

Mihajlo Vanević

Model termodinamičke rešetke

U Petničkim sveskama br. 42 (Vanević 1997) opisan je jednostavan model termodinamičke rešetke (TDR) koji je testiran jednačinom difuzije i koji je na tom testu dao negativne rezultate. Ovde će biti izložene neke popravke prvobitnog modela i rezultati koje popravljeni model daje na starim i novim testovima.

Novi model TDR

Novi model TDR je suštinski isti kao prvobitni model TDR, osim što je pri testu važenja jednačine difuzije izabrana nova, glatkija početna raspodela koncentracije. Na graficima (slika 1) prikazane su početna raspodela koncentracije i raspodela koncentracije nakon vremena $t = 100$.

Za generisanje ove raspodele izabrana je funkcija oblika

$$n(r) = n_0 + (n_{\max} - n_0) e^{-|r - r_{(30,30)}|}$$

Model je testiran jednačinom difuzije

$$L = \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} \propto \frac{\partial n}{\partial t} = D \quad (1)$$

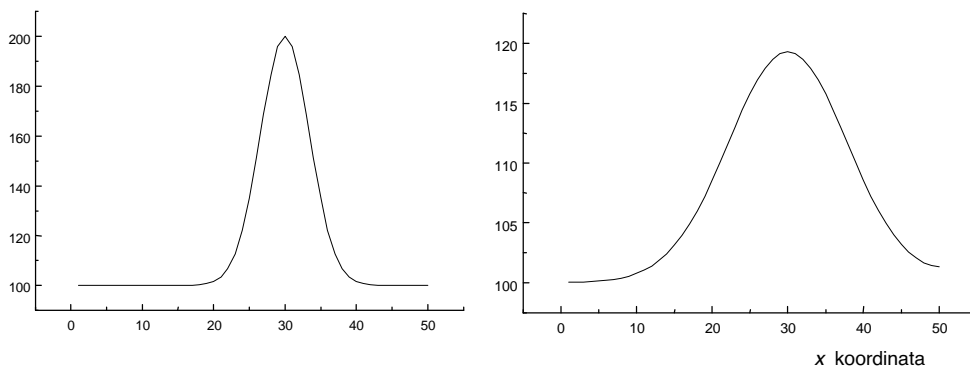
i pri tom su dobijeni grafici zavisnosti desne strane jednačine (D) od leve strane (L) dati na slici 3.

Prikazani grafici predstavljaju ekstremne slučajeve: jedan je potpuno linearan (koeficijent korelacije je 1.000 (!)), dok drugi značajnije odstupa od prave (koeficijent korelacije je 0.798) Grafici zavisnosti D od L u ostalim tačkama su negde između ova dva: manje su linearni od prvog, a više od drugog. U svakom slučaju, kada se ovi grafici uporede sa odgovarajućim graficima dobijenim prvobitnim TDR modelom (Vanević 1997) vidi se da je od velikog značaja da početna funkcija raspodele koncentracije bude glatka. Pošto je taj efekat u novom modelu isključen, zaključak je da nelinearnost grafika u novom modelu (verovatno) potiče samo od loše povezanosti ćelija. Da bi se i taj efekat umanjio, bez promene povezanosti, uvedene su još dve modifikcije:

1. Pri računanju izvoda koncentracije po koordinati na levoj strani jednačine difuzije (L) korišćena je formula:

Mihajlo Vanević (1978), Beograd, Nikšićka 13, učenik 4. razreda Matematičke gimnazije u Beogradu

D O P U N E



Slika 1. Grafik zavisnosti koncentracije od x-koordinate; $y = 30$, $t = 0$ (levo) i $t = 30$ (desno)

$$\frac{\partial n}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial n}{\partial x_+} + \frac{\partial n}{\partial x_-} \right), \quad (2)$$

tj. usrednjava se po levom i desnom izvodu i

2. Definiše se efektivna koncentracija n_{eff} na sledeći način:

$$n_{eff}(i,j) = \frac{\sum n(p,q)}{(2k+1)^2} \quad (3)$$

$$(p = \overline{i-k, i+k}, q = \overline{j-k, j+k}),$$

tj. usrednjava se koncentracija u kvadratu dimenzija $k \times k$ sa centrom u tački (i,j) . Veličina k ne sme biti velika jer se tada slika dešavanja suviše ogrubljuje (u našem slučaju uzeto je $k = 1$).

