

Статистическая механика нелинейных динамических систем

В. В. Васькин¹, Н. Н. Ермакова¹, И. С. Мамаев²

¹Кафедра теоретической физики
Удмуртский государственный университет
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

²Институт компьютерных исследований
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

vaskin@udsu.ru, sernadya@yandex.ru, mamaev@ics.org.ru

Получено 14 июля 2009 г.

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, в гравитационном поле и без,
- 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.

В конце статьи приводится дискуссия, резюмирующая результаты численного эксперимента и теоретического анализа. Заметим, что не все полученные результаты совпадают с общепринятыми мнениями и выдвинутыми гипотезами из стандартных курсов и научных работ, изучающих данный вопрос.

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

V. V. Vaskin, N. N. Erdakova, I. S. Mamaev

Statistical mechanics of nonlinear dynamical systems

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 (with and without gravity) 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.

At the end of the paper the numerical and theoretical results obtained are discussed. It should be noted that not all the results fit well the generally accepted theories and conjectures from the standard texts and modern works on the subject.

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

Mathematical Subject Classifications: 37A60, 68U20



1. Введение

В этой работе с помощью компьютерного (численного) моделирования мы исследуем простейшие динамические системы с большим числом степеней свободы. А именно, так называемый «одномерный газ», т. е. систему N одинаковых частиц на отрезке, либо без взаимодействия и наличия внешних воздействий, либо при наличии слабого взаимодействия.

Прежде всего, сделаем ряд замечаний, отражающих основные мотивы компьютерного исследования поведения гамильтоновых систем с большим числом степеней свободы.

1. С одной стороны, теория динамических систем (в частности, КАМ-теория) предсказывает достаточно сложную (не эргодическую) динамику даже для систем с небольшим числом степеней свободы [14]. При этом поведение системы существенным образом зависит от начальных условий, и, как правило, не имеет какого-либо естественного предела при $t \rightarrow \pm\infty$. Экстраполируя эти результаты на системы с большим числом степеней свободы, можно ожидать еще более сложного и запутанного поведения.

С другой стороны, имеется множество экспериментальных данных, показывающих, что системы, чье поведение с высокой степенью точности описывается гамильтоновой динамикой, не зависимо от начального распределения через некоторое время приходят к некоторому универсальному состоянию — тепловому (термодинамическому) равновесию. Это состояние характеризуется одним (немеханическим) параметром — температурой, которую можно вычислить по начальному распределению (как правило, средняя кинетическая энергия).

Кроме того, это состояние теплового равновесия очень хорошо описывается распределением Гиббса (в случае газов — распределениями Максвелла и Больцмана).

2. Строгий теоретический вывод распределения Гиббса (Максвелла, Больцмана) невозможен даже для систем с простейшим взаимодействием. Все известные обоснования содержат допущения, которые противоречат теории динамических систем (например, гипотеза эргодичности). Имеющиеся нестрогие обоснования (в том числе компьютерные, опирающиеся на методы молекулярной динамики) тем или иным способом допускают необратимость, что также противоречит обратимой динамике исходной гамильтоновой системы.

Подробный обзор классических результатов по этому вопросу содержится в работе [15] (см. также [16]).

3. Современные компьютеры позволяют без дополнительных (упрощающих) предположений экспериментировать с «идеальными» гамильтоновыми системами в случае достаточно большого числа степеней свободы (в случае одномерного газа практически не возникает также ошибок интегрирования). Это позволяет указать реальные закономерности «идеальных» гамильтоновых систем и избежать неконтролируемых допущений, которые могут привноситься ошибками численных методов и некоторых процедур молекулярной динамики.

Кроме того, как показано в работах, представленных в книге В. В. Козлова [1], поведение одномерного газа носит сильно неравновесный характер, поэтому компьютерные эксперименты с этой системой могут служить развитию методов неравновесной термодинамики.

1.1. 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).

ЗАМЕЧАНИЕ. Для всех рассматриваемых ниже систем уравнения движения сводятся к дискретному отображению, что существенно ускоряет численные расчеты и увеличивает их точность.

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 прямоугольнички 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.

Отметим, что в теоретических исследованиях и для аналитических оценок (в частности, в работах В. В. Козлова [1, 2]), как правило, используется подход Гиббса. Он основывается на функции распределения по координатам и скоростям всех частиц

$$\rho_t(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \rho_t(x_1, v_1 \dots x_N, v_N), \quad (1.2)$$

которая, как известно, описывает ансамбль одинаковых систем. С вычислительной точки зрения, этот подход требует в N_a больше времени и ресурсов, чем подход Больцмана, где N_a — число систем в ансамбле. Существующие компьютеры не позволяют выполнить прямое моделирование динамики распределения (1.2) с приемлемым числом частиц N , ансамблей N_a и разбиением фазового пространства $\prod_i \Delta x_i \Delta v_i$.

В случае невзаимодействующих частиц распределение Гиббса распадается на произведение одночастичных функций распределения Больцмана – Максвелла:

$$\rho_t(x_1, v_1 \dots x_N, v_N) = e^{-\frac{1}{T} H(x_1, v_1 \dots x_N, v_N)} = \prod_i e^{-\frac{1}{T} H(x_i, v_i)},$$

т. е. распределения по отдельным частицам будут статистически независимыми.

1.2. Статистическое равновесие и слабый предел

Как показывают компьютерные эксперименты, результаты которых приведены ниже, рассматриваемые системы с течением времени приходят к равновесному состоянию, при котором функции распределения $\hat{w}(x)$, $\hat{w}(v)$ и соответствующие моменты перестают меняться со временем (с точностью до флуктуаций). При этом для ряда рассматриваемых систем форма равновесного распределения отлична от максвелловского (либо больцмановского) и существенно зависит от начального состояния, то есть в этом случае достигается статистическое, но не тепловое, равновесие.

