

# Распределение скоростей молекул идеальных газов и его связь с распределением Максвелла

## 1 Руководство пользователя

Разработанная программа моделирует совместное состояние двумерных идеальных газов, отличающихся массой молекулы, её радиусом и числом молекул. Пользователь может задавать температуру системы, число частиц, массы и их радиусы для каждого газа и число бинов гистограммы для анализа распределений скоростей. В главном окне отображается область с движущимися молекулами и несколько гистограмм: суммарное распределение скоростей, а также распределения для каждого типа частиц по отдельности. Кроме того, можно наблюдать значения средних энергий газов и общую кинетическую энергию. Интерфейс программы доступен на двух языках: русском и английском.

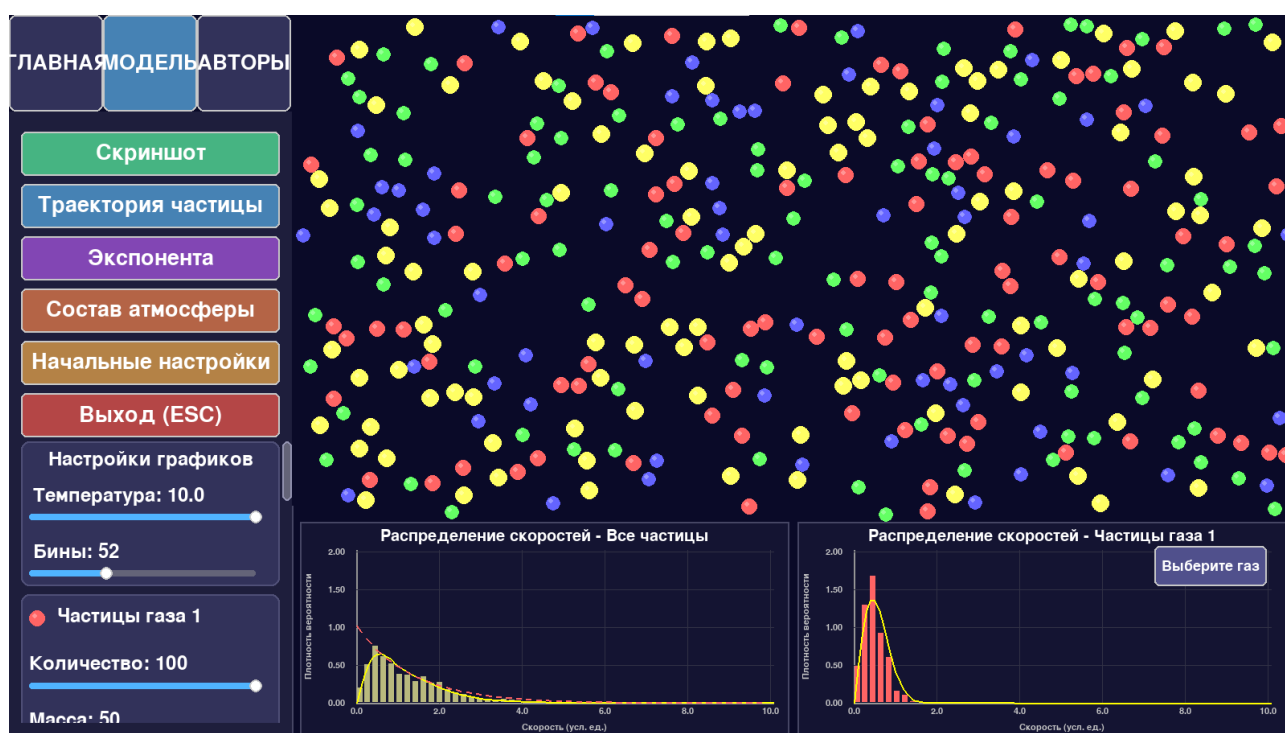


Рис. 1: Основной интерфейс программы.

Интерфейс позволяет:

- изменять температуру с помощью ползунка;
- регулировать число частиц, их массу и радиус для четырёх типов молекул;

- изменять число бинов гистограммы и наблюдать, как меняется форма распределения;
- включать режим отображения экспоненциальных “хвостов” распределения для анализа асимптотики;
- запускать и останавливать отслеживание траекторий отдельных молекул;
- моделировать “атмосферу” (композицию по типам частиц) и быстро возвращаться к параметрам по умолчанию;
- сохранять скриншоты текущего состояния моделирования в отдельную директорию.

