

УДК 531.19, 004.94

© *И. С. Мамаев*

МЕТОДЫ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Данная работа посвящена исследованию (с помощью математического моделирования) динамических систем, представляющих собой одномерный газ ($\sim 10^6$ частиц) в отрезке, при различных условиях:

- бесстолкновительный газ в отрезке, частицы которого упруго отражаются от концов,
- бесстолкновительный газ в отрезке, левый конец которого колеблется по заданному периодическому закону,
- бесстолкновительный газ в отрезке с движущимся поршнем конечной массы, сравнимой с массой частицы газа.

Основное внимание уделено изучению асимптотического (при $t \rightarrow \infty$) поведения систем, в частности анализу прихода к состоянию статистического или теплового равновесия, на основе чего делаются предварительные выводы о процессе релаксации в системах.

Ключевые слова: одномерный бесстолкновительный газ, статистическое равновесие, термодинамическое равновесие, слабый предел.

§ 1. Статистическое описание одномерного газа

Прежде чем переходить к описанию результатов экспериментов, укажем основные определения и понятия, используемые далее.

В любой момент времени состояние системы описывается координатами и скоростями $x_i(t)$, $v_i(t)$, $i = 1, \dots, N$, которые рассчитываются на основании динамических уравнений по заданным начальным данным (без каких-либо дополнительных допущений).

Для качественного статистического анализа системы мы используем больцмановский подход, основанный на построении одночастичной функции распределения $w_t(x, v)$. Для этого вся плоскость переменных (x, v) разбивается на ячейки, в данном случае прямоугольники со сторонами Δx , Δv , так что величина

$$N(\Delta x, \Delta v) = N w_t(x, v) \Delta x \Delta v$$

определяет число частиц, попавших в соответствующую ячейку в момент времени t . Точный вероятностный подход, основанный на введении плотностей, заменяется приближенным статистическим подходом.

Очевидно, что этот подход приведет к некоторому огрублению, определяемому величиной ячеек $\Delta x \Delta v$; соответственно, график функции $w(x, v)$ при достаточном разрешении представляет собой гистограмму.

Помимо общей функции $w(x, v)$ будем также рассматривать отдельно распределения по координатам и скоростям

$$\hat{w}_t(x) = \int w_t(x, v) dv, \quad \hat{w}_t(v) = \int w_t(x, v) dx,$$

а также соответствующие неприводимые моменты K_n ,

$$K_1 = M_1 = \langle x \rangle, K_2 = M_2 - M_1^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \dots, \quad (1.1)$$

выражаемые через моменты координат и скоростей $M_n = \int x^n \omega_t(x) dx$. Для нормального распределения отличны от нуля только первые два неприводимых момента.

§ 2. Динамические модели одномерного газа

Основной целью данной работы является *изучение прихода различных динамических систем к состоянию статистического или теплового равновесия* при помощи компьютерного эксперимента.

Мы рассмотрим различные системы с большим числом степеней свободы ($N = 1 - 10 \cdot 10^6$):

- бесстолкновительный газ в отрезке,
- бесстолкновительный газ в отрезке, левый конец которого колеблется по заданному периодическому закону,
- бесстолкновительный газ в отрезке с движущимся поршнем конечной массы.

В каждой модели проявляются свои особенности и закономерности, влияющие на релаксацию и характер равновесия.

§ 3. Идеальный бесстолкновительный газ в отрезке

Для иллюстрации возможности прихода системы к *статистическому, но не термодинамическому, равновесию* рассмотрим наиболее простую модель системы многих частиц, восходящую к работе Пуанкаре [8].

Рассматривается система с большим числом частиц на отрезке, которые не сталкиваются между собой и упруго отражаются от концов отрезка. Будем называть его одномерным газом на отрезке.

Замечание 1. Абсолютно упругое столкновение двух одинаковых частиц на отрезке приводит лишь к обмену скоростями между ними, что эквивалентно отсутствию столкновений между частицами.

