УДК 535.375.36

О СООТВЕТСТВИИ МОДЕЛИ ФИЗИЧЕСКИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ МНОЖЕСТВУ ВЫБОРОЧНЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Псарев В.И., д. ф.- м. н., профессор

Запорожский государственный университет

Установление функциональной зависимости множества выборочных значений, полученных опытным путем, распадается на два этапа. Сначала выбирается вид формулы и значения входящих в нее параметров, для которых приближение функции к последовательности экспериментальных значений оказывается наилучшим. Далее определяется возможность ее применения, обычно, методом выравнивания. Для этой цели могут быть использованы наиболее употребительные эмпирические формулы, содержащиеся в ряде справочных руководств по математике. Однако такой подход к анализу экспериментальной последовательности значений той или иной величины не способствует выявлению физической сущности породивших ее причин.

Значимость и полноценность теоретических разработок или же установленных математических зависимостей и вытекающих из них заключений должны устанавливаться путем критериальных оценок. Дело в том, что между выработанной человеческим сознанием теоретической сущностью познаваемого объекта (процесса, явления) и его природным содержанием должно существовать изначальное отношение «сходства в различиях и различия в сходстве» (принцип Аквината [1]). Степень осознания природной сущности изучаемого объекта находит свое отображение в теории в виде его модели. Ее последующее объективирование может быть достигнуто только путем использования языка математики, что обеспечит доступность восприятия теоретических предпосылок путем конкретизации приближающихся к истине представлений.

Особо важное значение указанное положение приобретает при оценке значимости теоретических разработок, относящихся к многоэлементным системам. Можно было бы обойтись рекомендацией, содержащейся в работе [2]. При установлении согласия множества выборочных значений с заданной гипотезой H необходимо вычислить некоторую подходящую меру $D \geq 0$ отклонения опытного распределения от теоретического (или же гипотетического D_0) такую что, если гипотеза H верна, то $P(D > D_0) = \varepsilon$,

где ε - заранее заданный уровень значимости. В этом случае, с вероятностью, равной ε , можно отвергнуть в действительности справедливую гипотезу, хотя ε можно сделать сколь угодно малой (и это признается автором работы [2], стр. 571).

Выбранная функция и аппроксимируемая ею последовательность значений должны обладать одним и тем же законом построения. Этот факт может быть установлен, если сравнивать соотношения между их собственными моментами. Поясним на отдельных примерах возможность решения этой проблемы.

Газообразная система. Скоростной спектр атомов (молекул) газа, находящегося в объеме при постоянной температуре, зададим в виде системы его собственных моментов

$$M_n = \int_0^\infty u^{n+p} \exp(-au^2) du, \qquad (1)$$

где $u = \frac{\upsilon}{\upsilon_в}$, υ - скорость молекулы; $\upsilon_в$ -наиболее вероятная скорость; n и p - могут принимать целочисленные и дробные значения, равные или больше нуля; a и c – постоянные. Если n = 0 и a = 1, то подынтегральная функция при p = 2 соответствует объемному распределению по скоростям, а при p = 3 – так называемому трансмиссионному распределению Максвелла [3].

Произведя над функцией $M'_n = u^{n+p} \exp(-au^2)$ математические действия, аналогичные применяемым в работах [1,4], получим соотношение между моментами

$$(n + p + 1)M_n = 2aM_{n+2}, \qquad (2)$$

где $M_n = \int_0^\infty M'_n du$ и $M_{n+2} = \int_0^\infty u^2 M'_n du$.