ЗАМЕЧАНИЕ. Как показал В. В. Козлов [2], уравнения состояния в статистическом равновесии совпадают с хорошо известными термодинамическими уравнениями. Это достигается путем соответствующего переопределения температуры динамической системы.

Строгий математический подход к описанию статистического равновесия предложен В. В. Козловым [1] (в рамках теории ансамблей Гиббса). При этом предполагается, что система достигает предельного состояния равновесия, если распределение ρ_t слабо сходится (т. е. имеет слабый предел) к $\bar{\rho} : \Gamma \rightarrow R$ при $t \rightarrow \infty$ так, что

$$\int_{\Gamma} \rho_t \varphi \prod_i dx_i dp_i \rightarrow \int_{\Gamma} \bar{\rho} \varphi \prod_i dx_i dp_i$$

для любой «пробной» функции φ .

ЗАМЕЧАНИЕ. В физических приложениях естественно полагать, что различным пробным функциям соответствуют некоторые устройства (например, термометр, барометр и т. п.), измеряющие средние величины. В частности, выбирая $\varphi = \delta(x_1 - x)$, мы приходим к функции $\hat{w}(x)$, используемой в нашем описании. Выбирая численную реализацию δ -функции, мы получим соответствующее приближение к нашему компьютерному описанию.

Очевидно, что если система имеет слабый предел в указанном выше смысле, то она также приходит к некоторому статистическому равновесию и в смысле подхода Больцмана, которое описывается соответствующей стационарной функцией распределения $\bar{w}(x, v)$.

В работе [11] указаны системы, для которых можно доказать существование стационарного слабого предела $\bar{\rho}$. В частности, к ним относятся квазиоднородные гамильтоновы системы.

С точки зрения термодинамики, существование статистического равновесия, отличного от термодинамического, противоречит нулевому началу термодинамики. В то же время, численные эксперименты с системой невзаимодействующих частиц демонстрируют возможность достижения лишь статистического равновесия.

ЗАМЕЧАНИЕ. С точки зрения теории динамических систем, существование равновесного состояния в конечномерной системе противоречит теореме Пуанкаре о возвращении. В то же время, ни в реальных, ни в компьютерных экспериментах никаких «возвращений» не наблюдается. Стандартное объяснение [12, 13] заключается в том, что если число степеней свободы очень большое ($N \geq 10^6$), то характерное «время возвращения» настолько велико, что не может быть достигнуто даже в компьютерном эксперименте. В работе Хлавки [5] приведены точные оценки для возможных «времен возвращения» в случае газа на отрезке.

1.3. 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 гравитационном поле,
- 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.

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

$$\bar{w}(\mathbf{v}) = 1/2[\hat{w}(\mathbf{v}) + \hat{w}(-\mathbf{v})], \quad (2.3)$$

где $\hat{w}(\mathbf{v}) = 1/l \int_0^l w_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) dx$, l — длина отрезка.

В дальнейшем начальную плотность распределения будем брать в виде произведения

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

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).

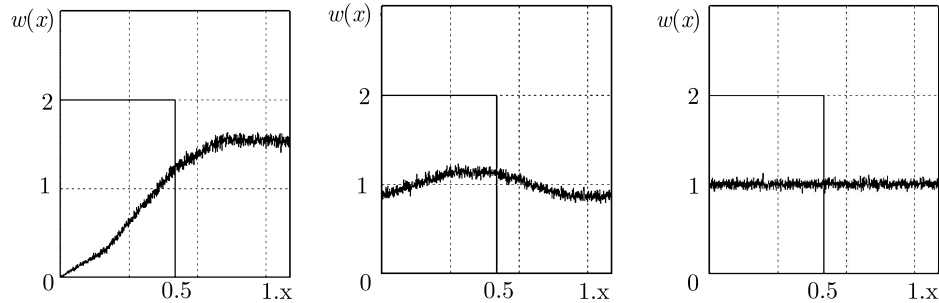


Рис. 1. Эволюция распределения по координатам. Конечное распределение в слабом пределе равномерно. (Начальное распределение $w_0(x)$ равномерно на отрезке $[0, 0.5]$.)

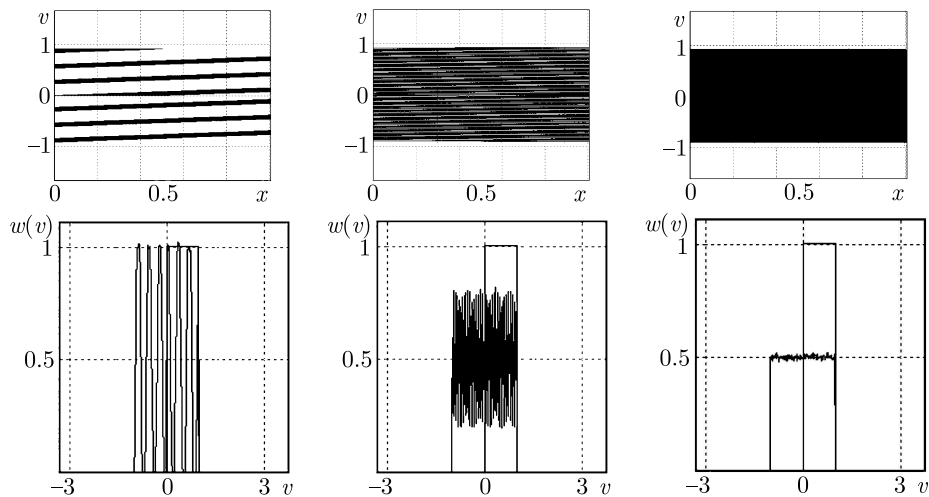


Рис. 2. Стратификация фазового объема и эволюция распределения по скоростям в случае несимметричного начального распределения. Конечное распределение в слабом пределе имеет вид $\bar{w}(v) = 1/2[w_0(v) + w_0(-v)]$. (Начальное распределение $w_0(v)$ прямоугольное $[0, 1]$.)

