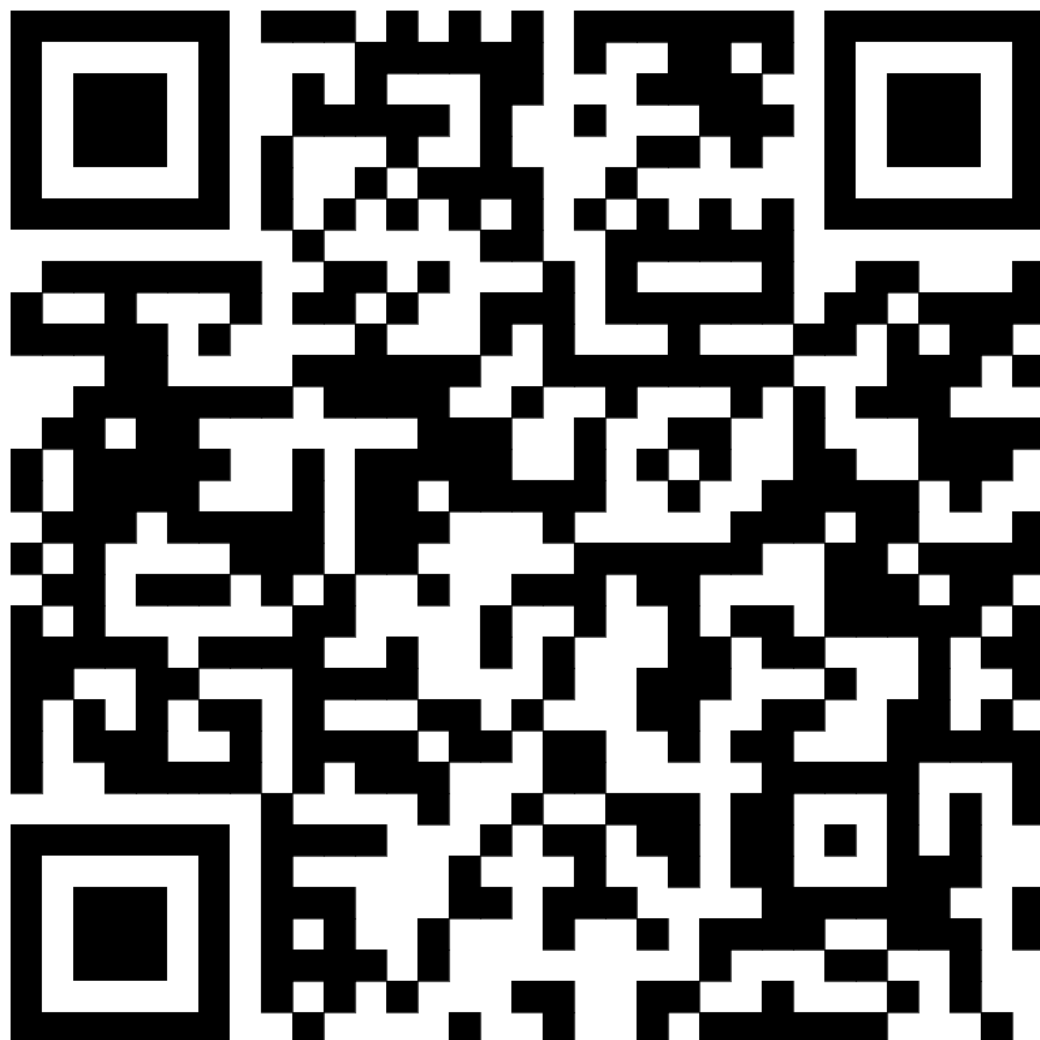


QR-код со ссылкой на диск с программой



Как запустить демонстрацию на macOS

Ниже показан один из возможных способов запуска программы на macOS. К сожалению, эта операционная система слишком дорожит своей безопасностью, поэтому перед запуском необходимо выполнить одну команду в программе с файлом. Для начала вам необходимо запустить терминал в папке с программой после разархивации, нажмите правой кнопкой по директории и выберите опцию "Открыть терминал в выбранной папке". Это показано на картинках

