

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИИ
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ ПО СКОРОСТЯМ
И ЕЕ МОМЕНТОВ
ИЗ ВРЕМЯ-ПРОЛЕТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ**

*Ю. Е. Воскобойников, А. Е. Зарвин, А. А. Полтавец,
Я. Я. Томсонс, Р. Г. Шарафутдинов*

(Новосибирск)

В настоящее время известно несколько методов измерения функции распределения по скоростям молекул в газовых потоках. Это методы механического селектирования [1], измерения по доплеровскому контуру спектральных линий, возбужденных пучком электронов [2], и по времени пролета молекулами заданного расстояния [3]. При реализации любого из этих методов возникает проблема интерпретации экспериментальных данных, заключающаяся в нахождении соответствия между результатами измерений и исследуемым распределением молекул по скоростям и общая для всех способов измерений, поскольку во всех вариантах регистрируемый сигнал является интегралом свертки исследуемого распределения с некоторой аппаратной функцией.

В данной работе на примере время-пролетных измерений в молекулярном пучке рассматриваются два метода определения газодинамических параметров, связанных с моментами функции распределения: метод предварительного восстановления функции распределения с использованием статистической регуляризации и последующим вычислением моментов и метод непосредственного восстановления моментов. В первом случае связь между газодинамическими параметрами и моментами функции распределения получена для распределения произвольного вида, во втором — только для максвелловского.

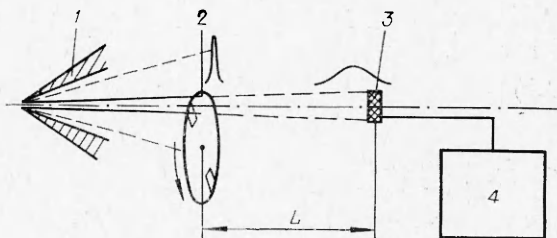
1. Метод измерений. Блок-схема время-пролетных измерений показана на фиг. 1. Из молекулярного пучка, сформированного скиммером 1, с помощью прерывателя 2 вырезается узкий пакет молекул. За время пролета базы L этот пакет размывается в соответствии с функцией распределения молекул по скоростям. Регистрируемый ионизационным детектором пролетного типа 3 сигнал $U(t)$ характеризует изменение во времени плотности молекул в датчике. Для повышения отношения сигнал/шум производится накопление и усреднение время-пролетных кривых в электронном блоке 4. Сигнал $U(t)$ является сверткой функции распределения молекул $f(t)$ во временном пространстве с аппаратной функцией [4]:

$$(1.1) \quad U(t) = \int f(\tau) A(t - \tau) d\tau + \xi(t),$$

где $\xi(t)$ — шум измерений, не ликвидированный полностью процессом накопления; $A(t)$ — аппаратная функция системы, учитывающая функцию прерывателя, динамические свойства детектора и аппаратную функцию накопителя. Функция пропускания прерывателя [4] зависит от соотношения между эффективным радиусом молекулярного пучка, шириной щели прерывателя и скоростью его вращения.

Способы обработки результатов время-пролетных экспериментов с целью определения газодинамических параметров функции распределения описаны в ряде работ; в [3], а позднее в [5] предложены методики, основанные на допущении пренебрежимо малого искажения время-пролетных кривых аппаратной функцией прерывателя и отсутствии шума измерений; в [6] получены алгебраические зависимости между моментами регистрируемого время-пролетного сигнала, функции распределения скоростей молекул и аппаратной функции. Принимая функцию распределе-

ния максвелловской, авторы определили газодинамические параметры исследуемого распределения. Однако статистические характеристики восстанавливаемых параметров ими не рассматривались. В [7] с использованием предложенной в [6] методики оценено влияние функции пропускания прерывателя и динамической функции детектора и его электронной схемы на время-пролетный сигнал и показано, что в реальных экспериментах пренебрежение этими аппаратными уширениями приводит к ошибкам при обработке и анализе экспериментальных результатов. Ни в одной из приведенных работ не учитывались одновременно аппаратные функции всех звеньев и не производилось восстановление сигнала с учетом $\xi(t)$. Одним из основных недостатков описанных методик является также необходимость



Фиг. 1

предположения максвелловского распределения.

В [8] при использовании метода регуляризации по Тихонову решалась задача восстановления функции распределения из измерений с помощью механического селектора. При этом не была учтена стохастичность физических измерений и не приведены оценки погрешностей восстановления функции распределения.

2. Связь между измеряемым сигналом и газодинамическими параметрами. Искомая функция $f(t)$ пропорциональна изменению плотности $n(t)$ молекул в зависимости от времени пролета t

$$(2.1) \quad f(t) = cn(t),$$

где c — приборная константа. Плотность $n(t)$ связана с функцией распределения по скоростям $F(v)$ выражением [5]

$$(2.2) \quad n(t) = N_0 F(v)/t,$$

где N_0 — число частиц в одном пакете, вырезанном прерывателем. Поэтому зависимость $f(t)t$ от $1/t$ с нормировкой к единице в максимуме тождественна зависимости $F(v)$ от v с аналогичной нормировкой.