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.

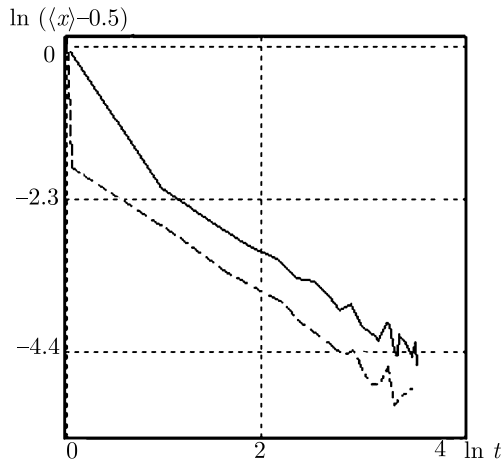


Рис. 3. Зависимости $\langle x \rangle - 0.5$ (изображено пунктиром) и $\langle v \rangle$ от t в двойном логарифмическом масштабе, где $\langle x \rangle$, $\langle v \rangle$ — первые моменты по координате и скорости, соответственно. Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке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

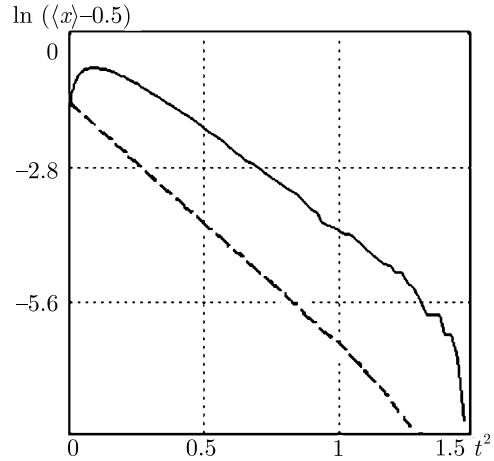


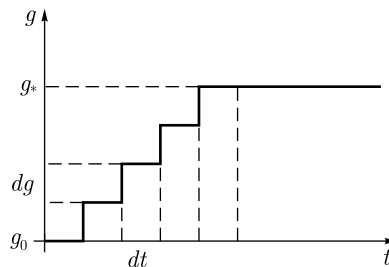
Рис. 4. Зависимости $\langle x \rangle - 0.5$ (изображено пунктиром) и $\langle v \rangle$ от t в полулогарифмическом масштабе для нормального начального распределения по скоростям, где $\langle x \rangle$, $\langle v \rangle$ — первые моменты по координате и скорости, соответственно. Начальное распределение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

3. Идеальный бесстолкновительный газ в гравитационном поле

В предыдущем пункте мы показали, что бесстолкновительный газ в отрезке приходит к статистическому равновесию, при котором распределение частиц по координатам становится равномерным, по скоростям — симметричным, но не максвелловским.

Теперь покажем, что включение гравитационного поля в такой системе частиц также приводит к статистическому, не термодинамическому равновесию, не зависящему от скорости включения поля. Также проверим гипотезу (см. [1], стр. 127) о том, что адиабатическое включение гравитационного поля приведет к установлению бoльцмановского распределения по координатам.

Будем рассматривать различные начальные состояния газа, поле включать от значения $g_0 = 0$ до значения $g_* = 10$ с различной скоростью (график $g(t)$ приведен на рисунке)



В экспериментах положим $dt = 1$ и пять различных скоростей включения поля:

1. $dg = g_*$ — мгновенное включение (рис. 5), (рис. 6);

2. $dg/dt = 1$ — быстрое включение (рис. 7);
3. $dg/dt = 0.1$ — медленное включение (рис. 8);
4. $dg/dt = 0.01$ — более медленное включение (рис. 9);
5. $dg/dt = 0.001$ — совсем медленное включение (рис. 10).

Моделирование мгновенного включения гравитационного поля до максимального значения ($g = 10$) не привело к установлению в газе термодинамических распределений по координатам и скоростям (рис. 5, 6).

В частности, рассматривалось начальное распределение, равномерное по координатам и нормальное по скоростям:

$$\rho(x, v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{v^2}{2\sigma}}.$$

На рисунках заметно явное отличие распределений от функций Больцмана и Максвелла при соответствующих параметрах системы.