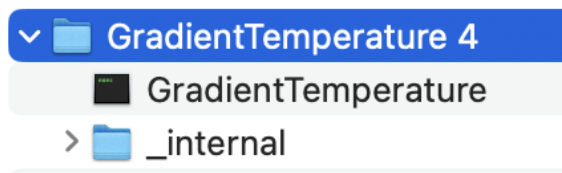


Рис. 1: *

Шаг 1. ПКМ по папке после разархивации

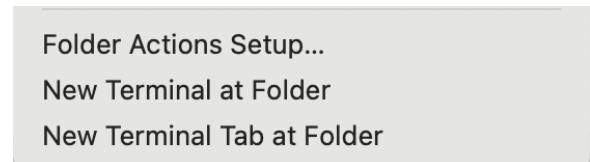


Рис. 2: *

Шаг 2. Почти в самом низу расположена кнопка

Затем вам необходимо запустить следующую команду

```
sudo xattr -cr .
```

После этого введите пароль пользователя. Закройте терминал. Можете запустить программу. Заметим! Первое открытие программы может занять у вас некоторое время, потому что программа подгружает все необходимые для работы библиотеки

Диффузия и теплоперенос в области с градиентом температуры: от моделирования частиц к стохастическим уравнениям

Вероятность — это честное признание в том, что нам не хватает информации, но мы всё равно хотим что-то посчитать.

из неформальных заметок по статистической физике

1 Постановка задачи и визуализация градиента температуры

Рассмотрим двумерную область, заполненную идеальным газом, с левой горячей и правой холодной стенкой. Температуры стенок фиксированы и равны T_ℓ и T_r . В численной демонстрации это прямоугольный сосуд, внутри которого движутся точечные частицы массы m .

1.1 Визуальное представление температуры

Температурный градиент мы наблюдаем через движение частиц:

- частицы, недавно столкнувшиеся с горячей стенкой, имеют большую скорость; их удобно выделять “горячими” цветами;
- частицы из холодной области движутся медленнее и помечаются “холодными” цветами;

Для наглядности в центр области помещают примесные частицы чёрного цвета. Начальное компактное пятно примеси затем расплывается, и по его форме видно, как диффузия реагирует на неоднородность среды. В каждый момент времени строится гистограмма распределения примеси по координате x ; по ней легко отслеживать смещение центра масс облака и рост дисперсии.

2 Микроскопическая модель газа

2.1 Движение и столкновения частиц

Модель представляет собой двумерный газ из N точечных частиц массы m . Между столкновениями частицы движутся прямолинейно и равномерно. Столкновения частиц между собой и со стенками сосудов считаются упругими.

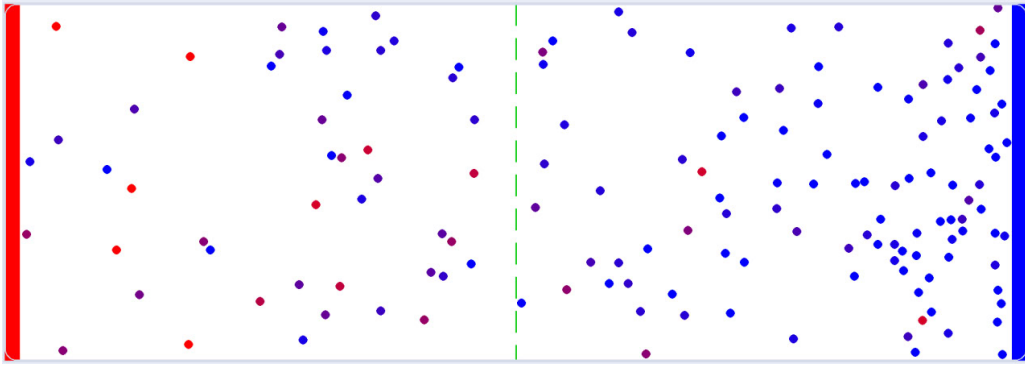


Рис. 3: Схема области и визуализация температурного градиента.