Запишем функцию распределения по скоростям произвольного вида с учетом анизотропии в направлениях, параллельном и перпендикулярном движению потока газа:

$$(2.3) \quad F(v, \Theta) = c_1 c_2 f_{\parallel}(v, \Theta) f_{\perp}(v, \Theta) v^2,$$

где Θ — угол между линией тока и направлением на детектор; c_1 и c_2 — нормировочные постоянные. Для максвелловского распределения с анизотропией по направлениям выражение (2.3) преобразуется к виду

$$F(v, \Theta) = m/2\pi k T_{\perp} \cdot (m/2\pi k T_{\parallel})^{1/2} \exp[-m(v \sin \Theta)^2/2k T_{\perp}] \times \\ \times \exp[-m(v \cos \Theta - w)^2/2k T_{\parallel}] v^2,$$

совпадающему с выражением для $F(v, \Theta)$ работы [9]. Здесь k — постоянная Больцмана; m — масса молекулы; w — гидродинамическая скорость; T_{\parallel} и T_{\perp} — параллельная и перпендикулярная температура [10].

В случае, когда детектор расположен на оси молекулярного пучка и телесный угол, внутри которого детектор виден из скиммера, мал,

выражение (2.3) может быть представлено в упрощенном виде

$$(2.4) \quad F(v) = c_3 v^2 f_{\parallel}(v),$$

где c_3 — нормировочная постоянная; $f_{\parallel}(v)$ в условиях максвелловского распределения имеет вид

$$f_{\parallel}(v) = \exp[-m(v-w)^2/2kT_{\parallel}].$$

Подставив в (2.1) выражения (2.2), (2.4), получим зависимость между $f(t)$ и $F(v)$

$$(2.5) \quad tf(t) = c_4 F(v) = c_3 c_4 v^2 f_{\parallel}(v),$$

где c_4 — константа.

Информацию о функции распределения, полученную из время-пролетных измерений, удобно представлять в виде осредненных параметров: гидродинамической скорости потока w и средней тепловой энергии для направления, параллельного потоку, E_{\parallel} (равной $(1/2)kT_{\parallel}$ в условиях равновесия). По определению [11], средняя скорость и средняя тепловая энергия газа имеют вид

$$(2.6) \quad \langle v_1 \rangle = \frac{\mu_1 \{F(v)\}}{\mu_0 \{F(v)\}} = \eta_1 \{F(v)\} = \frac{\int_0^{\infty} v F(v) dv}{\int_0^{\infty} F(v) dv};$$

$$(2.7) \quad \langle E_1 \rangle = \frac{m}{2} \frac{\mu_2 \{F(v)\}}{\mu_0 \{F(v)\}} - \frac{m}{2} \left[\frac{\mu_1 \{F(v)\}}{\mu_0 \{F(v)\}} \right]^2 = \frac{m}{2} \nu_2 \{F(v)\} = \\ = \frac{m}{2} \frac{\int_0^{\infty} (v-w)^2 F(v) dv}{\int_0^{\infty} F(v) dv},$$

где μ_0 , μ_1 , μ_2 — нулевой, первый и второй ненормированные, а η_1 — первый, ν_2 — второй центральный нормированные моменты произвольного распределения $F(v)$. Для максвелловской функции распределения в результате интегрирования уравнений (2.6), (2.7) получим

$$(2.8) \quad \langle v_1 \rangle = w \left\{ 1 + 2 \left[2S^2 + \frac{1 + \Phi(S)}{1 + \Phi(S) + (\pi)^{-1/2} S^{-1} e^{-S^2}} \right]^{-1} \right\};$$

$$(2.9) \quad \langle E_1 \rangle = \frac{m\gamma^2}{4} \left\{ 1 + \frac{1}{S^2 + \frac{1}{2} + (\pi)^{-1/2} S e^{-S^2} [1 + \Phi(S)]^{-1}} \right\},$$

где $\gamma = \sqrt{2kT/m}$ — наиболее вероятная скорость хаотического движения;

$S = w/\gamma$ — отношение скоростей; $\Phi(S) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^S e^{-x^2} dx$ — интеграл вероятности.

(Здесь и далее опущен индекс \parallel у температуры и функций от нее). В отсутствие направленного потока ($w = S = 0$) выражения (2.8), (2.9) приводятся к виду

$$\langle v_1 \rangle = \sqrt{8kT/\pi m}, \quad \langle E_1 \rangle = (3/2) kT$$

и характеризуют среднюю скорость и среднюю энергию хаотического движения молекул. В другом предельном случае, когда $S \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$),

из (2.8), (2.9) получаем

$$\langle v_1 \rangle = w; \langle E_1 \rangle = (1/2)kT,$$

т. е. гидродинамическую скорость потока и энергию теплового движения.