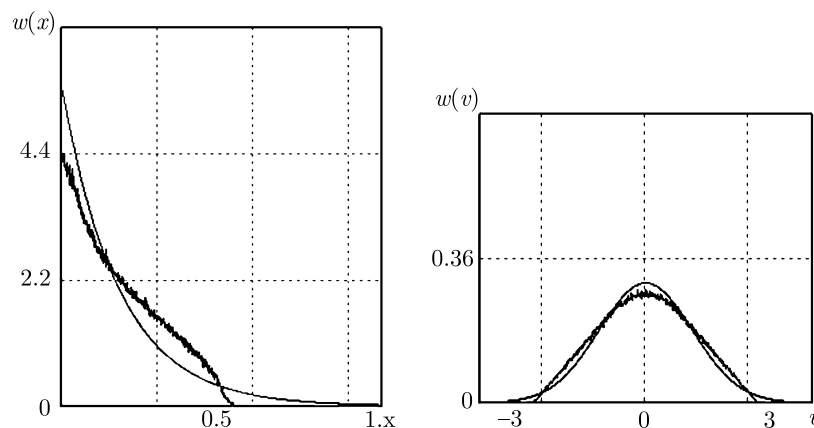


Рис. 5. Распределения по координатам $w(x)$ и скоростям $w(v)$ при мгновенном включении гравитационного поля $g = 10$ в момент времени $t = 333$ и функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля g ($g = 10$) и температуры T ($T = \langle v^2 \rangle = 1.779$). Начальное распределение по скоростям $w_0(v)$ — прямоугольное несимметричное $[0, 1]$, по координатам $w_0(x)$ — прямоугольное $[0, 0.5]$

Моделирование постепенного включения поля с различными скоростями также не привело к установлению термодинамических распределений при всех рассмотренных нами начальных условиях и скоростях (рис. 7–10).

Из сравнения распределений на (рис. 8–10) понятно, что дальнейшее уменьшение значения приращения поля dg за время dt не приведет к существенному изменению вида распределений.

Гипотеза о том, что адиабатическое включение гравитационного поля приведет к установлению больцмановского распределения по координатам также не подтвердилась.

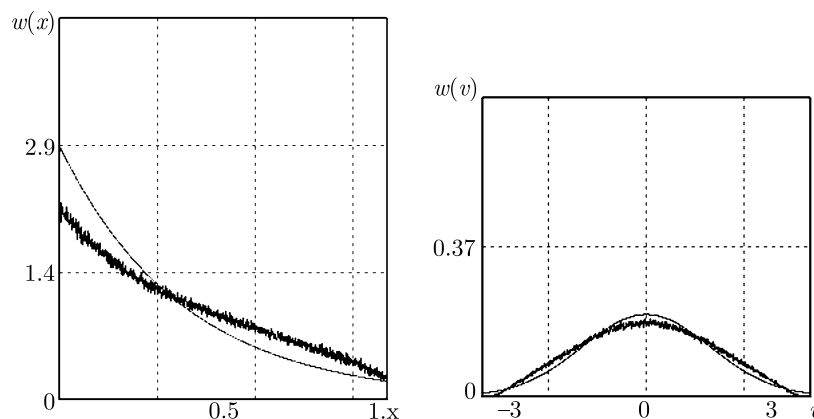


Рис. 6. Распределения по координатам $w(x)$ и скоростям $w(v)$ при мгновенном включении гравитационного поля $g = 10$ в момент времени $t = 2471$ и функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля g ($g = 10$) и температуры T ($T = \langle v^2 \rangle = 3.776$). Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке, по скоростям $w_0(v)$ — нормальное ($\sigma = 1$)

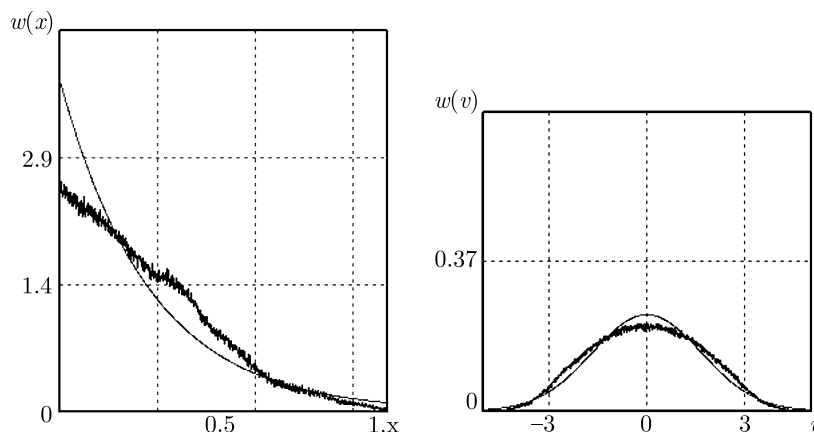


Рис. 7. Распределения по координатам $w(x)$ и скоростям $w(v)$ при быстром включении гравитационного поля от 0 до 10 с $dg/dt = 1$ в момент времени $t = 156$ и функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля g ($g = 10$) и температуры T ($T = \langle v^2 \rangle = 2.741$). Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке, по скоростям $w_0(v)$ — нормальное ($\sigma = 1$)

4. Идеальный бесстолкновительный газ в отрезке с движущимся тяжелым поршнем

Проверим еще одно имеющее место мнение, что система газа в отрезке, левый конец которого 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.

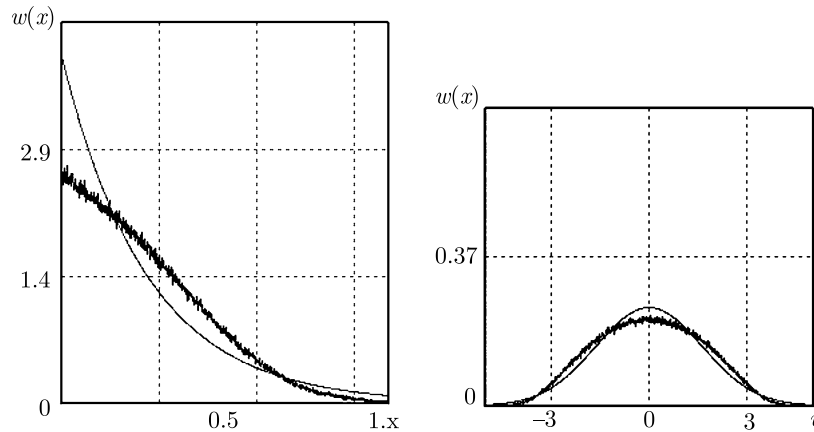


Рис. 8. Распределения по координатам $w(x)$ и скоростям $w(v)$ при медленном включении гравитационного поля от 0 до 10 с $dg/dt = 0.1$ в момент времени $t = 279$ и функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля g ($g = 10$) и температуры T ($T = \langle v^2 \rangle = 2.605$). Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке, по скоростям $w_0(v)$ — нормальное ($\sigma = 1$)