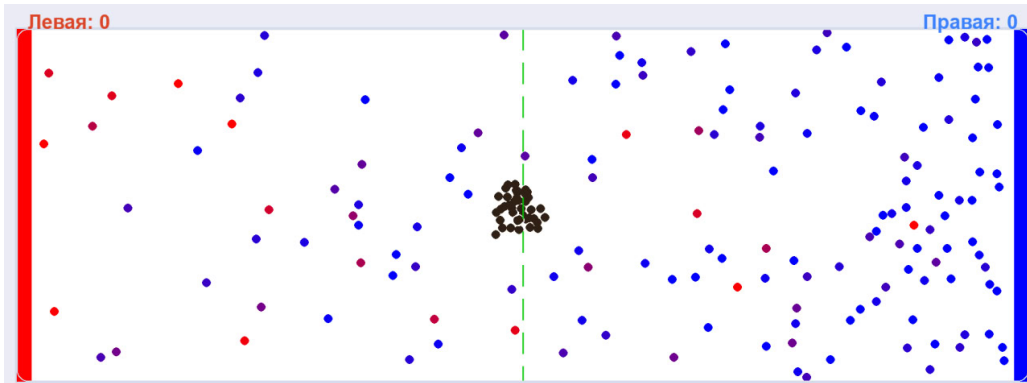


Рис. 4: Добавление частиц в центральную область.

Левые и правые стенки играют роль термостатов. При ударе частицы о стенку модуль её скорости переопределяется в соответствии с температурой этой стенки:

$$\frac{1}{2}mv^2 = kT_{\text{стенки}}, \quad (1)$$

где k – постоянная Больцмана. Направление скорости выбирается по закону отражения, а модуль подчиняется приведённому соотношению. Так реализуется тепловой контакт газа с границами. *В реальных процессах модуль скорости отразившейся от стенки частицы тоже является случайной величиной. В нашей упрощенной модели эта случайность быстро восстанавливается за счет соударений с окружающими частицами.*

3 Неоднородная диффузия и закон Фика

Если капнуть духами на границе тёплого и холодного воздуха, запах первым делом “голосует” за тёплую сторону.

из книжки FPAllbook

Рассмотрим примесные частицы (облако другого цвета), которые удобно описывать полем концентрации $n(x, t)$. При наличии градиента температуры коэффициент диффузии D зависит от координаты: $D = D(x)$. В одномерном приближении выполняется уравнение Фика

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial n}{\partial x} \right). \quad (2)$$

В кинетической теории диффузионный коэффициент связан с длиной свободного про-

бега λ и средней тепловой скоростью \bar{v} :

$$D \sim \lambda \bar{v}. \quad (3)$$

Для идеального газа $\bar{v} \propto \sqrt{T}$, так что в первом приближении

$$D(x) \propto T(x). \quad (4)$$

Отсюда следуют несколько важных эффектов.

- В горячей части области коэффициент диффузии больше, и облако примеси расплывается быстрее.
- На ранних временах распределение примеси оказывается слегка смещено в сторону большей диффузии: возникает дополнительный дрейф облака к более горячей части.
- Когда значительная часть примеси попадает в холодную область, там из-за меньшего $D(x)$ частицы задерживаются дольше; в стационарном режиме профиль концентрации смещён в сторону холодной стенки.

Изменение формы облака удобно отслеживать по гистограмме распределения по координате x , вычисляя положение центра масс и дисперсию.

Мини-комментарий: опыт с каплей духов

Представим мысленный эксперимент: капля духов находится на границе тёплого и холодного воздуха. Из-за того, что в тёплой области коэффициент диффузии больше, облако запаха сначала смещается в сторону тепла, и именно там наблюдатель почувствует запах раньше.