Впервые такую модель рассмотрел Пуанкаре [8], в дальнейшем более полное исследование было проведено Козловым [1]. В частности, он доказал, что для всех начальных распределений с суммируемой начальной плотностью $\rho_0(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ система приходит к статистическому равновесию, плотность которого задается слабым пределом плотности ρ_t , и эти пределы при $t \rightarrow +\infty$ и $t \rightarrow -\infty$ совпадают. В частности, для одночастичного описания имеет место:

Теорема 1. Для всех суммируемых начальных распределений $w_0(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ плотность $w_t(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ слабо сходится к функции

$$\bar{w}(\mathbf{v}) = 1/2[\hat{w}(\mathbf{v}) + \hat{w}(-\mathbf{v})], \quad (3.1)$$

где $\hat{w}(\mathbf{v}) = 1/l \int_0^l \mathbf{w}_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x}$, l — длина отрезка.

В дальнейшем начальную плотность распределения будем брать в виде произведения

$$w_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \hat{\mathbf{w}}_0(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{w}}_0(\mathbf{v}).$$

Характер динамики прихода системы к слабому пределу легко увидеть, наблюдая динамику фазового портрета системы (рис. 2). Наблюдается расслоение (стратификация) фазового объема, занимаемого системой. Объем, занимаемый системой, сохраняется в соответствии с теоремой Лиувилля, но расслаивается, и при $t \rightarrow \infty$ мы получаем бесконечно расслоенный фазовый объем. С точки зрения функции распределения $w_t(x, v)$, получается функция, разрывная почти в каждой точке, но непрерывная в слабом пределе. Роль усреднения в нашем случае играют ячейки по координатам и скоростям, распределение частиц по которым дает функцию распределения в слабом пределе.

Компьютерный эксперимент показал: независимо от исходных начальных распределений, итоговое распределение по координатам и скоростям при $t \rightarrow \infty$ становится непрерывным (по координатам — равномерным, т.е. $\partial \bar{w} / \partial x = 0$, а по скоростям — симметричным, т.е. $\bar{w}(v) = 1/2[w_0(v) + w_0(-v)]$) (рис. 1, 2).

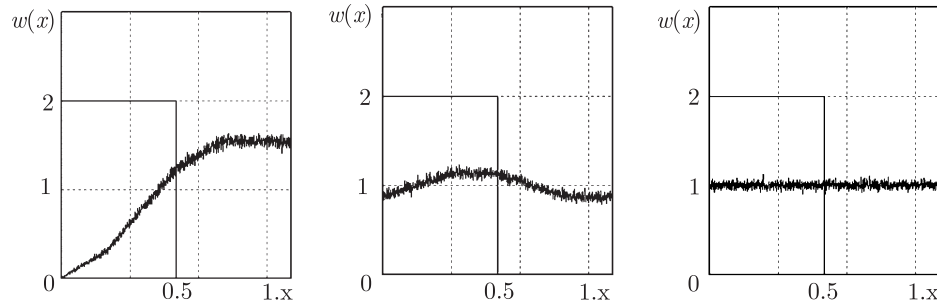


Рис. 1. Эволюция распределения по координатам. Конечное распределение в слабом пределе равномерно. (Начальное распределение $w_0(x)$ равномерное на отрезке $[0, 0.5]$.)