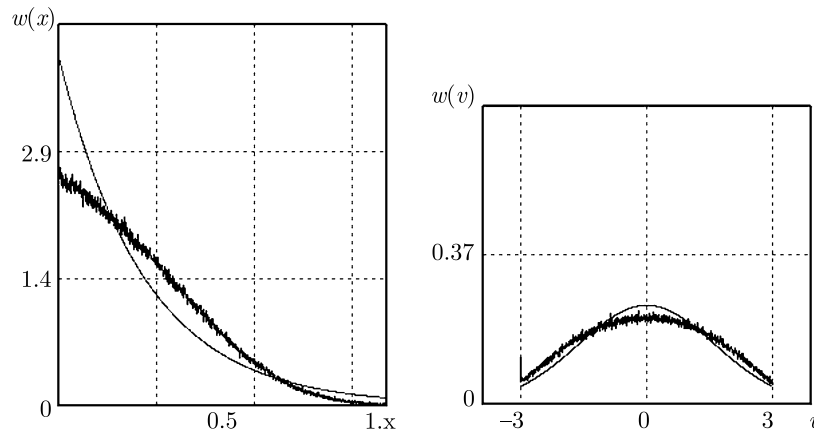


Рис. 9. Распределения по координатам $w(x)$ и скоростям $w(v)$ при медленном включении гравитационного поля от 0 до 10 с $dg/dt = 0.01$ в момент времени $t = 1494$. Серым изображены функции Больцмана и Максвелла при значении поля g ($g = 10$) и температуре T ($T = \langle v^2 \rangle = 2.592$). Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке, по скоростям $w_0(v)$ — нормальное ($\sigma = 1$)

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. 11), 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. 12).

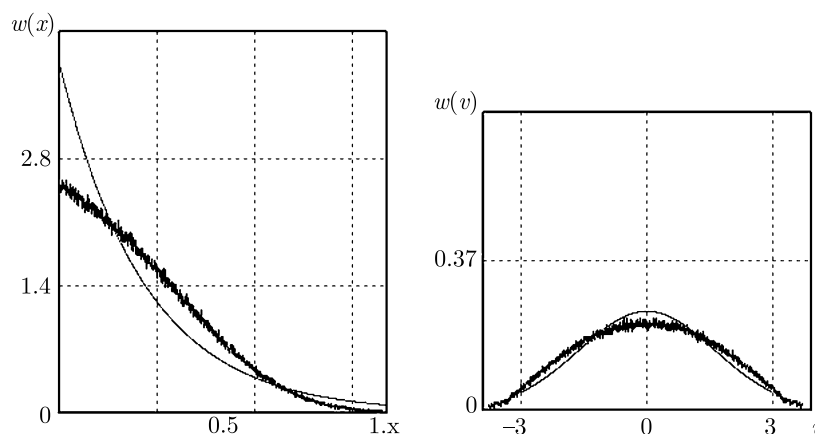


Рис. 10. Распределения по координатам $w(x)$ и скоростям $w(v)$ при медленном включении гравитационного поля от 0 до 10 с $dg/dt = 0.001$ в момент времени $t = 11943$. Серым изображены функции Больцмана и Максвелла при значении поля g ($g = 10$) и температуре T ($T = \langle v^2 \rangle = 2.588$). Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке, по скоростям $w_0(v)$ — нормальное ($\sigma = 1$)

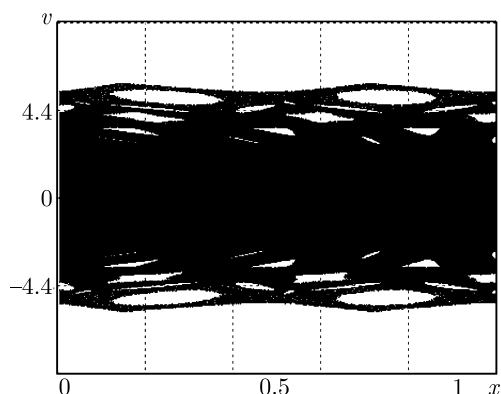


Рис. 11. Фазовый портрет системы (число частиц $N \sim 10^5$) с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.1, w = 10$), в момент времени $t = 157$

Добавление к такой системе однородного гравитационного поля также не приводит к установлению распределения Больцмана по координатам. Получаемые фазовые портреты (рис. 13) 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 об обратимости и необратимости*.