**Суммирование распределений на общем графике.** Суммарная гистограмма скоростей формируется взвешенным суммированием гистограмм каждого типа газа. Для каждого типа частиц  $i$  вычисляется гистограмма скоростей  $hist_i$  из  $N_i$  частиц, затем нормализуется на общее число частиц  $N_{total} = \sum N_i$ . Весовой множитель для типа  $i$  равен  $w_i = N_i/N_{total}$ . Итоговая плотность вероятности:  $w_{sum}(v_k) = \sum_i w_i \cdot p_i(v_k)$ , где  $p_i(v_k)$  — вероятностная плотность  $i$ -го газа в  $k$ -м бине. Это обеспечивает корректное отражение состава смеси газов.

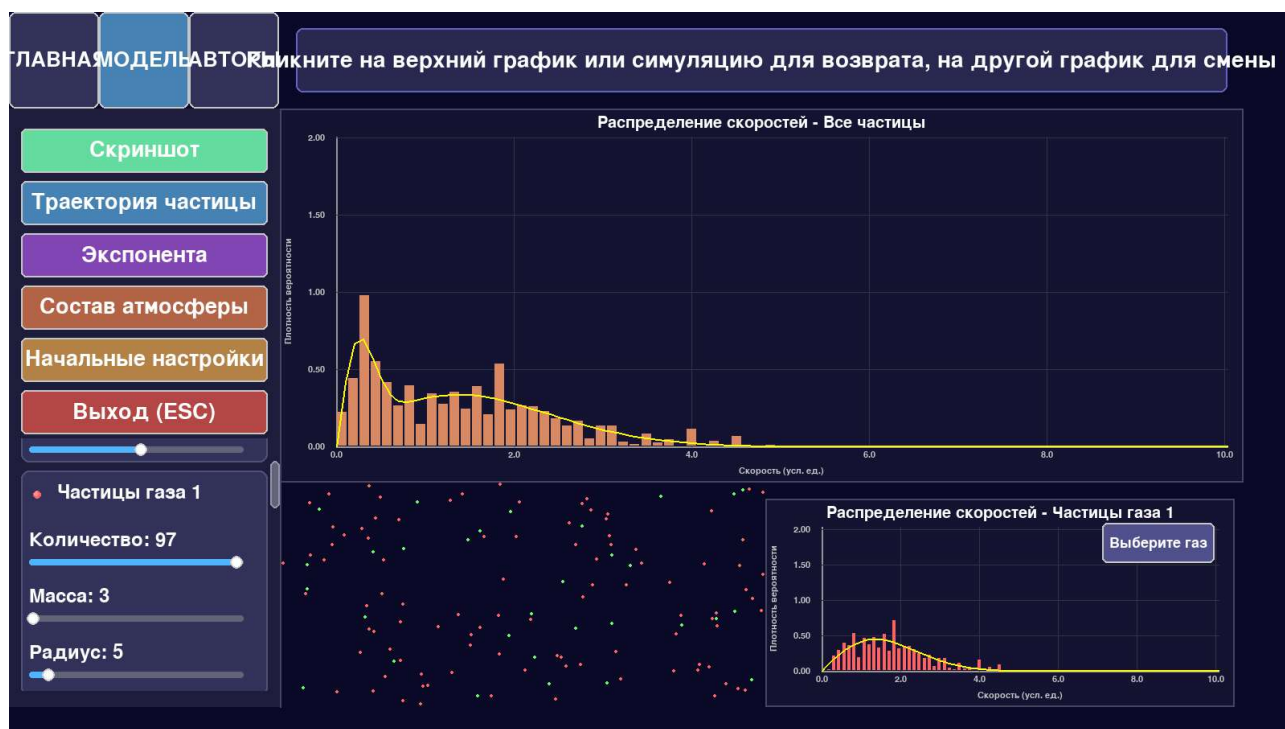


Рис. 2: Суммирование распределений 2-ух газов.

Предупреждение: программа может зависнуть при большом числе крупных молекул.

## 2 Вывод распределения скорости в двумерном идеальном газе

В статистической физике распределение скоростей молекул выводится из предположения статистической независимости проекций скорости и равномерного распределения энергии по степеням свободы. Для двумерного идеального газа скорость молекулы  $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$  имеет

две независимые проекции, каждая из которых подчиняется гауссовскому распределению из-за большого числа столкновений:

$$f(v_x)dv_x = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right) dv_x, \quad (1)$$

аналогично для  $v_y$ , где дисперсия  $\sigma^2 = kT/m$ .