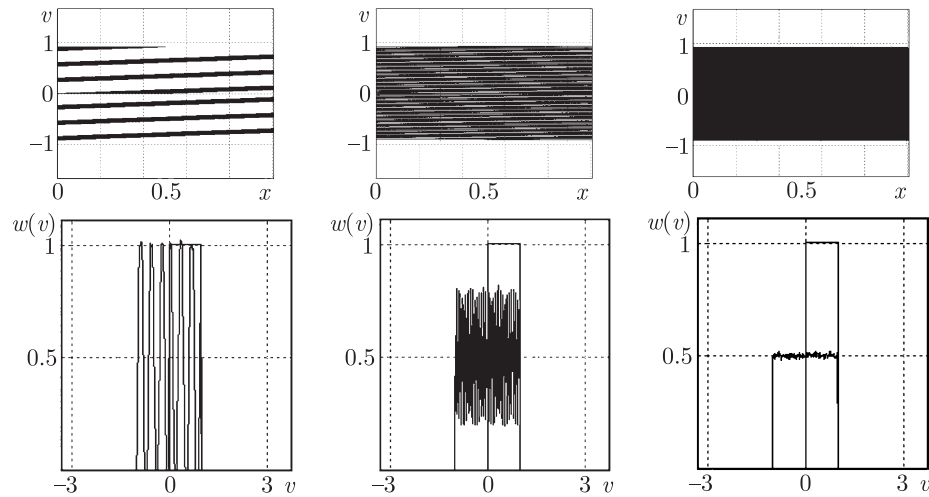


Рис. 2. Стратификация фазового объема и эволюция распределения по скоростям в случае несимметричного начального распределения. Конечное распределение в слабом пределе имеет вид $\bar{w}(v) = 1/2[w_0(v) + w_0(-v)]$. (Начальное распределение $w_0(v)$ прямоугольное $[0, 1]$.)

Приход системы в состояние равновесия оценивался по временным зависимостям первых неприводимых моментов координат и скоростей (1.1), по которым можно установить закон и характерное время релаксации системы.

Для почти всех начальных распределений система приходит в состояние статистического равновесия по степенному закону $f(t) = t^{-\alpha}$, $\alpha \approx 1$ (рис. 3). Устанавливается равномерное распределение по координатам и симметричное по скоростям.

И только нормальному начальному распределению по скоростям соответствует экспоненциальный закон установления равновесия по координатам $f(t) = e^{-\lambda t^2}$, $\lambda \approx 2\pi^2$ (рис. 4), что было ранее теоретически показано Козловым [1], хотя само распределение по скоростям стремится из начального к равновесному по степенному закону.

§ 4. Идеальный бесстолкновительный газ в отрезке с движущимся тяжелым поршнем

Проверим еще одно имеющее место мнение, что система газа в отрезке, левый конец кото-

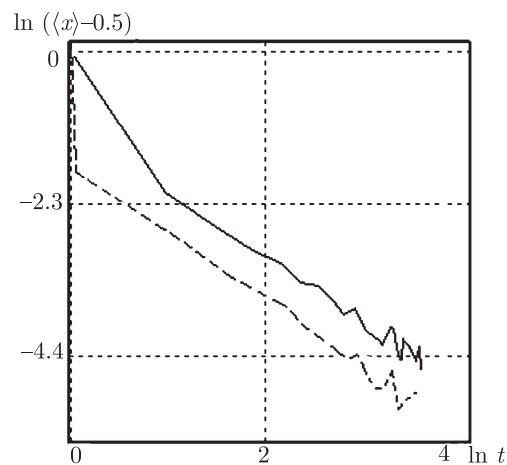


Рис. 3. Зависимости $\langle x \rangle - 0.5$ (изображено пунктиром) и $\langle v \rangle$ от t в двойном логарифмическом масштабе, где $\langle x \rangle$, $\langle v \rangle$ — первые моменты по координате и скорости, соответственно. Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке $[0, 0.5]$, по скоростям $w_0(v)$ — равномерное на отрезке $[0, 1]$

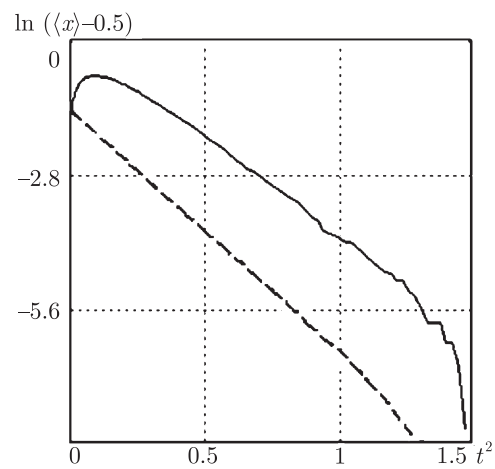


Рис. 4. Зависимости $\langle x \rangle - 0.5$ (изображено пунктиром) и $\langle v \rangle$ от t в полулогарифмическом масштабе для нормального начального распределения по скоростям, где $\langle x \rangle$, $\langle v \rangle$ — первые моменты по координате и скорости, соответственно. Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке $[0, 0.5]$

рого колеблется с малой амплитудой по заданному закону $x_L = f(t)$, $f(t) = f(t+T)$, где T — период колебаний, *может служить моделью газа, взаимодействующего с термостатом.*

При взаимодействии газа с колеблющейся стенкой происходит перераспределение скоростей между частицами. Сама стенка ведет себя как тело с бесконечной массой, скорость от столкновения не меняет.