Пусть в начальный момент времени газ находится в левой половине отрезка, а распределение по скоростям равномерно (рис. 14). 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

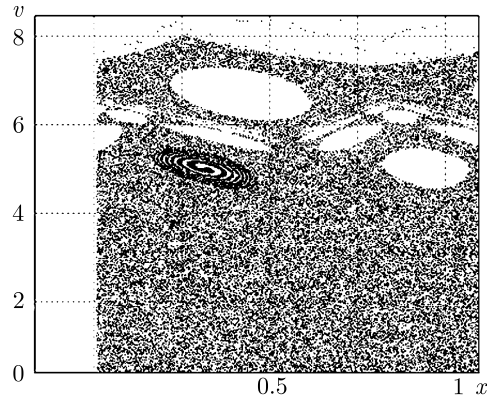


Рис. 12. Элемент фазового портрета системы ($N \sim 10^5$) с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.3, w = 10$), в момент времени $t = 8250$. Наблюдается стратификация фазового объема в области устойчивых окрестностей эллиптических периодических решений

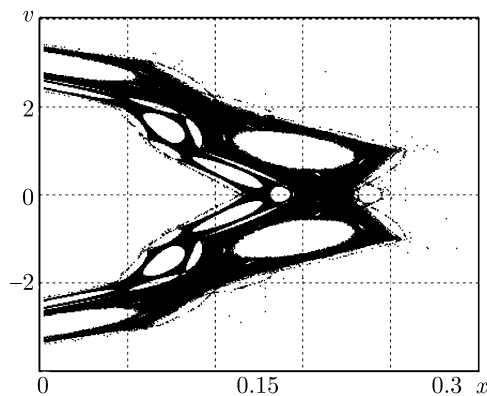


Рис. 13. Фазовый портрет системы частиц ($N = 10^6$) при $t = 250$, помещенных в гравитационное поле ($g = 20$), с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.15, w = 10$)

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).

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

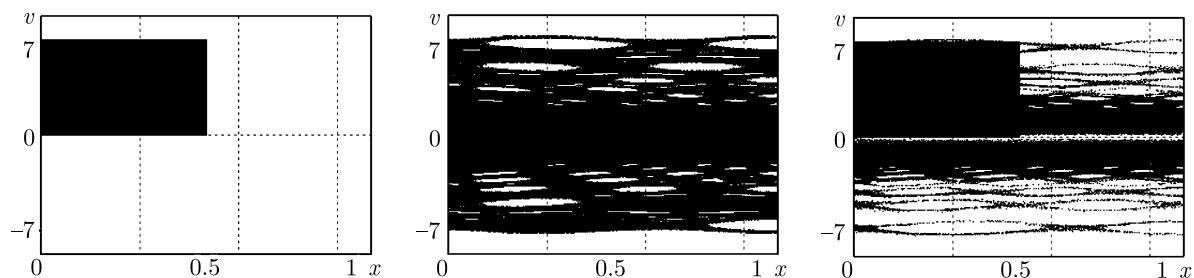


Рис. 14. Фазовый портрет системы частиц в отрезке с тяжелым поршнем,двигающимся по кусочно-параболическому закону ($A = 0.1, w = 10$), в момент времени $t = 0$ (начальное состояние), $t = 35$ (момент обращения времени) и $t = 70$ (момент, соответствующий возврату системы в исходное состояние). Начальное распределение по координатам $w_0(x)$ равномерное на отрезке $[0, 0.5]$, по скоростям $w_0(v)$ равномерное на отрезке $[0, 7]$

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. 15), 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. 15), 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.

Добавление к такой системе однородного гравитационного поля приводит к установлению распределения Больцмана по координатам (рис. 16), 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. 17).

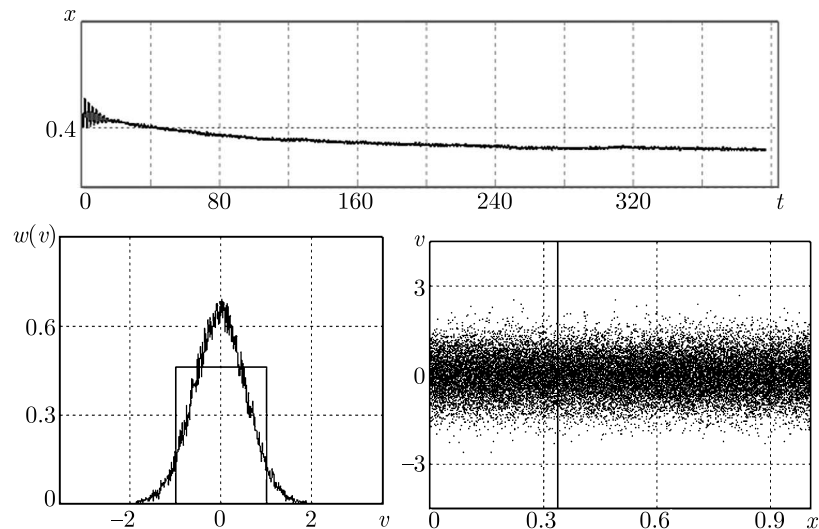


Рис. 15. Двухэтапный приход поршня к положению равновесия, итоговые максвелловское распределение частиц по скоростями и фазовый портрет системы (положение поршня отмечено прямой). Число частиц справа и слева от поршня $n_1 = 10^5$ и $n_2 = 2 \cdot 10^5$, соответственно. Время расчета $t = 395$. Начальное распределение по скоростям справа и слева от поршня $\rho_0(v)$ равномерное симметричное $[-1, 1]$

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.

