

Yirui ZHANG

Supervisor: Dr. hab. Anna MACIOŁEK

May 17, 2021

Streszczenie

Rozprawa doktorska: Teoria i symulacje komputerowe układów wyprowadzanych ze stanów równowagi przez lokalne pompowanie energii.

Rozprawa poświęcona jest badaniom zagadnień fizyki nierównowagowej z punktu widzenia termodynamiki nierównowagowej. W szczególności, poszukiwana jest zasada wariacyjna wyznaczająca nierównowagowe stany stacjonarne (NESS) dla zamkniętych układów przez które przepływa ciepło. Jako alternatywa do będących przedmiotem sporu zasad maksymalnej/minimalnej produkcji entropii, powinna ona być prosta i oparta na mierzalnych wielkościach.

Główna część pracy poświęcona jest badaniu trzech hipotez, a dokładniej: trzech propozycji potencjałów nierównowagowych, dla których postawiona jest hipoteza, że mają być minimalizowane w NESS. Metodologia badania jest następująca: dla zupełnie ogólnego modelu testowego mierzymy proponowany nierównowagowy potencjał układu w obecności wewnętrznych więzów i porównujemy jego wartość z wartością po usunięciu więzów. W przypadku układów posiadających kilka stanów stacjonarnych, mierzymy potencjał dla każdego stanu stacjonarnego i porównujemy ich wartości. Hipoteza minimalizacji przewiduje, że potencjał dla układu z więzami jest większy niż dla układu bez więzów; w przypadku istnienia wielu stanów stacjonarnych, potencjał dla stabilnego stanu stacjonarnego jest najmniejszy ze wszystkich stanów stacjonarnych. (Dla przypadku hipotezy maksymalizacji, prognozy dotyczące zachowania są przeciwne.)

Pierwsza hipoteza dotyczy wielkości \mathcal{T} inspirowanej analizą wymiarową i zdefiniowanej jako stosunek zmagazynowanej energii (ponad energię stanu równowagowego) do całkowitego strumienia ciepła J_U dostarczanego do układu. Wielkość ta ma interpretację charakterystycznego czasu określającego szybkość rozpraszania energii w początkowej fazie powrotu układu do stanu równowagi. W przedłożonej rozprawie hipoteza ta jest szeroko testowana dla (1) modelu gazu doskonałego w pięciu trybach dostaw energii; (2) dla gazu doskonałego pod wpływem gradientu temperatury; (3) W przepływie Hagen-Poiseuille; (4) w modelu Isinga poddawany okresowym (w czasie) i przestrzennie niejednorodnym (lokalnym) dostawom energii. Ponadto, przedstawione są wyniki symulacji dynamiki molekularnej dla płynu Lennarda-Jonesa i dla układu Rayleigha-Bénarda

(zaczepnięte z pracy [1]¹). Wszystkie powyższe modele potwierdzają wysuniętą hipotezę. Niestety, ta obiecująca zasada wariacyjna nie uwzględnia sytuacji, w których, choćby w eksperymencie myślowym, do układu lokalnie podłączony jest zbiornik ciepła.

Aby uwzględnić takie sytuacje, druga hipoteza została oparta na wielkości, którą można nazwać "energiją zanurzoną" U^* , ponieważ jest to energia układu U pomniejszona o odpływ energii w charakterystycznym czasie $\tau = \partial U / \partial J_U$. Wielkość ta jest zdefiniowana jako transformacja Legendre'a energii stanu stacjonarnego względem całkowitego strumienia ciepła. Definicja ta jest motywowana energiją swobodną Helmholtza, którą można postrzegać jako transformację Legendre'a energii - jako fundamentalnej relacji termodynamicznej- względem entropii. Do zbadania tej hipotezy wykorzystane zostały dwa modele: gaz doskonały otoczony termostatem, gdzie energia dostarczana jest jednorodnie do objętości oraz gaz doskonały pomiędzy dwoma termostatami o różnych temperaturach. Obliczenia dla tego ostatniego układu wykazały, że nie dla całego zakresu parametrów definiujących wewnętrzny wiąz hipoteza jest spełniona. Może to być związane z tym, że w tych zakresach parametrów inne zmienne charakteryzujące układ powinny być uwzględnione.

Te przemyślenia doprowadziły do ostatniej hipotezy, która dotyczy potencjału B podobnego do potencjału Helmholtza. Forma potencjału jest wprowadzona na podstawie szeregu posulatów. Motywacją jest zasada korespondencji, a forma potencjału ściśle naśladuje postać energii swobodnej Helmholtza, z dodatkowym członem uwzględniającym wkład nierównowagowy. Ten dodatkowy człon jest proporcjonalny do \mathcal{T} . Dla modelu gazu doskonałego poddawanego dostawom energii w sposób jednorodny do objętości, otrzymaliśmy jawną postać zarówno dla tego potencjału jak i dla innych funkcji stanu. Sprawdzenie spójności schematu pokazało, że: po pierwsze, wyrażenia dla funkcji stanu są też zgodne z zasadą korespondencji; po drugie, relacje Maxwella są spełnione. Następnie, dla modelu z ruchomą ścianą - który posiada więcej stanów stacjonarnych, B poprawnie przewiduje wszystkie stany stacjonarne i wyznacza, który z nich jest stabilny.

Drugie przesłanie tej rozprawy dotyczy magazynowania energii. Przy użyciu modelu Isinga do którego dostarczana jest energia lokalnie i w sposób okresowy stwierdziliśmy, że magazynowanie energii jest wrażliwe na szczegóły sposobu dostarczania energii. W szczególności, więcej energii jest magazynowane gdy dostawy energii są duże ale rzadkie niż gdy są one częste ale niewielkie; więcej energii jest magazynowane, gdy obszar dostawy jest większy.

Ostatnie ważne przesłanie pracy jest propozycja modelu ruchomej ściany. Jest to gaz doskonały poddawany objętościowo jednorodnemu strumieniowi energii, z adiabatyczną ruchomą ścianą stanowiącą wewnętrzny wiąz. Choć model jest relatywnie prosty i analityczny, posiada on niezwykle ciekawe zachowania. Po pierwsze, model wykazuje nierównowagowe przejście fazowe. Parametrem uporządkowania dla tego przejścia jest położenie ruchomej ściany odpowiadające stabilnemu stanowi stacjonarnemu. Po drugie, powyżej

¹[1] R. Hołyst et. al., Phys. Rev. E **99**, 042118 (2019)

punktu krytycznego, system posiada wiele stanów stacjonarnych. System jest stabilny, gdy podukłady nie są symetryczne (to znaczy ściana nie znajduje się pośrodku układu) i magazynuje więcej energii w stanie stabilnym.