Ровно тот же эффект можно увидеть в нашей демонстрации: облако примеси, посаженное в центре, сначала демонстрирует дрейф в сторону более горячей части области, ещё до того, как существенная часть частиц достигнет границ.

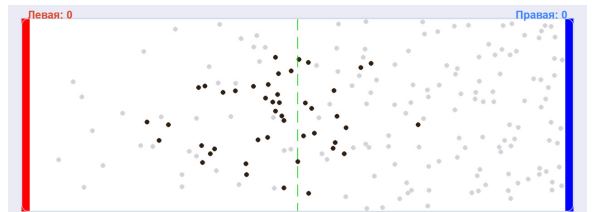
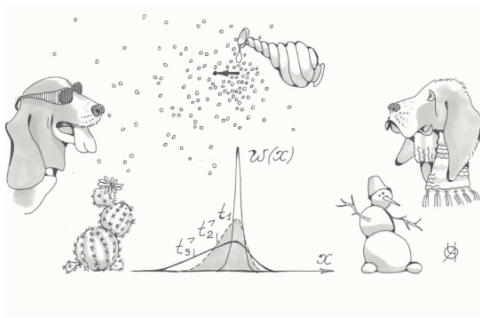


Рис. 5: Аналогия опыта с каплей духов и демонстрация дрейфа облака примеси на демонстрации.

4 Стохастические уравнения Ито и Стратоновича

Одинаковая формула с разными точками над интегралом способна породить два разных мира. Физики называют их Ито и Стратонович.

из лекции по стохастическому исчислению

Движение отдельной примесной частицы вдоль оси x в неоднородной среде удобно описывать стохастическим дифференциальным уравнением (СДУ) с белым шумом:

$$dx_t = a(x_t) dt + b(x_t) \circ dW_t, \quad (5)$$

где $a(x)$ – детерминированный дрейф, $b(x)$ задаёт амплитуду флуктуаций, а dW_t – приращение винеровского процесса. Кружок в записи означает интерпретацию **Стратоновича**.

Плотность вероятности $w(x, t)$ удовлетворяет уравнению Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(K_1(x) w) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(K_2(x) w). \quad (6)$$

Для приведённой формы СДУ при интерпретации Стратоновича кинетические коэффициенты имеют вид

$$K_2(x) = 2D b^2(x), \quad K_1(x) = -a(x) + D b(x) b'(x). \quad (7)$$

Дополнительный член $D b(x) b'(x)$ в дрейфе описывает *дополнительный* перенос к области большей диффузии, возникающий из-за неоднородности шумового множителя.

Для интерпретации **Ито** то же СДУ записывают как

$$dx_t = a_{\text{Ито}}(x_t) dt + b(x_t) dW_t, \quad (8)$$

и выражения для коэффициентов меняются:

$$K_1^{\text{Ито}}(x) = -a_{\text{Ито}}(x), \quad K_2^{\text{Ито}}(x) = 2D b^2(x). \quad (9)$$

Здесь дополнительного дрейфа в явном виде нет; его нужно закладывать непосредственно в функцию $a_{\text{Ито}}(x)$.

В задачах статистической физики и неравновесных процессов удобнее интерпретация Стратоновича: она соответствует пределу быстро меняющихся, но всё же конечновременных флуктуаций и автоматически даёт корректный дополнительный дрейф.

В нашей демонстрации эффект виден на уровне “облака частиц”: модельная диффузия с $D(x) \propto T(x)$ ведёт себя так, как прогнозирует анализ СДУ в форме Стратоновича.

5 Локальное уравнение состояния идеального газа

На макроскопическом уровне для идеального газа выполняется уравнение Менделеева–Клапейрона

$$pV = \nu RT. \quad (10)$$

Переходя к числу частиц N и концентрации $n = N/V$, получаем

$$p = nkT. \quad (11)$$

В демонстрации это уравнение можно проверить двумя способами.

5.1 Глобальное равновесие

Если температуры стенок равны ($T_\ell = T_r$), система после релаксации становится однородной: $n_{\text{лев}} \approx n_{\text{прав}}$, температура везде одинакова, и уравнение состояния выполняется для левой и правой половины сосуда с хорошей точностью.