После ряда компьютерных экспериментов для этого случая, можно сделать следующий вывод. *Такая система газа в отрезке не описывает реальный физический термостат*, так как в процессе эволюции газ приходит только в статистическое равновесие, теплового равновесия с термостатом (отрезком с колеблющейся стенкой, в нашем случае) не наблюдается. Полученные распределения по координатам и скоростям носят кинематический характер.

Как и следовало ожидать в подобной неинтегрируемой системе, появляются выделенные зоны (окрестности устойчивых периодических решений) (рис. 5), которые частица не покидает в процессе эволюции системы. Как внутри этих областей, так и за их пределами (т. е. внутри стохастического слоя) наблюдается расслоение (стратификация) фазового объема (рис. 6).

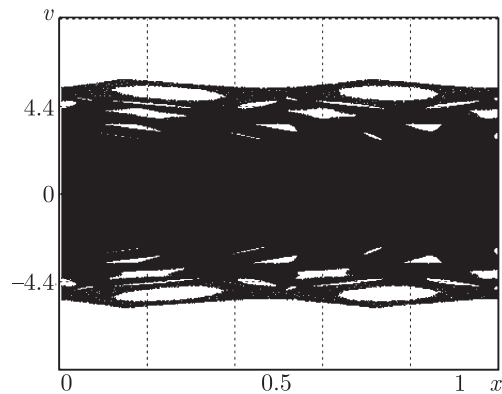


Рис. 5. Фазовый портрет системы (число частиц $N \sim 10^5$) с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.1, w = 10$), в момент времени $t = 157$

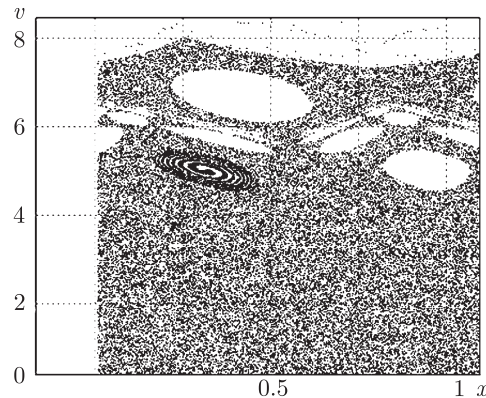


Рис. 6. Элемент фазового портрета системы ($N \sim 10^5$) с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.3, w = 10$), в момент времени $t = 8250$. Наблюдается стратификация фазового объема в области устойчивых окрестностей эллиптических периодических решений

Добавление к такой системе однородного гравитационного поля также не приводит к установлению распределения Больцмана по координатам. Получаемые фазовые портреты (рис. 7) определяются динамикой системы: влиянием колебаний поршня и ускорением свободного падения на траектории частиц.

Кроме того, для этой системы был проведен еще один интересный компьютерный эксперимент, иллюстрирующий важный аспект поведения нелинейных динамических систем: *вопрос*

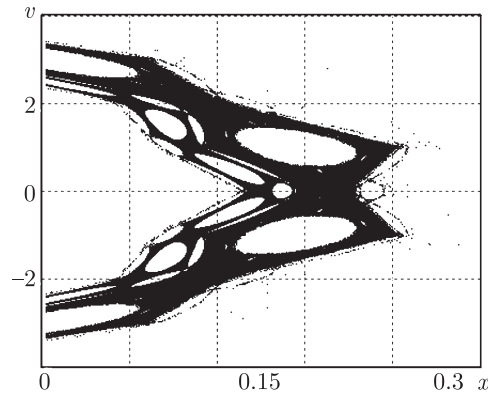


Рис. 7. Фазовый портрет системы частиц ($N = 10^6$) при $t = 250$, помещенных в гравитационное поле ($g = 20$), с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.15, w = 10$)

об обратимости и необратимости.

