

Моделирование газа Лоренца: теоретическое обоснование

1. О проекте

Цель данного исследования состоит в знакомстве с математической моделью газа Лоренца и в разработке программного продукта, позволяющего симулировать микроскопическое поведение газа и замерять некоторые его макроскопические параметры в реальном времени. Например, распределение частиц по скоростям в заданной области пространства. Ключевой особенностью нашего проекта является модификация газа Лоренца: моделируется тепловое движение путем гармонической пульсации радиусов частиц-ионов.

2. История вопроса: газ Лоренца

Голландский физик Хендрик Антон Лоренц родился в Арнхеме в семье Геррита Фредерика Лоренца и Гертруды (ван Гинкель) Лоренц. Лоренц учился в средней школе Арнхема и имел отличные оценки по всем предметам.

В 1870 г. он поступил в Лейденский университет, где познакомился с профессором астрономии Фредериком Кайзером, чьи лекции по теоретической астрономии заинтересовали его. Менее чем за два года Лоренц стал бакалавром наук по физике и математике.

В 1880 г. научные интересы Лоренца были связаны главным образом с кинетической теорией газов, описывавшей движение молекул и установление соотношения между их температурой и средней кинетической энергией. В 1892 г. Лоренц приступил к формулированию теории, которую как сам он, так и другие впоследствии называли теорией электронов. Электричество, утверждал Лоренц, возникает при движении крохотных заряженных частиц – положительных и отрицательных электронов. Позднее было установлено, что все электроны отрицательно заряжены. Лоренц заключил, что колебания этих крохотных заряженных частиц порождают электромагнитные волны, в том числе световые и радиоволны, предсказанные Максвеллом и открытые Генрихом Герцем в 1888 г. В 1890-е гг. Лоренц продолжил занятия теорией электронов. Он использовал ее для унификации и упрощения электромагнитной теории Максвелла, опубликовал серьезные работы по многим проблемам физики, в том числе о расщеплении спектральных линий в магнитном поле.

Лоренц в 1905 г. впервые исследовал представляющий особый интерес, хотя и очень специальный, случай бинарной газовой смеси. Модель газа Лоренца была предложена им в тот же год, как модель электропроводности металлов и с тех пор носит его имя.

Газом Лоренца называется динамическая система, которая описывает поведение счетного числа частиц, свободно движущихся между хаотически разбросанными неподвижными сферическими рассеивателями, от которых частицы отражаются по закону упругого удара (тангенциальная составляющая остаётся неизменной, а нормальная меняет знак).

В модели Лоренца считается, что молекулы одного компонента значительно легче молекул другого компонента. Кроме того, предполагается, что концентрация

легкого компонента много меньше тяжелого; это позволяет пренебречь столкновениями между легкими молекулами. Лоренц надеялся использовать свою модель для описания электронов в твердом теле, но для этой цели она оказалась непригодной из-за дальнодействующего характера кулоновского взаимодействия и существенного влияния квантовых эффектов. Однако благодаря тому, что модель Лоренца допускает точное решение, она может быть использована в качестве эталона, т. е. критерия для проверки приближенных методов. Кроме того, для некоторых физически интересных случаев можно построить теорию возмущений, используя в качестве первого приближения газ Лоренца.

3. Модифицированная модель: пульсация ионов

В нашем проекте используется модификация газа Лоренца. Мы предполагаем, что радиусы ионов пульсируют по гармоническому закону. Частота пульсации у всех ионов одинакова, однако начальные фазы различны.

Физическая интерпретация изменения размеров ионов, а также некоторых особенностей поведения электронов может быть неоднозначна. Поэтому терминология допускает изменения: решетка ионов – это силовые центры, рассеиватели, летающие в ней электроны – некие легкие частицы. Однако далее будем для краткости по-прежнему говорить о ионах и электронах.

4. Алгоритм решения: компьютерная реализация

Для визуализации модели мы использовали следующий алгоритм. Для каждого электрона рассчитываем время и координаты его столкновения с ионом или со стенкой, которое может произойти за небольшой промежуток времени. Если столкновение было, изменяем соответствующим образом положение и скорость электрона. Обновляем изображение.

В программе хранится набор ионов со значениями параметров каждого из них: центр иона C (в векторном виде) и начальная фаза колебания b , остальные параметры считаются равными для всех ионов. Также хранится набор электронов со значениями параметров каждого из них: текущая координата P и скорость движения V (оба параметра в векторном виде). После очередного столкновения для каждой частицы пересчитывается момент времени ее следующего столкновения с ионом или стенкой сосуда.

Для подсчета распределения частиц по скоростям достаточно просмотреть все частицы в пространстве и вычислить интересующие величины.