При $p = 2$ величина $a = \frac{3M_0}{2M_2} = \frac{5M_2}{2M_4} = \ldots$ и т.д., что позволяет определить численные значения величин p и a для заданного распределения. В качестве примера воспользуемся данными скоростного спектра молекул кислорода из учебного пособия [5] (таблица 1). Определив при $p = 2$ численное значение $a = 1{,}01$, получим: в соотношении (2) левая часть $\ell_n = (3+n)M_n$ при разных n практически равна правой части $r_n = 2{,}02 \cdot M_{n+2}$. Их различие, особенно для больших n, вызвано неточностью расчетов несобственных интегралов и наличием малого количества скоростных интервалов $\Delta\upsilon$. Однако, если с помощью формулы $f_2(u) = 0{,}588u^2\exp(-1{,}01u^2)$ рассчитать значения плотности распределения на каждый интервал скоростей, то получим вполне удовлетворительное совпадение с данными задаваемого массива $f_1(u)$. Заметим, проделанный расчет следует считать примерным и показательным, так как приведенные в [2] значения $f_1(u)$ не являются экспериментальными.

Дисперсно-упрочненные сплавы. Экспериментально наблюдаемые распределения микрочастиц по размерам в таких сплавах, соответствующие разным временам их отпуска, характеризуются положительной, нулевой и отрицательной асимметрией. Применительно к решаемой задаче, как было показано ранее [6], выражение

$$\varphi(u) = \frac{3\upsilon_k\gamma(u)}{\varepsilon\upsilon_k u^3 + \upsilon_k u^{2-\alpha} - u + 1}\exp\left[-3\upsilon_k\int\frac{\gamma(u)du}{\varepsilon\upsilon_k u^3 + \upsilon_k u^{2-\alpha} - u + 1}\right], \qquad (3)$$

где $f(r,t) = \varphi(u)r_k^{-4}$ - функция распределения микрочастиц по размерам; $u = \frac{r}{r_k}$ - относительный размер микрочастицы радиуса r, r_k - критический радиус (отделяет в ансамбле размеров растущие микрочастицы от растворяющихся); υ_k - скорость изменения r_k в ансамбле размеров дисперсных частиц; $\gamma(u) = \varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}$, при допустимых значениях параметров $0 \le \alpha \le 1$ и $0 \le \varepsilon \le 1$, воспроизводит все многообразие экспериментально наблюдаемых распределений. Но совместимость последних с распределениями множества, производимого выражением (3), нуждается в подтверждении.

Сформируем смешанные моменты, приняв $M'_{nm} = u^n(u_g - u)^m \cdot \varphi(u)$, где $u_g = \frac{r_g}{r_k}$ - верхняя граница относительных размеров (размах распределения); r_g - наибольший размер микрочастиц, и произведем математические преобразования, аналогичные ранее описанным [1,4]. В конечном итоге получим соотношение между моментами

$$(3-n)\upsilon_k M_{nm} = nL_n + mL_m, \qquad (4)$$

где $M_{nm} = \int_0^{u_g} M'_{nm}du$, n и m - целые или дробные положительные числа; значения $L_n = M_{n-1,m-\gamma(u)} - M_{n,m-\gamma(u)}$ и $L_m = M_{n+1-\gamma(u),m-1} - \upsilon_k M_{n+1,m-1} - M_{n-\gamma(u),m-1}$. В терминах моментов используются обозначения:

$$M_{n-1,m-\gamma(u)} = \int_0^{u_g} M'_{nm}\left[u\,\gamma(u)\right]^{-1}du;\ M_{n+1-\gamma(u),m-1} = \int_0^{u_g} M'_{nm}u\left[(u_g - u)\,\gamma(u)\right]^{-1}du \text{ и т.д.}$$

Соотношение (4) обладает множеством признаков, которые могут быть положены в основу критерия совместимости теоретических распределений с экспериментальными. Например, при $n = 3$ и $m \neq 0$ имеем равенство $|3L_3| = |mL_m|$; при $n = 3$ и $m = 0$ моменты распределения удовлетворяют условию: $M_{2-\gamma(u)} = M_{3-\gamma(u)}$; при $n > 3$ и $m = 0$ выполняется зависимость $(3-n)\upsilon_k M_n = 3(M_{n-u\gamma(u)} - M_{n-\gamma(u)})$ и ряд других.