Пусть в начальный момент времени газ находится в левой половине отрезка, а распределение по скоростям равномерно (рис. 8). Рассмотрим эволюцию системы в течение некоторого времени t , а затем обратим время (или скорости частиц, что эквивалентно). Соберется ли газ обратно в начальное состояние?

Эксперимент показал, что с некоторого времени $t \sim 25$ газ перестает собираться в начальное распределение. При этом частицы, находящиеся в начальный момент $t = 0$ в окрестностях устойчивых периодических решений, возвращаются в исходное состояние независимо от времени t , частицы же, находящиеся в начальный момент $t = 0$ в стохастическом слое, с некоторого времени t не возвращаются (это связано с экспоненциальным разбеганием траекторий в стохастическом слое).

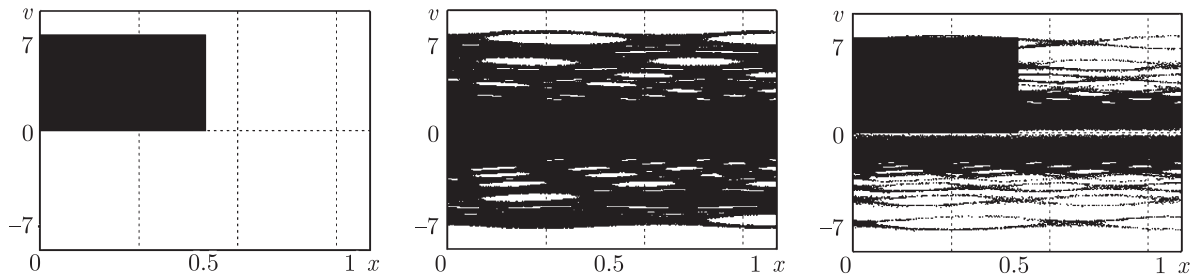


Рис. 8. Фазовый портрет системы частиц в отрезке с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.1, w = 10$), в момент времени $t = 0$ (начальное состояние), $t = 35$ (момент обращения времени) и $t = 70$ (момент, соответствующий возврату системы в исходное состояние).

Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке $[0, 0.5]$, по скоростям $w_0(v)$ равномерное на отрезке $[0, 7]$

§ 5. Бесстолкновительный газ в отрезке с поршнем конечной массы

В заключение рассмотрим еще одну задачу об эволюции одномерного бесстолкновительного газа в отрезке, разделенного подвижным поршнем массы M , сравнимой по величине с массой отдельной частицы, *взаимодействующего с частицами газа согласно законам сохранения энергии и импульса.*

Подобная задача для случая трехмерного бесстолкновительного газа с массивным поршнем изучалась в работе [6], где на эвристическом уровне обсуждается динамика системы на больших временах и показывается, что при подходящих начальных условиях в пределе $M \rightarrow \infty$

траектория механического движения поршня сходится по вероятности к решению системы гидродинамических уравнений. Кроме того, в этой работе содержится подробная библиография, посвященная истории вопроса.

Отличие рассматриваемой нами задачи от системы в работе [6] состоит в том, что масса поршня, взаимодействующего с газом, в нашем случае соизмерима с массой частицы, при соударении частицы и поршня происходит обмен энергией, размер отрезка конечен.

Компьютерный эксперимент показал, что данная система газа в отрезке (при условии $M \neq m$) приходит к термодинамическому равновесию, о чем нам говорит вид одночастичной функции распределения по скоростям (рис. 9), совпадающий с распределением Максвелла при соответствующем значении температуры $T = \langle v^2 \rangle$, и нулевые значения высших неприводимых моментов (1.1) системы.

Характерной особенностью установления равновесия в такой системе оказался двухэтапный приход поршня в равновесное положение (рис. 9), что было интуитивно предсказано в работах [3, 4] и строго показано с применением теоретико-вероятностного подхода в работе [6].

Первый этап — установление «механического» равновесия — связанный с выравниванием давлений справа и слева от поршня. Чем тяжелее поршень, тем дольше система проходит эту фазу. Второй этап — выравнивание температур справа и слева от поршня, установление термодинамического равновесия. Конечная координата поршня и температура частиц после установления термодинамического равновесия:

$$X_0 = \frac{n_1}{n_1 + n_2}, \quad T = 2 \frac{n_1 \langle \varepsilon_1 \rangle + n_2 \langle \varepsilon_2 \rangle}{n_1 + n_2},$$

где n_1 и n_2 — концентрации справа и слева, $\langle \varepsilon_1 \rangle$ и $\langle \varepsilon_2 \rangle$ — начальные средние энергии частиц справа и слева от поршня.