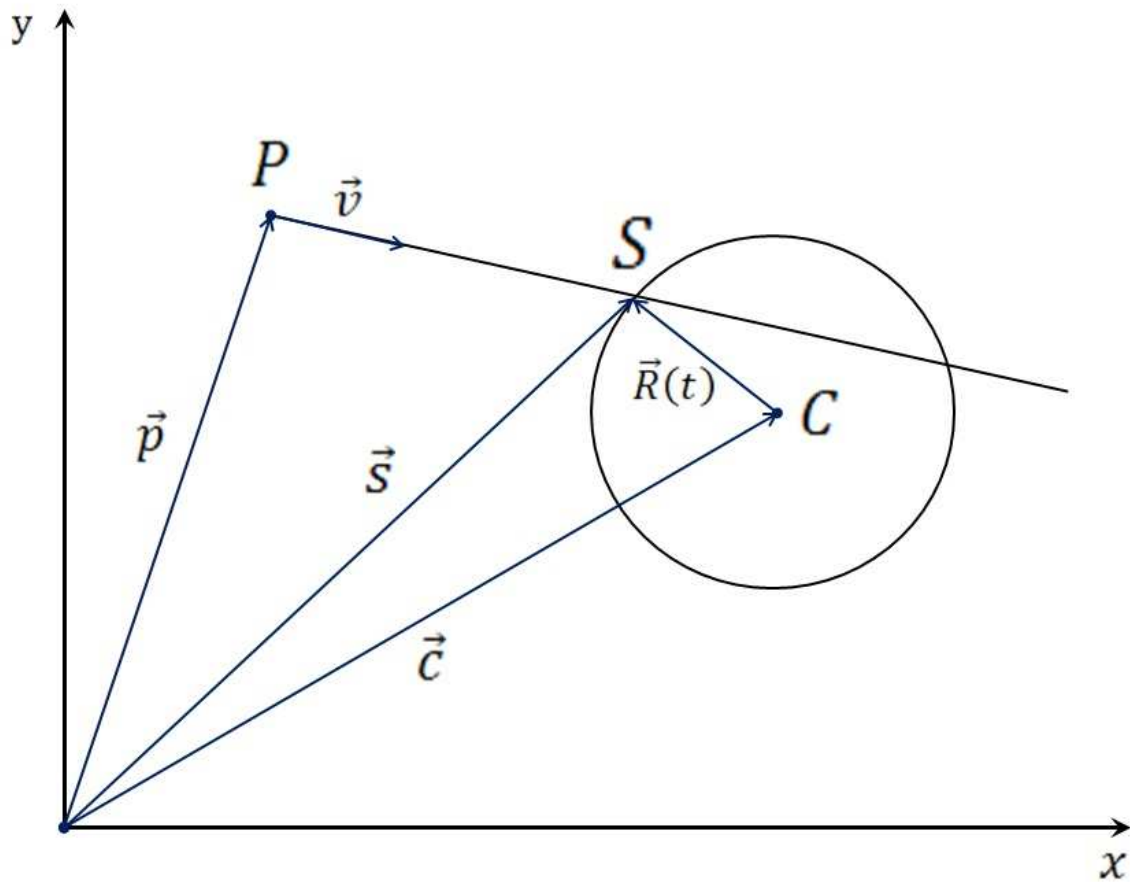
5. Алгоритм решения: теоретические выкладки

Задача: найти координаты первой точки столкновения S электрона, движущегося из точки P со скоростью v , с поверхностью иона радиуса $R(t)$ с центром в точке C на временном отрезке $[0, t]$.

Радиус иона $R(t)$ изменяется по гармоническому закону. Изменение можно представить следующим уравнением:

$$R(t) = R_0 + \Delta R \sin(\omega t + \varphi)$$

где R_0 – минимальный радиус иона, R – разность между максимальным и минимальным радиусами иона.



Для нахождения столкновения с ближайшим ионом необходимо решить следующее векторное уравнение для каждого иона:

$$(\vec{p} + \vec{v}t - \vec{c})^2 = R^2(t)$$

Полученное численно значение T – искомое время столкновения. Координаты точки столкновения S находятся следующим образом:

$$\vec{s} = \vec{p} + \vec{v}T$$

6. Научная ценность и приложения проекта

Газ Лоренца является одной из основных и наиболее популярных моделей неравновесной статистической механики. Было проведено множество исследований на эту тему, интенсивное изучение продолжается и в настоящее время (данному

объекту посвящены математические работы Я.Г.Синая, Л.А.Бунимовича, Г.Галавотти, Д.Орнштейна, Ш.Голдстейна, и многих других). Необходимость исследования газа Лоренца объясняется тем, что эта динамическая система естественно возникает при моделировании некоторых физических процессов. К таковым, например, относится движение медленных нейтронов в тяжелой жидкости поведение смеси двух газов, один из которых состоит из легких молекул, а другой - из тяжелых.

Исследование газа Лоренца сильно облегчается возможностью провести моделирование на компьютере. Наш проект был посвящен проведению такого моделирования. Пользователь программы может увидеть протекающие процессы собственными глазами. Мы визуализируем движение электронов среди тяжелых ионов, закрепленных в решетку. Можно наблюдать за соударениями электронов с ионами, следить, как изменяется их скорость и траектория. Помимо зрительного образа моделируемых процессов, программа позволяет рассчитать интересующие нас параметры, проследить зависимость ключевых характеристик. С помощью программы решается следующая задача: фиксируем заданную область пространства и подсчитываем плотность распределения частиц, и также распределение скоростей частиц в заданной области подпространства.

Данный проект может использоваться в качестве наглядного пособия для изучающих модель газа Лоренца, для более полного и детального понимания происходящих процессов.