Korišćenjem prethodne dve modifikacije dobijeni su vrlo linearni grafici (slika 3). Radi poređenja sa prethodnim slučajem, navodimo grafike zavisnosti desne strane difuzione jednačine (D) od leve strane (L) za iste tačke (30, 30) i (28, 27):

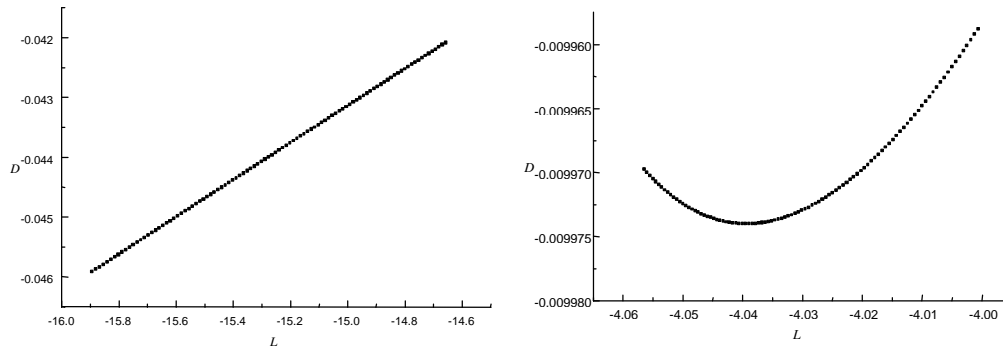
Koeficijent korelacije u tački (30, 30) je, i posle usrednjavanja datih formulama

(2) i (3), ostao 1, dok je, u tački (28, 27) on porastao sa 0.798 na 0.9992 (!). Dakle, model TDR je zadavanjem glatke početne raspodele koncentracije i usrednjavanjima datih formulama (2) i (3) značajno popravljen. Dalje, testiranje modela pokazalo je da je zavisnost D od L u svakoj tački linearna, ali da koeficijent srazmenosti (tzv. koeficijent difuzije) varira od tačke do tačke i to za najviše 10%.

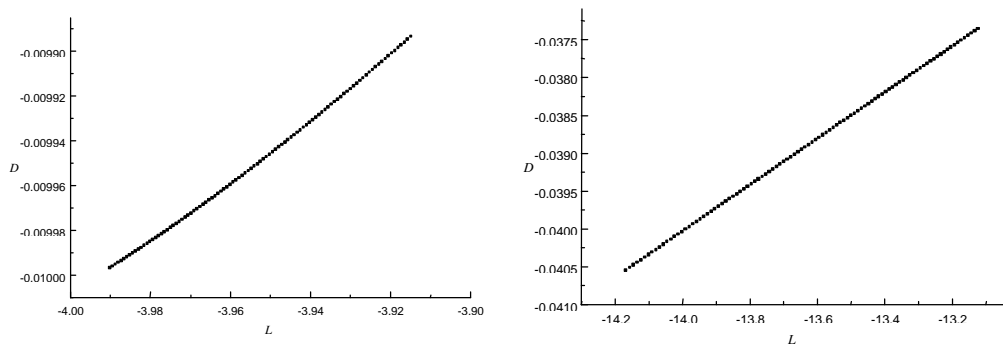
Izvršimo još jedan test na modelu: test zavisnosti brzine udarnog fronta koncentracije od korena temperature. Udarni front koncentracije je u početnom trenutku postavljen tako da je koncentracija duž y-ose konstantna. Raspodela koncentracije duž x-ose je glatka funkcija i prikazana je na graficima u trenutku $t = 0$ i u trenutku $t = 100$ (slika 4).

Pomeraj vrha udarnog fronta u zavisnosti od vremena, u dva ekstremna slučaja, prikazuju grafici na slici 5.