В таблице приведены значения $\langle v_1 \rangle$ и $\langle E_1 \rangle$ при нескольких значениях отношения скоростей. Как следует из таблицы, при росте S параметры $\langle v_1 \rangle$ и $\langle E_1 \rangle$ весьма медленно приближаются к своим предельным значе-

S	$\langle v_1 \rangle$	$\langle E_1 \rangle$	$\langle v_2 \rangle$	$\langle E_2 \rangle$
0	$\sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$	$\frac{3}{2}kT$	$\sqrt{\frac{2kT}{\pi m}}$	$\frac{1}{2}kT$
0,5	$2,76 \cdot w$	$2,12 \cdot \frac{1}{2}kT$	$1,45 \cdot w$	$0,71 \cdot \frac{1}{2}kT$
1	$1,63 \cdot w$	$1,62 \cdot \frac{1}{2}kT$	$1,11 \cdot w$	$0,77 \cdot \frac{1}{2}kT$
2	$1,22 \cdot w$	$1,22 \cdot \frac{1}{2}kT$	$1,003 \cdot w$	$0,98 \cdot \frac{1}{2}kT$
3	$1,11 \cdot w$	$1,11 \cdot \frac{1}{2}kT$	$1,00001 \cdot w$	$0,9998 \cdot \frac{1}{2}kT$
5	$1,04 \cdot w$	$1,04 \cdot \frac{1}{2}kT$	$w+0(w)$	$\frac{1}{2}kT + 0\left(\frac{1}{2}kT\right)$
10	$1,01 \cdot w$	$1,01 \cdot \frac{1}{2}kT$	$w+0(w)$	$\frac{1}{2}kT + 0\left(\frac{1}{2}kT\right)$
∞	w	$\frac{1}{2}kT$	w	$\frac{1}{2}kT$

ниям и лишь при $S > 10$ погрешность аппроксимации $\langle v_1 \rangle = w$ и $\langle E_1 \rangle = (1/2)kT$ оказывается меньше 1%.

Заменив в уравнениях (2.6), (2.7) функцию $F(v)$ на $f_{\parallel}(v)$, имеем

$$(2.10) \quad \langle v_2 \rangle = \eta_1 \{f_{\parallel}(v)\} = \frac{\int_0^{\infty} v f_{\parallel}(v) dv}{\int_0^{\infty} f_{\parallel}(v) dv};$$

$$(2.11) \quad \langle E_2 \rangle = \frac{m}{2} v_2 \{f_{\parallel}(v)\} = \frac{m}{2} \frac{\int_0^{\infty} (v-w)^2 f_{\parallel}(v) dv}{\int_0^{\infty} f_{\parallel}(v) dv}.$$

Интегрируя новые выражения, получим

$$\begin{aligned} \langle v_2 \rangle &= w \{1 + (\pi)^{-1/2} S^{-1} e^{-S^2} [1 + \Phi(S)]^{-1}\}; \\ \langle E_2 \rangle &= \frac{m\gamma^2}{4} \{1 - 2(\pi)^{-1/2} S e^{-S^2} [1 + \Phi(S)]^{-1}\}. \end{aligned}$$

Значения $\langle v_2 \rangle$ и $\langle E_2 \rangle$ в зависимости от S также приведены в таблице. Следует отметить, что уже при $S \geq 2$ величины $\langle v_2 \rangle$ и $\langle E_2 \rangle$ можно с небольшой погрешностью аппроксимировать их предельными значениями w и $(1/2)kT$ соответственно. Таким образом, в экспериментах по измерению функции распределения время-пролетным методом при $S > 2$ для

расчетов газодинамических параметров распределения w и E_{\parallel} целесообразно использовать выражения (2.10), (2.14). Подставляя из (2.5) зависимость $f_{\parallel}(v)$ в (2.10), (2.14), получим выражения для вычисления осредненных параметров функции распределения произвольного вида из результатов время-пролетных экспериментов

$$\langle v \rangle = \eta_1 \{f_{\parallel}(v)\} = \frac{\int_0^{\infty} Lf(t) dt}{\int_0^{\infty} tf(t) dt};$$

$$\langle E \rangle = \frac{m}{2} \eta_2 \{f_{\parallel}(v)\} = \frac{m}{2} \frac{\int_0^{\infty} \left(\frac{L}{t} - \langle v \rangle\right)^2 tf(t) dt}{\int_0^{\infty} tf(t) dt},$$

где L — расстояние от прерывателя до детектора.