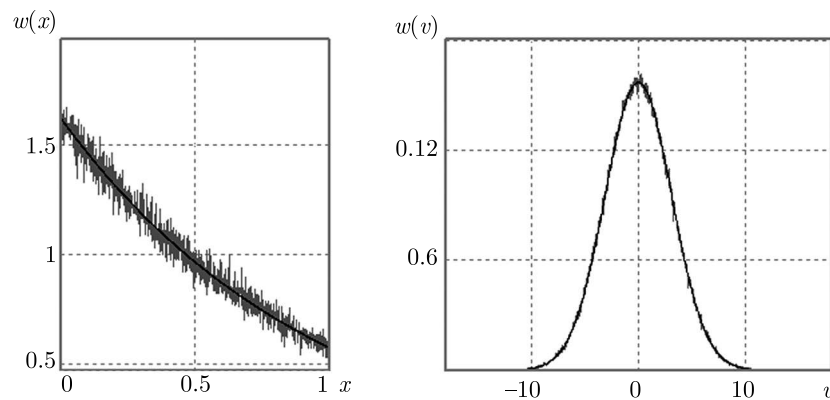


Рис. 16. Полученные распределения Больцмана и Максвелла для системы частиц с легким подвижным поршнем в гравитационном поле ($n_1 = 5 \cdot 10^5$, $n_2 = 10^2$, $g = 5$, $m = 1$, $M = 10$). Черным изображены функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля и средней энергии

6. Дискуссия

Суммируем вкратце основные результаты компьютерных экспериментов с системами многих частиц в отрезке, полученные в работе.



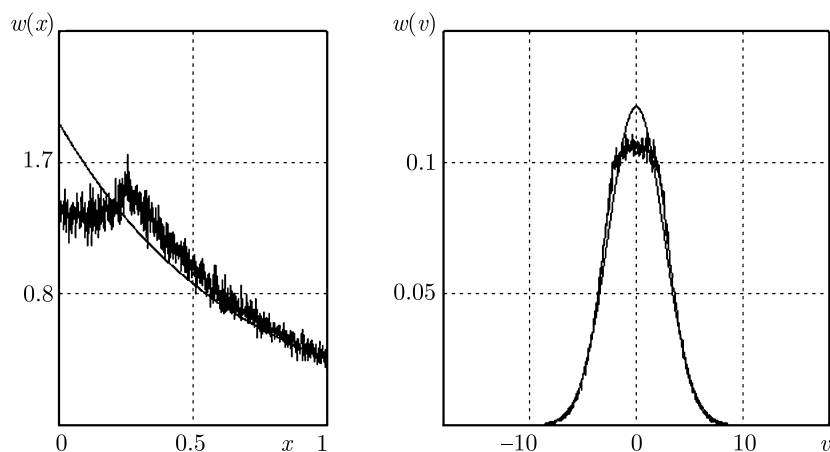


Рис. 17. Распределения по координатам и скоростям в случае большого количества частиц, не участвующих в столкновении с поршнем ($n_1 = 2 \cdot 10^5$, $n_2 = 1 \cdot 10^5$, $g = 5$, $m = 1$, $M = 10$) и функции Больцмана и Максвелла при соответствующих значениях поля и средней энергии

- 1°. В динамических системах невзаимодействующих частиц (бесстолкновительный газ в отрезке, частицы которого упруго отражаются от концов, в гравитационном поле и без) со временем устанавливается *статистическое равновесие* (рис. 1, 2).

Добавление гравитационного поля не приводит к установлению распределения Больцмана по координатам. Получаемые в ходе моделирования распределения зависят от начальных условий и закона изменения внешнего поля.

Такие системы заведомо *обратимы* во времени, и используемая точность расчетов не приводит к потере обратимости в ходе компьютерного эксперимента. Тем не менее, достигается лишь статистическое равновесие.

- 2°. В неконсервативной динамической системе невзаимодействующих частиц в отрезке, один из концов которого колеблется по заданному периодическому закону, происходит перераспределение энергии за счет ударов частиц о колеблющийся тяжелый поршень. И в этом случае устанавливается лишь *статистическое равновесие*.

Для таких систем свойственно появление стохастического слоя, внутри которого характерно экспоненциальное разбегание траекторий и, как следствие, накопление ошибок счета, которое не может быть устранено на достаточно больших промежутках времени (рис. 14). Это можно интерпретировать как *необратимость* системы во времени, что опять же не приводит к установлению в данном случае термодинамического равновесия.

- 3°. В системе невзаимодействующих частиц в отрезке, разделенных подвижным поршнем конечной массы (сравнимой, но не равной массе частицы) со временем устанавливается *термодинамическое равновесие*. При этом частицы равномерно распределены по отрезку, а одночастичное распределение по скоростям совпадает с *максвелловским*. Соударения с поршнем в этом случае происходят по законам сохранения энергии и импульса, то есть система консервативна.

Кроме того, такая система *обратима* во времени не только «в принципе», но и в численном эксперименте не наблюдается накопления ошибок счета. Возврат к начальному

состоянию возможен в любой момент времени (при достаточной точности вычислений), в том числе, и после установления равновесия.

Добавление к такой системе гравитационного поля приводит к установлению *распределения Больцмана* по координатам (рис. 15).

Обсудим связь этих результатов с полученными ранее теоретическими предсказаниями и устоявшимися гипотезами о процессе релаксации.

Проведенные эксперименты подтвердили ранее выдвинутые предположения [1] о приходе бесстолкновительного газа в отрезке к статистическому равновесию в слабом пределе, при этом одночастичное распределение по координатам равномерно на отрезке, а распределение по скоростям симметрично (1°).

Не подтвердилась гипотеза об установлении распределения Больцмана по координатам для бесстолкновительного газа в отрезке при медленном включении гравитационного поля (1°).

Не нашло подтверждения существующее мнение, что сосуд с колеблющейся стенкой может служить моделью термостата (2°). Хотя в таких системах и происходит перераспределение энергии, но не устанавливается тепловое равновесие.

Как видно из приведенных результатов компьютерных экспериментов, установление в динамической системе многих частиц термодинамического равновесия не зависит от наличия хаоса и необратимости в этой системе, как того требует широко распространенная гипотеза молекулярного хаоса [7]. Обратимость в системе частиц совмещается с установлением статистического (1°) и термодинамического (3°) равновесий. В то же время, хаос, приводящий к необратимости, сочетается с установлением в системе не универсального теплового, а лишь статистического равновесия (2°).

