(t)}{\Delta t}$$

$$n_{i+2,j} + n_{i,j+2} - 2n_{i+1,j} - 2n_{i,j+1} + 2n_{i,j} \sim \frac{n_{i,j}(t + \Delta t) - n_{i,j}(t)}{\Delta t} \quad (4)$$

Grafici 1–4 (slika 3) predstavljaju zavisnost leve strane u (4) označene sa L od desne strane u (4) označene sa D, tokom vremena, za $(i,j) = (30,30)$, $(i,j) = (31,30)$, $(i,j) = (32,30)$, $(i,j) = (31,31)$, redom. Kako znak \sim u ovoj relaciji označava proporcionalnost, očekujemo linearnu zavisnost veličina L i D. Nažalost, numerički eksperiment kazuje drugačije.

Grafik 1 na slici 3 je vrlo linearan, dakle jednačina difuzije važi za ćeliju $V_{30,30}$. Grafik 2 već nije linearan, a grafik 3 još više odstupa od prave – dakle jednačina difuzije se sve više narušava sa udaljenjem od $V_{30,30}$. Grafik 4 koji se odnosi na $V_{31,31}$ po obliku je bliži grafiku 3 nego grafiku 2. To je i razumljivo s obzirom na povezanost ćelija: ćelija $V_{31,30}$ je direktno povezana sa $V_{30,30}$, dok ćelije $V_{32,30}$ i $V_{31,30}$ nisu (dakle potrebne su po dve iteracije dok čestice iz $V_{30,30}$ pređu u $V_{31,31}$ i $V_{32,30}$, bez obzira što je $V_{31,31}$ bliže $V_{30,30}$ nego što je to $V_{32,30}$).

5. Zaključak. Model se dobro ponaša (u smislu da uvek teži nekom ravnotežnom stanju) ali ne zadovoljava jednačinu difuzije za dvodimenzionalni gas. S obzirom na analizu grafika na slici 3 izgleda da je problem u povezanosti ćelija (tj. upravo u tome što ćelije $V_{i+1,j+1}$ i $V_{i+1,j}$ nisu ravnopravne u odnosu na $V_{i,j}$). Ovo se verovatno može prevazići uvođenjem šestouganih ćelija (slika 4), kada su očigledno sve ćelije koje okružuju uočenu ćeliju ravnopravne. Ovakav pristup u prethodnom modelu promenio bi relaciju povezanosti, a pravilo prelaska važilo bi gotovo bez izmene.



Slika 4.
Uvođenjem šestouganih umesto kvadratnih ćelija, postiglo bi se da svi susedi neke ćelije budu u ravnopravnom položaju.

Figure 4.
Invoking of hexagonal instead of square cells would probably set more even conditions for the neighbourghs.

Mihajlo Vanević

Thermodynamic lattice model

Macroscopic phenomena in ideal gas can be simulated as many-body systems, however this approach is too expensive. The main idea of this work is approximation of gas by lattice of thermodynamic systems which exchange particles and heat with neighbour systems, i.e. cells. In this case 2D gas is modeled by square lattice. The model is tested by diffusion equation.