Полная скорость  $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ . Вероятность нахождения молекулы с полной скоростью в кольце  $[v, v + dv]$  равна произведению распределений проекций с учетом элемента площади в полярных координатах  $2\pi v dv$ :

$$w(v)dv = f(v_x)f(v_y) \cdot 2\pi v dv = \frac{m}{2\pi kT} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \cdot 2\pi v dv. \quad (2)$$

Упрощая, получаем распределение Максвелла в двумерном случае:

$$w(v) = \frac{v}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma^2 = \frac{kT}{m}, \quad v \geq 0. \quad (3)$$

Это распределение Рэля возникает естественно как свертка двух независимых гауссовских проекций с якобианом полярных координат, что делает двумерную модель идеальной для численного моделирования в программе.

### 3 Теорема о распределении энергии по степеням свободы

Программа демонстрирует выполнение условий данной теоремы, поскольку, если взять самые лёгкие и самые тяжелые молекулы с разницей масс в 100 раз, то средние скорости отличаются примерно в 10 раз. Кинетическая энергия при этом одинаковая.

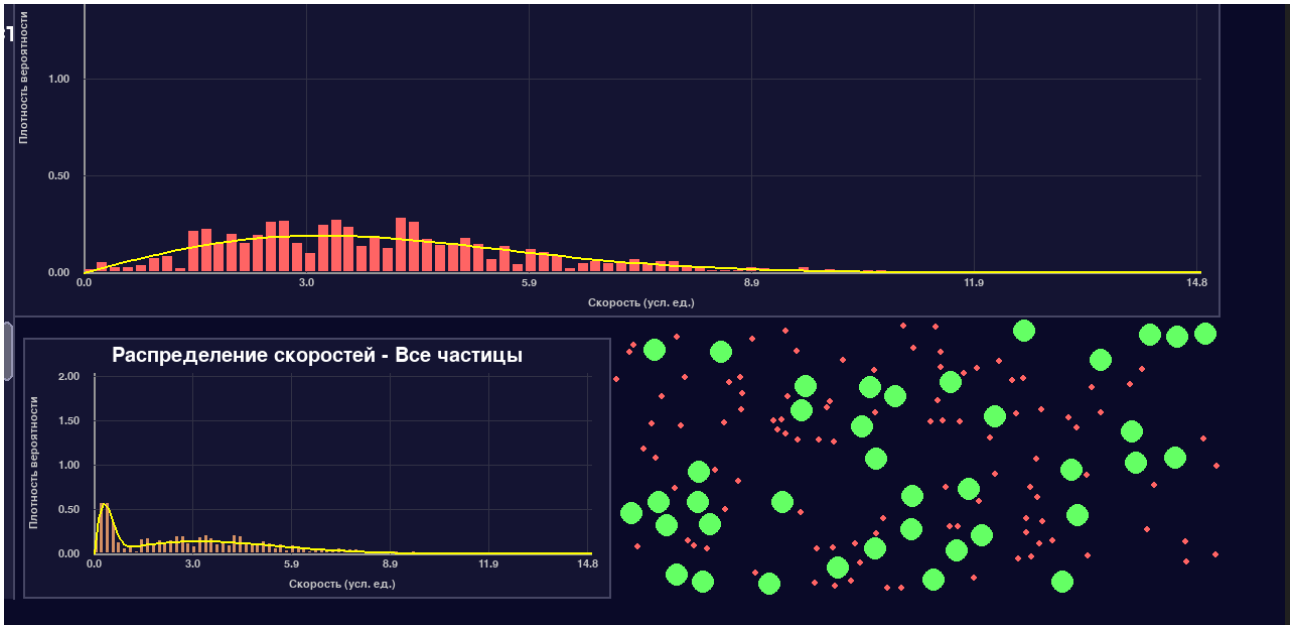


Рис. 3: Теорема о распределении энергии по степеням свободы.