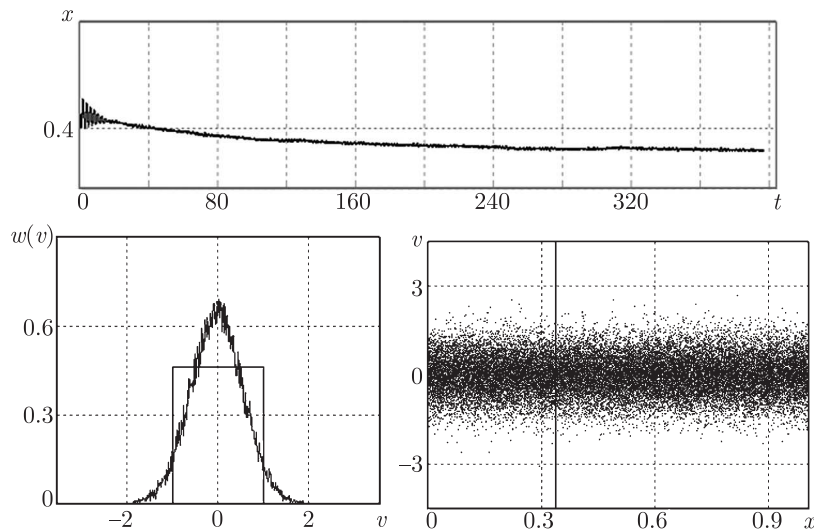


Рис. 9. Двухэтапный приход поршня к положению равновесия, итоговые максвелловское распределение частиц по скоростями и фазовый портрет системы (положение поршня отмечено прямой). Число частиц справа и слева от поршня $n_1 = 10^5$ и $n_2 = 2 \cdot 10^5$, соответственно. Время расчета $t = 395$. Начальное распределение по скоростям справа и слева от поршня $\rho_0(v)$ равномерное симметричное $[-1, 1]$

Добавление к такой системе однородного гравитационного поля приводит к установлению распределения Больцмана по координатам (рис. 10), при условии, что почти все частицы участвуют в столкновениях с поршнем.

В случае, если начальными условиями система подобрана так, что частицы вблизи нуля под действием гравитационного поля не долетают до поршня, отвечающего за перераспределение

энергии и импульса в системе частиц, т. е. не участвуют в установлении общего термодинамического равновесия, а приходят к «локальному» статистическому, то итоговые распределения по координатам и скоростям заметно отличаются от нормальных, за счет вклада в статистику таких частиц (рис. 11).

Кроме того, для этой системы также был проведен эксперимент, связанный с вопросом обратимости или необратимости системы. Он показал, что *данная система обратима на достаточно больших временах*, в том числе, после установления равновесия.

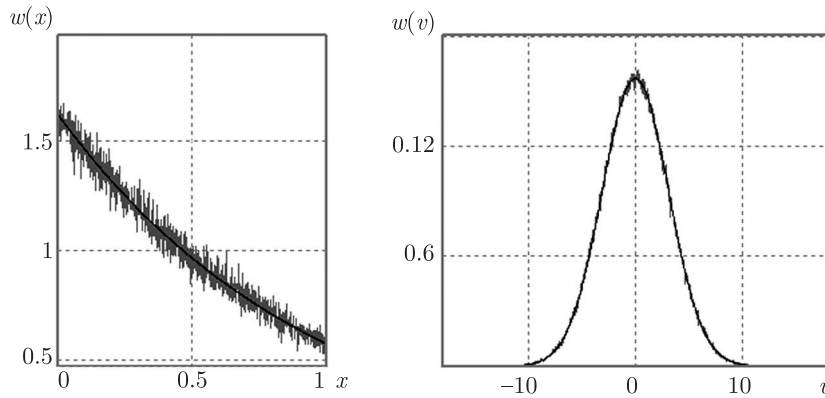


Рис. 10. Полученные распределения Больцмана и Максвелла для системы частиц с легким подвижным поршнем в гравитационном поле ($n_1 = 5 \cdot 10^5$, $n_2 = 10^2$, $g = 5$, $m = 1$, $M = 10$). Черным изображены функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля и средней энергии