5.2 Локальная форма закона

Рассмотрим тонкий слой шириной Δx в нашей области. Объём слоя равен

$$\Delta V = L_y \Delta x,$$

где L_y — высота области. Обозначим через $N(x)$ число частиц, находящихся в этом слое, а через $T(x)$ — локальную температуру, определяемую по средней кинетической энергии частиц:

$$\left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle_x = kT(x). \quad (9)$$

Тогда локальная концентрация

$$n(x) = \frac{N(x)}{\Delta V},$$

и локальное уравнение Менделеева–Клапейрона принимает вид

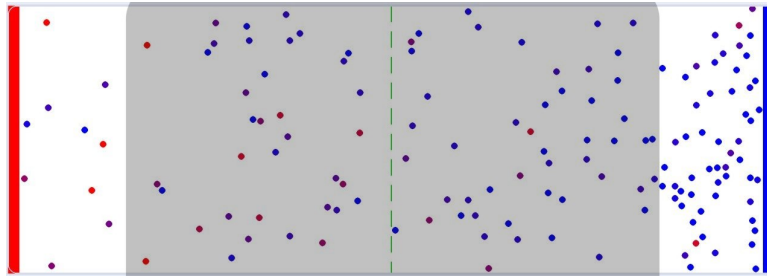


Рис. 6: Схематическое изображение областей, где выполняется локальное соотношение $p(x) = n(x)kT(x)$.

Именно эту зависимость можно проверять в численной модели:

- при равных температурах стенок $T_\ell = T_r$ после релаксации средние значения $n_{\text{лев}}$ и $n_{\text{прав}}$ совпадают, а значит, давления в левой и правой половинах сосуда одинаковы, и уравнение Менделеева–Клапейрона выполняется для каждой половины;
- при наличии градиента температуры $T(x)$ система остаётся в неравновесном стационарном состоянии, однако в малом объёме (тонком слое, где $T(x)$ и $n(x)$ мало меняются по координате) соотношение

$$p(x) \Delta V = N(x) kT(x)$$

остаётся справедливым по следующим соображениям: в холодной области больше число частиц, а горячей — температура, а их произведение остается постоянным.

Таким образом, модель позволяет наблюдать выполнение закона Менделеева–Клапейрона как в глобальном равновесном случае, так и в локальной форме для малых объёмов при наличии температурного градиента.

6 Длина свободного пробега и транспортные коэффициенты

Средняя длина свободного пробега в газе выражается как

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n}, \quad (12)$$

где d – эффективный диаметр частицы, n – локальная концентрация.

Вблизи горячей стенки и фактические пробеги вдоль траекторий оказываются длиннее. В холодной части области ситуация обратная: траектории “измельчают”, пробеги короче.

Для диффузионного коэффициента в трёхмерном газе справедлива оценка

$$D = \frac{\lambda \bar{v}}{3}, \quad (13)$$

а в двумерной модели множитель $1/3$ заменяется на $1/2$. Аналогичная по структуре формула существует для коэффициента теплопроводности:

$$\kappa = \frac{1}{3} \lambda c_V \rho \bar{v} \quad (14)$$

(в двумерном случае множитель также корректируется).

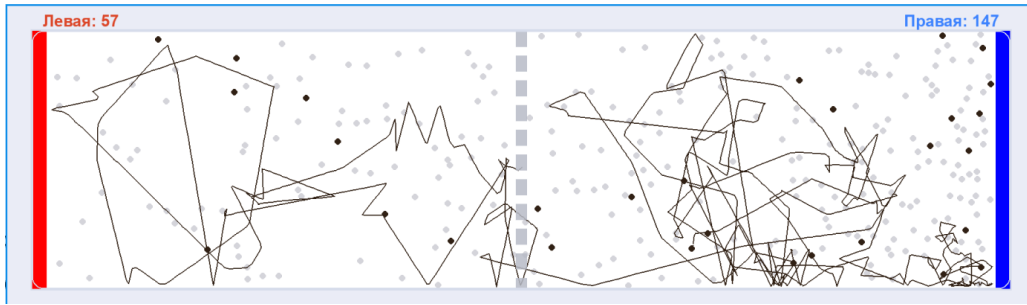


Рис. 7: Сравнение длины свободного пробега частиц в горячей и холодной областях.