7. Приложение

7.1. Постановка вычислительного эксперимента

Объектом моделирования являются системы, состоящие из $N = 1-10 \cdot 10^6$ числа частиц, движущихся в пределах отрезка $[0, 1]$ либо свободно, либо под действием постоянной силы. Таким образом, уравнения движения можно проинтегрировать аналитически.

Если частица движется свободно в промежутке времени между ударами, то координата и скорость i частицы рассчитываются по формулам

$$\begin{aligned}x_i(t) &= x_i^k + v_i^k(t - t_i^k), \\v_i(t) &= v_i^k,\end{aligned}$$

если частицы движутся с постоянным ускорением g , уравнения движения также интегрируются аналитически

$$\begin{aligned}x_i(t) &= x_i^k + v_i^k(t - t_i^k) + \frac{g}{2}(t - t_i^k)^2, \\v_i(t) &= v_i^k + g(t - t_i^k),\end{aligned}$$

где x_i^k — координата i -ой частицы в момент k -го удара со стенкой, t_i^k — момент времени k -го столкновения i -ой частицы со стенкой, v_i^k — скорость i -ой частицы после k -го удара со стенкой, t — текущее время счета.

Следующий момент удара i -ой частицы о стенку (поршень) t_i^{k+1} определяется численно при решении уравнений движения частицы и стенки: $x_i(t_i^{k+1}) = X(t_i^{k+1})$, где

- $X(t) = 0$ — левая стенка неподвижна,
- $X(t) = f(wt)$ — левая стенка (поршень) движется по заданному периодическому закону с периодом $T = \frac{2\pi}{w}$,
- $X(t) = 1$ — правая стенка.

Скорость частицы после удара о стенку (поршень) меняется:

$$v_i^{k+1} = -v_i(t_i^{k+1}) + \dot{X}(t_i^{k+1}).$$

Расчет проходит в два этапа. Первый этап содержит расчет координат $x(t)$ и скоростей $v(t)$ всех частиц за указанный временной шаг ΔT вывода отображений, в течение которого может происходить несколько соударений каждой частицы со стенкой (поршнем); второй — статистическую обработку полученных значений с расчетом одночастичных функций распределения по координатам $w(x)$ и по скоростям $w(v)$, первых четырех неприводимых моментов функций распределений системы, энтропий S_x, S_v, S_{xv} . Одночастичная функция распределения по координатам и скоростям получается путем распределения частиц по ячейкам шириной dx, dv , число которых в эксперименте $n \sim 1000$.

Таким образом, в каждый момент времени (через ΔT) можно наблюдать фазовый портрет системы, функции распределения по координатам и скоростям, а также временную зависимость неприводимых моментов, по которой можно судить о времени прихода системы к равновесию (статистическому или термодинамическому).

Законы движения поршня, с которым происходят столкновения выбирались в виде, допускающем аналитическое решение для определения момента соударения t_i^k :

- кусочно-линейная функция $f(wt) = \begin{cases} A(1 - 2wt), t \in [0, T/2] \\ A(-1 + 2wt), t \in [T/2, T]; \end{cases}$
- кусочно-параболическая функция $f(wt) = \begin{cases} A(1 - 8(wt)^2), t \in [0, T/3] \\ 8A(wt - 1)^2, t \in [T/3, 2T/3] \\ A(1 - 8(wt - 1)^2), t \in [2T/3, T], \end{cases}$

где A — амплитуда колебания поршня, w — частота колебания поршня, T — период колебания поршня.

Использование законов движения для частиц и стенок позволяет проводить вычисления траекторий движения частиц с машинной точностью.

При моделировании системы частиц с поршнем конечной массы взаимодействие между частицами и поршнем происходило по законам упругого столкновения. Подвижный поршень реализован в виде непроницаемой частицы конечной массы, делящей отрезок с частицами на два интервала. Закон изменения скоростей частицы и поршня при ударе:

$$v_2' = \frac{2v_1M + v_2(M + m)}{M + m},$$

$$v_1' = \frac{v_1(M - m) + 2v_2}{M + m},$$

где v_1, M — скорость и масса поршня, v_2, m — скорость и масса частицы.

Вычисление траекторий движения частиц в этой модели также происходит с машинной точностью.

Среднее число ударов частицы о стенки (поршень) в каждом расчете $\sim 10^3$.

Точность расчетов контролируется обратимостью, так как динамические уравнения заведомо обратимы.

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.
- [10] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л.: Гостехиздат, 1946.
- [11] Козлов В. В., Трещев Д. В. Слабая сходимости решений уравнения Лиувилля для нелинейных гамильтоновых систем // ТМФ, 2003, vol. 134, с. 388–400.
- [12] Boltzmann L. On Certain Questions of the Theory of Gases // Nature, 1895, vol. 51, pp. 413–415.
- [13] Zaslavsky G. M. From Hamiltonian Chaos to Maxwell's Demon // Chaos, 1995, vol. 5, № 4, pp. 653–661.
- [14] Berman G. P., Izrailev F. M. The Fermi–Pasta–Ulam Problem: Fifty Years of Progress // Chaos, 2005, vol. 15, 015104.
- [15] Ehrenfest P., Ehrenfest T. Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik // Enzyklopädie d. Math. Wiss., 1912, vol. IV, 2, II, H. 6, pp. 3–90.
- [16] Zaslavsky G. M. Chaotic Dynamics and the Origin of Statistical Laws // Physics Today, 1999, vol. 52, pp. 39–45.