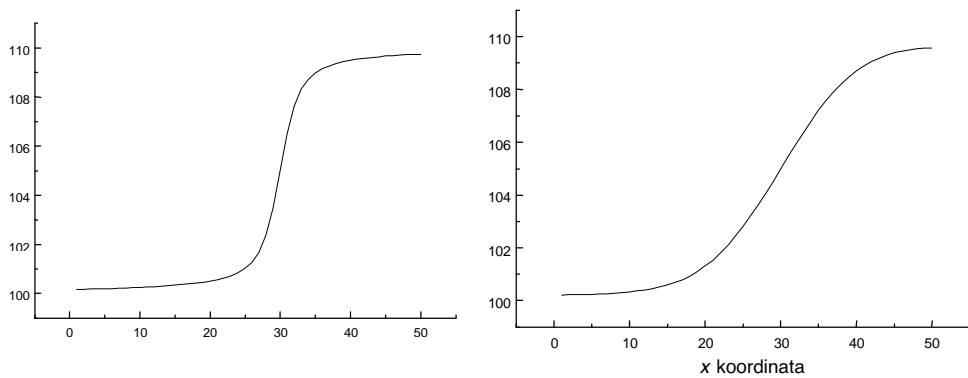
Y-osa se menja stepenasto zbog diskretnosti ćelija: broj pređenih ćelija mora biti celobrojan. Prvi grafik ima koeficijent korelacije 0.981 tj. vrlo je linearan, što znači da se vrh udarnog fronta koncentracije na tem-



Slika 2. Grafici zavisnosti D od L u tačkama (30, 30) – levo i (28, 27) – desno, dobijeni testiranjem modela jednačinom difuzije (1).

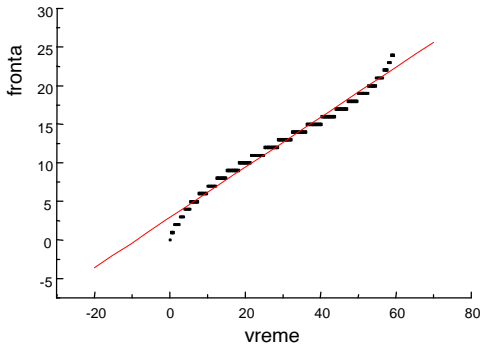


Slika 3. Grafici zavisnosti D od L u tačkama (28, 27) – levo i (30, 30) – desno, nakon modifikacija datih formulama (2) i (3).

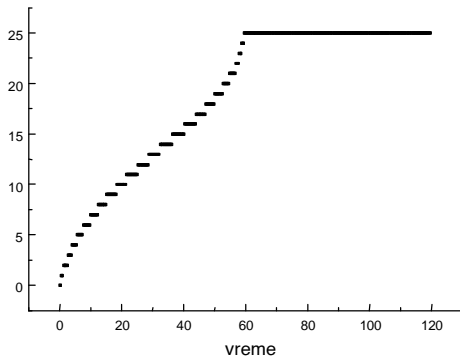


Slika 4. Zavisnost koncentracije od x -koordinate u trenutku $t = 0$ (levo) i $t = 100$ (desno).

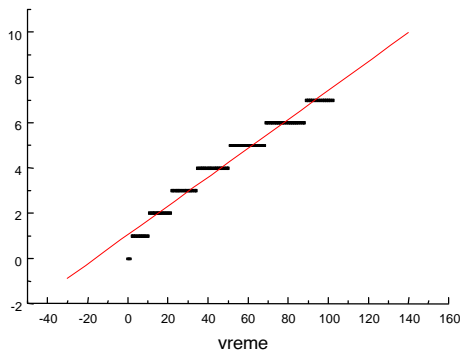
D O P U N E



Slika 5. Zavisnost pomeranja talasnog fronta od vremena pri $T = 1$ (gore) i $T = 81$ (dole).



Slika 6. Zavisnost pomeranja udarnog fronta od vremena; efekti krajeva se ne ispoljavaju značajno ($T = 81$).