## 4

Рассмотрим  $i$ -ю скорость одной молекулы в одном режиме, распределённую по Рэлею с условным параметром характерной скорости  $\sigma_i$ :

$$w(v/\sigma_i) = \frac{v}{\sigma_i^2} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_i^2}\right), \quad \langle v \rangle_i = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma_i. \quad (4)$$

Параметр  $\sigma_i$  распределён максвелловским законом:

$$w(\sigma_i) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{\sigma_i^2}{\lambda^3} \exp\left(-\frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}\right), \quad \langle \sigma_i \rangle = \frac{2\lambda}{\sqrt{\pi}}. \quad (5)$$

Тогда распределение усреднённой скорости молекулы идеального газа  $w_{av}(v)$  выражается интегралом:

$$w_{av}(v) = \int_0^\infty w(v/\sigma_i) w(\sigma_i) d\sigma_i. \quad (6)$$

Подставляя уравнения (4) и (5), получаем:

$$w_{av}(v) = \frac{4v}{\sqrt{\pi}\lambda^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_i^2} - \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}\right) d\sigma_i. \quad (7)$$

Этот интеграл является табличным и даёт точное решение в виде гамма-распределения с параметром формы 2 и параметром масштаба  $\lambda/\sqrt{2}$ :

$$w_{av}(v) = \frac{2v}{\lambda^2} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}v}{\lambda}\right), \quad \langle v \rangle_{av} = \sqrt{2}\lambda. \quad (8)$$

Для улучшения вводится малый параметр  $\varepsilon$  и аппроксимируется распределение параметра  $\sigma_i$  как:

$$w(\sigma_i) = C_1 \sigma_i^{2\varepsilon} \lambda^{-2\varepsilon-1} \exp\left(-\frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}\right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2}{\lambda\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}\right), \quad \langle \sigma_i \rangle \rightarrow \lambda\sqrt{\pi}, \quad (9)$$

где  $C_k$  — безразмерные нормировочные константы.

Распределение скоростей усредненной молекулы (приближённое) записывается как

$$w_{av}(v) = v^\varepsilon \lambda^{-\varepsilon-1} \int_0^\infty \sigma_i^{2\varepsilon-2} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_i^2} - \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}\right) d\sigma_i, \quad (10)$$

который приближённо вычисляется:

$$w_{av}(v) \approx C_2 v^\varepsilon \lambda^{-\varepsilon-1} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}v}{\lambda}\right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2}{\sqrt{\pi}\lambda} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}v}{\lambda}\right), \quad \langle v \rangle_{av} \rightarrow \lambda\sqrt{2}. \quad (11)$$

## 5 Аналогия

Молекулы идеального газа в данной модели можно мысленно сравнить с небольшими подвижными объектами, хаотично блуждающими в ограниченном пространстве. Подобно тому, как отдельные живые существа, к примеру, крысята в замкнутом пространстве, образуют сложную совокупность траекторий и скоростей, отдельные молекулы газа, сталкиваясь и обмениваясь импульсом, создают наблюдаемое макроскопическое распределение скоростей.

## 6 Суммирование распределений

Особенно впечатляет следующий факт: как в генетике два кареглазых родителя могут иметь светлоглазого ребёнка благодаря сочетанию доминантных и рецессивных признаков, так и в статистике суммарное поведение системы может радикально отличаться от поведения её отдельных компонент. Казалось бы, сумма нескольких гауссообразных распределений скоростей разных типов молекул должна оставаться “похожей на гауссиану”, однако численный эксперимент показывает, что при подходящем выборе параметров и подгонке параметров модель даёт суммарное распределение с ярко выраженным экспоненциальным характером.

Этот результат выглядит парадоксальным: из гладких симметричных гауссовых “кирпичиков” возникает общая кривая с почти чисто экспоненциальным распадом хвостов. Такое поведение подчёркивает, насколько богатыми могут быть эффекты суперпозиции распределений и как нетривиально макроскопическое распределение может отражать скрытую смесь микросостояний. Визуальное наблюдение того, как набор гауссообразных вкладов складывается в экспоненциально затухающую совокупность, производит сильное впечатление и заставляет по-новому взглянуть на связь между микроскопическими механизмами и макроскопическими законами.

## 7 Искусство подгонки экспоненты

Подгонка экспоненциального распределения суммой четырёх распределений Рэлея — это не просто техническая процедура, а целое искусство выбора параметров. В этом процессе приходится нащупывать такие комбинации амплитуд и характерных масштабов, в частности, температуры, массы молекул и тд, чтобы отдельные “колокольчики” Рэлея слились в одну почти безупречную экспоненту, причём малейшее смещение любого параметра сразу разрушает иллюзию простой гладкой кривой.

Лаконичность итогового графика экспоненты неожиданно напоминает знаменитый портрет женщины тремя мазками кисти Рене Грюо: за кажущейся простотой линий скрывается чрезвычайно тонкая работа по подбору формы, масштаба и ритма. Здесь роль этих трёх мазков играют четыре распределения Рэлея, которые, будучи тщательно настроенными, создают визуально предельно простой и изящный результат.