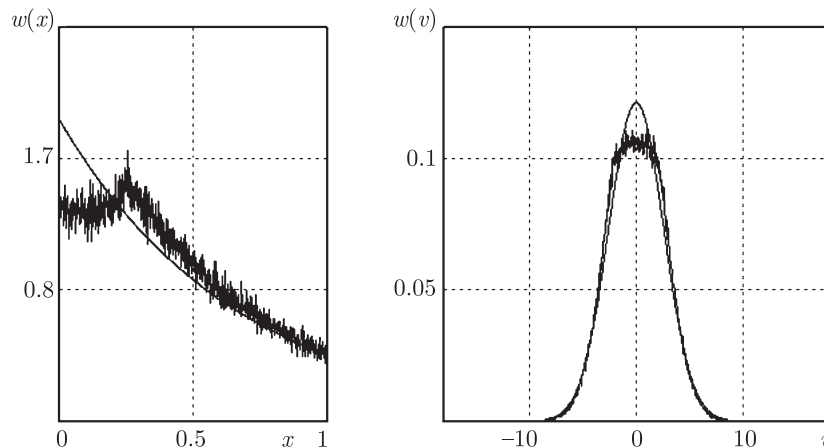


Рис. 11. Распределения по координатам и скоростям в случае большого количества частиц, не участвующих в столкновении с поршнем ($n_1 = 2 \cdot 10^5$, $n_2 = 1 \cdot 10^5$, $g = 5$, $m = 1$, $M = 10$) и функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля и средней энергии

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Козлов В. В. Ансамбли Гиббса и неравновесная статистическая механика. М.–Ижевск: РХД, 2008.
2. Козлов В. В. Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. М.–Ижевск: ИКИ, 2002.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: В 10 тт. М.: Наука, 1976. Т. 5: Статистическая физика.
4. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике: Т. 4. М.: Мир, 1976.
5. Hlawka E. Mathematische Modelle der kinetischen Gastheorie // Rhein.-Westfal. Acad. d. Wissensch. Natur-, Ingenieur- und Wirtschaftswissensch. Opladen: Westdeutscher Verl., 1974. V. 240, pp. 361–376.

6. Лебовиц Л., Синай Я., Чернов Н. Динамика массивного поршня, погруженного в идеальный газ // УМН, 2002, т. 57, вып. 6, с. 3–86.
7. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. М.: Прогресс, 1986.
8. Пуанкаре А. Замечания о кинетической теории газов // Избранные труды: Т. 3. М.: Наука, 1974. С. 385–412.
9. Bunimovich L. Kinematics, Equilibrium, and Shape in Hamiltonian System: The "LAB"effect // Chaos, 2003, vol. 13, № 3, pp. 903–912.

Поступила в редакцию 20.08.09

I. S. Mamaev

Parallel calculation methods for statistical mechanics problems

With the help of mathematical modeling, we study the behavior of a gas ($\sim 10^6$ particles) in a one-dimensional tube. For this dynamical system, we consider the following cases:

- collisionless gas in a tube with both ends closed, the particles of the gas bounce elastically between the ends,
- collisionless gas in a tube with its left end vibrating harmonically in a prescribed manner,
- collisionless gas in a tube with a moving piston, the piston's mass is comparable to the mass of a particle.

The emphasis is on the analysis of the asymptotic ($t \rightarrow \infty$) behavior of the system and specifically on the transition to the state of statistical or thermal equilibrium. This analysis allows preliminary conclusions on the nature of relaxation processes.

Keywords: one-dimensional collisionless gas, statistical equilibrium, thermodynamical equilibrium, weak limit.

Mathematical Subject Classifications: 37A60, 68U20

Мамаев Иван Сергеевич, д. ф.-м. н., Институт компьютерных исследований, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (корп. 4), E-mail: mamaev@ics.org.ru