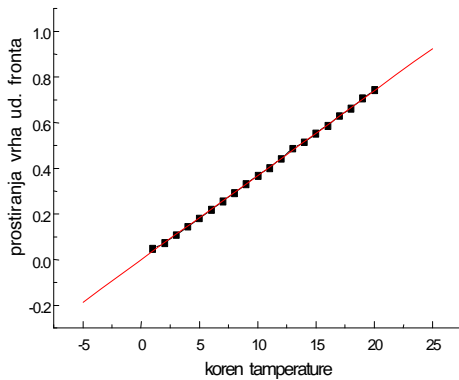


peraturi $T = 1$ kreće konstantnom brzinom. Na drugom grafiku vidimo da se pri temperaturi $T = 81$ brzina fronta uspostavlja nakon vremena $t = 10$, dok nakon vremena $t = 50$ front stiže do pred kraj TDR i počinju da se ispoljavaju efekti krajeva. Dakle pri određivanju zavisnosti brzine vrha udarnog fronta koncentracije od korena temperature, potrebno je uzeti samo one delove grafika na kojima se efekti krajeva ne ispoljavaju. To je urađeno za opseg temperatura od $T_{min} = 1$ do $T_{max} = 400$ (T_{max} je više od dva reda veličine veća od T_{min}). Radi poređenja, damo poslednji grafik u opsegu u kome se efekti krajeva ne ispoljavaju značajno (slika 6).

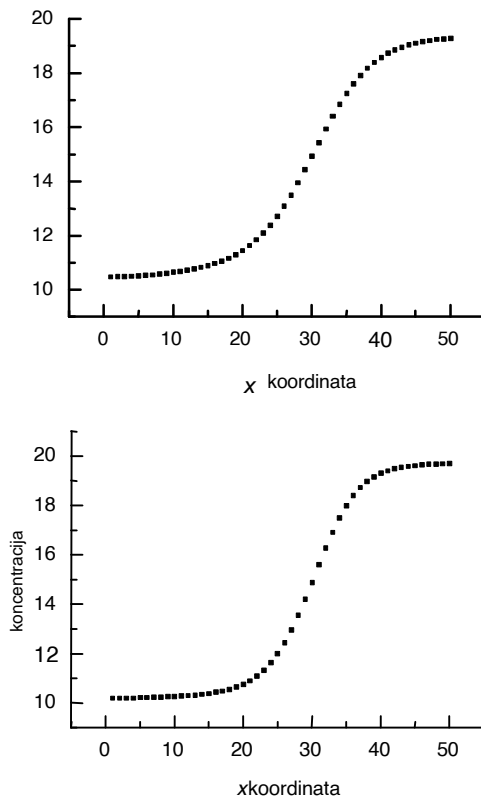
Dakle, eliminacijom graničnih efekata dobijamo da se udarni front kreće (približno) konstantnom brzinom (koeficijent korelacije poslednjeg grafika je 0.991). Brzina udarnog fronta u zavisnosti od korena temperature, za raspon temperatura $1 < T < 400$, data je grafikom na slici 7.

Koeficijent korelacije ovog grafika je 0.9998. Dakle, brzina prostiranja vrha udarnog fronta je zaista srazmerna korenu temperature, kao što smo i očekivali.

Prethodni testovi izvršeni su uz izotermiski uslov $T_{i,j} = \text{const}$. Navodimo još dva grafika koji opisuju evoluciju



Slika 7. Zavisnost brzine vrha udarnog fronta od korena temperature;
 $T_{ij} = \text{const}$, $0 < i, j < 50$.



Slika 8. Raspodjela koncentracije u trenutku $t = 0$ (gore) i $t = 3$ (dole).

sistema uz adijabatski uslov $pV = \text{const}$ (slika 8). Kako je zapremina svake ćelije konstantna, a $p_{ij}V \propto n_{ij}T_{ij}$, to se adijabatski uslov svodi na $T_{ij} = \text{const}/n_{ij}$.

Vidi se da udarni front postaje strmiji, što je posledica veće brzine fronta u oblasti veće koncentracije. I ovo se kvalitativno slaže sa teorijskim očekivanjem.

Zaključak

Ovde su opisane relativno jednostavne popravke koje značajno poboljšavaju prvobitni model TDR. Na poboljšanom modelu TDR-a mogu se pratiti svi relevantni gasni procesi u idealnom, razređenom gasu. Slični modeli mogli bi da reprezentuju i pojave kao što su turbulencija, difuzija, dešavanja u realnim gasovima pri ekstremnim uslovima itd., koje su teško ili potpuno nedostupne za teorijska i/ili eksperimentalna proučavanja.

Literatura

Vanević, M. 1997. Model termodinamičke rešetke. *Petničke sveske*, 42/I: 64