В таблице 2 приведены данные расчетов, указывающие на степень совместимости теоретического распределения с экспериментальным [6]. Распределение Вагнера [7] следует из выражения (3) при $\alpha = \varepsilon$

=0 и для него с высокой точностью выполняется условие: $|3L_3| = |mL_m|$. С меньшей точностью, но в пределах погрешности эксперимента, выполняется то же условие для экспериментальной гистограммы [6].

В таблице 3 приведены данные расчетов с использованием иного условия совместимости распределений. Если для специально подобранных *n* и *m* значения $|L_n| = |L_m|$, то для теоретических функций плотности распределения с высокой точностью выполняется условие $\ell_{nm} = r_{nm}$, где $\ell_{nm} = (3-n)\upsilon_k M_{nm}$ и $r_{nm} = n L_n + mL_m$. И, опять-таки, то же условие выполняется и для экспериментального распределения (в пределах погрешности эксперимента). Очевидно, степень указанной совместимости распределений для разных времен изотермического отпуска сплавов не должна сохраняться одной и той же. Появляется возможность анализа, наряду с основным, и сопутствующих процессов, протекающих в объеме при отпуске сплавов.

Система фотонов видимого излучения. Обобщенное для плотности распределения мощности излучения в непрерывном солнечном спектре было получено в таком виде [8,9]

$$I(\varepsilon) = C_1 \varepsilon^a \left[1 - \exp(-b\varepsilon)\right](\exp\varepsilon - 1)^{-1}\left[\exp(\varepsilon - \varepsilon_0) + 1\right]^{-1}, \qquad (5)$$

где $\varepsilon = \dfrac{h\nu}{kT}$, *h* - постоянная Планка; $\nu = \dfrac{c}{\lambda}$ - частота световой волны, *c* - скорость света и λ - длина волны; *k* - постоянная Больцмана; *T* - температура по шкале Кельвина; a, *b* и ε_0 определяются из данных опыта. Между рассчитанными с помощью (5) и экспериментальными значениями интенсивности получено [8] достаточно хорошее совпадение. Но какова полнота совместимости описания с помощью (5) экспериментального спектра [10]? Попытаемся решить и эту задачу.

Сформируем на основе одного из признаков спектра – фактора, выражаемого сомножителем в функции плотности (5), смешанные моменты. Введя новую переменную через соотношение $\exp\varepsilon - 1 = x(d-x)^{-1}$, выражение (5) сведем к виду

$$M'_{nm} = C_1\left[\ln\left(\frac{d}{d-x}\right)\right]^a\left[1-\left(1-\frac{x}{d}\right)^b\right]x^{-(1+n)}(d-x)^{1+m}\left[d\exp(-\varepsilon_0)+d-x\right]^{-1} \qquad (6)$$

где *n* и *m* – целые или дробные положительные числа.

Произведем математические преобразования, аналогичные приведенным в работах [8,9], получм соотношение между пакетами моментов

$$\ell_{nm} = r_{nm}, \qquad (7)$$

где $\ell_{nm} = nM_{nm} + (1+m)M_{n+1,m-1}$ и $r_{nm} = aM_{n+1,m-1-\gamma_1} + bM_{n+1-\gamma_2,m+b-1} + M_{n+1,m-\gamma_3}$ - пакеты моментов;

$$M_{nm} = \int_0^d M'_{nm}dx;\ M_{n+1,m-1} = \int_0^d M'_{nm}x(d-x)^{-1}dx;$$

$$M_{n+1,m-1-\gamma_1} = \int_0^d M'_{nm}x\left[(d-x)\gamma_1(x)\right]^{-1}dx,\ \gamma_1(x) = \ln\left(\frac{d}{d-x}\right);$$

$$M_{n+1-\gamma_2,m+b-1} = \int_0^d M'_{nm}x(d-x)^{b-1}\left[\gamma_2(x)\right]^{-1}dx,\ \gamma_2(x) = d^b - (d-x)^b;$$

$$M_{n+1,m-\gamma_3} = \int_0^d M'_{nm}x\left[\gamma_3(x)\right]^{-1}dx,\ \gamma_3(x) = d\exp(-\varepsilon_0) + d - x.$$