7 Теплоток и закон Фурье

Помимо диффузии примеси, в системе идёт перенос энергии от горячей стенки к холодной. Удобно фиксировать вертикальную границу и считать поток энергии через неё.

Если частица массы m пересекает границу со скоростью v_x , её энергия

$$E = \frac{1}{2} m v^2. \quad (15)$$

Вклад частицы в поток энергии:

$$\Delta Q = \begin{cases} +E, & v_x > 0 \quad (\text{частица идёт слева направо}), \\ -E, & v_x < 0 \quad (\text{частица идёт справа налево}). \end{cases} \quad (16)$$

В кинетической теории тепловой поток определяется как

$$j_Q = \frac{\Delta Q}{\Delta t \Delta S}, \quad (17)$$

где ΔQ — количество энергии, пересекающей площадку ΔS за время Δt .

В нашей задаче же нет выделенного участка площади, через которую перелатают частицы, им является вся граница деления на левую и правую части, суммарный поток за время Δt равен

$$J_Q = \frac{1}{\Delta t} \sum_{i \in \Delta t} \Delta Q_i. \quad (18)$$

Численный эксперимент показывает:

- при $T_\ell = T_r$ средний поток $J_E \approx 0$, что соответствует равновесию;
- при $T_\ell \neq T_r$ устанавливается стационарный ненулевой поток с постоянным средним значением.

Это реализует закон Фурье:

$$j_Q = -\kappa \frac{dT}{dx}, \quad (19)$$

κ — коэффициент теплопроводности. По структуре этот закон полностью аналогичен уравнению Фика для диффузии: градиент температуры играет роль “движущей силы” переноса энергии.

8 Энтропия и неравновесное стационарное состояние

Опять же вспомним, что мы изучаем ситуацию, в которой добавляем примесь молекул в центр области и рассматриваем эффекты, которые при этом возникают. Для нормированной плотности примеси $p(x, t)$ энтропия определяется как

$$S(t) = - \int p(x, t) \ln p(x, t) dx. \quad (20)$$

- При равных температурах стенок система замкнута и со временем приходит к равномерному распределению и максимальной энтропии.
- При $T_\ell \neq T_r$ система открыта: горячая стенка подаёт энергию, холодная её отводит. В итоге устанавливается неравновесное стационарное состояние с постоянным потоком энергии и устойчивым температурным профилем.

Энтропия облака примеси растёт по мере его расплывания, но глобальный максимум недостижим, так как внешние источники постоянно поддерживают температурный градиент.

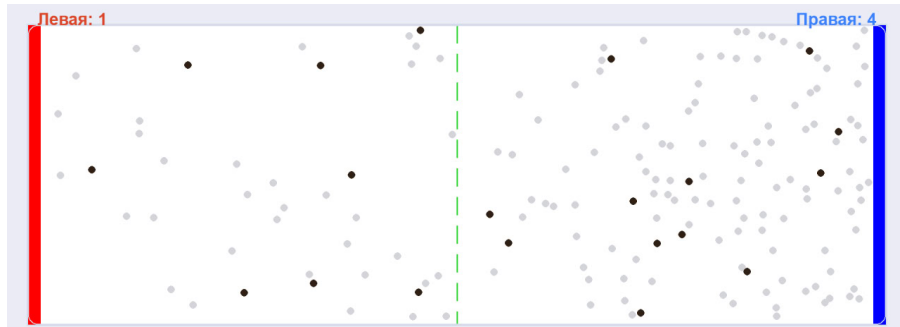


Рис. 8: Рост энтропии примеси и выход на стационарный режим.