В таблице 4 приведены соответствующие разным *d* численные значения моментов, которые входят в соотношение (7). При расчетах принимали: изменение ε от 0,476 до 11,904 [8], $x = d\left[1-\exp(-\varepsilon)\right]$ и

$\Delta x = d\exp(-\varepsilon)\Delta\varepsilon$. Видим, что даже при этих условиях наблюдается приемлемое совпадение между ℓ_{nm} и r_{nm} для теоретического и экспериментального спектрального распределения.

Однако закон изменения численных значений моментов с увеличением d для теоретических и экспериментальных данных различен. Для теоретических значений: $M_{\alpha,\beta}^{(d)} = M_{\alpha,\beta}^{(1)} \cdot d^{\alpha+\beta}$, где $\alpha = n, n+1, \ldots$, $\beta = m, m-1, m-\gamma_3$ и т.д. Например, $M_{2,3}^{(4)} = M_{2,3}^{(1)} \cdot d^{-2+3} = 0{,}1574 \cdot 4 = 0{,}6296$. При этом, присутствие в моментах b, γ_1 и γ_2 не учитывается, а для $M_{n+1,m-\gamma_3}$ величина γ_3 принимается за единицу. В случае экспериментальных данных: $M_{\alpha,\beta}^{(d)} = M_{\alpha,\beta}^{(1)} \cdot d^{\alpha+\beta+1}$; например, $M_{2,3}^{(4)} = M_{2,3}^{(1)} \cdot d^2 = 8{,}181 \cdot 10^{-4} \cdot 16 = 1{,}309 \cdot 10^{-2}$. Указанное различие означает, что базовая функция плотности распределения мощности излучения в солнечном спектре только приближенно соответствует выражению (6). Такое заключение можно было и ожидать, учитывая неравновесное состояние солнечной фотосферы.

Рассмотренные примеры указывают на необходимость обобщения понятия моментов функции плотности распределения, используя ее внутренние и внешние структурные характеристики. В этом отношении они могут быть не только степенными и тригонометрическими, но и относительно значений определенной значащей функции. Предложенный метод анализа функции плотности распределения, аппроксимирующей выборочные значения экспериментальной последовательности, позволяет устанавливать их взаимную совместимость и пригодность для установления тех или иных физических закономерностей при описании ею экспериментальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Псарев В.И. Проблемы моментов распределений в статистической физике // Известия вузов. Физика.-1997.-№ 4.- С. 92-97.
2. Крамер Г. Математические методы статистики. - М.: Мир, 1976.- 648 с.
3. Киттель Ч. Статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1977. – 336 с.
4. Псарев В.И. Комментарии к анализу статистических распределений // Известия вузов. Физика. – 1998. - № 11.- С. 39 – 44.
5. Lindner H. Lehrbuch der Physik. – Leipzig: VEB Fachbuchverlag, 1967. – 592 s.
6. Псарев В.И., Пархоменко Л.А., Куликов А.Ф. Дисперсионно-компьютенрный анализ микроструктуры сплавов // Известия РАН. Металлы. – 1994. - № 5. – С. 154 – 161.
7. Wanger C. Theorie der Alterung von Niederschladen durch Umlosen (Ostwald – Reifung) // Zeitschrift f. Electrochemie. - 1961. – B. 65. - № 7/8. – S. 581 – 592.
8. Псарев В.И. Анализ солнечного спектра с привлечением средств ЭВМ // Вісник Запорізького державного університету. – 1999. - № 1. - С. 144 – 147.
9. Псарев В.И. Компьютерный анализ непрерывного солнечного спектра // Оптика и спектроскопия. – 1999. – Т. 86. - № 2. – С. 203 – 207.
10. Аллен К.У. Астрофизические величины (справочник). – М.: Мир, 1977. – 446 с.