3. Восстановление функции распределения. Для решения интегрального уравнения (1.1) используется вычислительная процедура [12, 13], отличающаяся от других вычислительных схем, применяемых при решении некорректно поставленных задач.

Во-первых, применение дискретного преобразования Фурье в этой процедуре позволило создать единую вычислительную основу для нахождения статистически регуляризованного решения, выбора параметра регуляризации и оценивания характеристик ошибок решения. Это дало возможность уменьшить число вычислительных операций, необходимых для построения регуляризованного решения на 2—3 порядка.

Во-вторых, учет стохастичности результатов измерения позволил использовать методы математической статистики для выбора параметра регуляризации и ввести в рассмотрение статистические модели ошибок решения. Так, для нахождения параметра регуляризации, что в основном и определяет успех применения методов регуляризации, использовался статистический критерий оптимальности [13], на основе которого строился алгоритм, вычисляющий оптимальное (в смысле минимума среднеквадратичной ошибки восстановления) значение параметра регуляризации.

Построенное регуляризованное решение f_{α} , являющееся P -мерным вектором, допускает представление

$$(3.1) \quad f_{\alpha} = f_{+} + \xi_{\alpha},$$

где f_{+} — вектор решения уравнения (1.1) в отсутствие шума измерения. Случайный вектор ξ_{α} интерпретируется как шум решения, вектор математического ожидания m_{ξ} и корреляционная матрица $R_{\xi\xi}$ которого вычисляются по определенным соотношениям [13]. Знание этих статистических характеристик элемента ξ_{α} дало возможность не только оценить среднеквадратичную ошибку решения и построить доверительные области для вектора f_{+} , но и вычислить погрешности интегральных характеристик, определяемых по вектору f_{α} .

Действительно, оценки моментов

$$(3.2) \quad \mu_k^{\alpha} = \sum_{j=1}^P f_{\alpha}(j) (j\Delta_t)^k \omega_j,$$

где Δ_t — интервал дискретности; ω_j — коэффициенты квадратурной формулы, являются случайными величинами и могут значительно отличать-

ся от оценок μ_k , вычисленных по вектору f_+ ,

$$\mu_k = \sum_{j=1}^P f_+(j) (j\Delta_t)^k \omega_j.$$

С учетом (3.1) математическое ожидание и дисперсия моментов μ_0^* , μ_1^* , μ_2^* определяются соотношениями

$$(3.3) \quad \begin{aligned} M[\mu_k^*] &= \mu_k + \Delta\mu_k, \quad k = 0, 1, 2; \\ \Delta\mu_k &= \sum_{j=1}^P m_{\xi}(j) (j\Delta_t)^k \omega_j; \\ D[\mu_k^*] &= \sum_{i=1}^P \sum_{j=1}^P R_{\xi\xi}(i, j) (i\Delta_t)^k (j\Delta_t)^k \omega_i \omega_j. \end{aligned}$$

В случае, когда длительность $T_f = P\Delta_t$ функции распределения $f(t)$ значительно меньше (на 1,5–2 порядка) интервала корреляции шума решения

$$\tau_{\xi} = \frac{\sum_{j=1}^P R_{\xi\xi}(1, j) \omega_j}{R_{\xi\xi}(1, 1)},$$

для вычисления $D[\mu_k^*]$ применялись более простые выражения:

$$D[\mu_k^*] \simeq \frac{\tau_{\xi} T_f^{2k+1}}{2k+1}, \quad k = 0, 1, 2.$$

Найденные значения $\bar{D}[\mu_k^*]$ использовались для определения дисперсии параметров $\langle v \rangle$ и $\langle E \rangle$, вычисляемых через моменты μ_0^* , μ_1^* , μ_2^* :

$$D[\langle v \rangle] \simeq \frac{D[\mu_1^*]}{(\mu_0^*)^2} + \frac{\langle \langle v \rangle \rangle^2}{(\mu_0^*)^2} D[\mu_0^*]; \quad D[\langle E \rangle] \simeq \frac{D[\mu_2^*]}{(\mu_0^*)^2} + \frac{\langle \langle E \rangle \rangle^2}{(\mu_0^*)^2} D[\mu_0^*].$$

Для выявления степени разброса оценок $\langle v \rangle$, $\langle E \rangle$, обусловленного ошибками решения уравнения (1.1), строятся доверительные интервалы

$$\begin{aligned} \Xi_v &= [\langle v \rangle - \xi_v, \langle v \rangle + \xi_v]; \\ \Xi_E &= [\langle E \rangle - \xi_E, \langle E \rangle + \xi_E], \end{aligned}$$

где $\xi_v = k(D[\langle v \rangle])^{1/2}$; $\xi_E = k(D[\langle E \rangle])^{1/2}$, $k = 2-3$.

В целом обработку результатов время-пролетных измерений с восстановлением функции распределения можно условно представить следующими этапами.

А. Построение регуляризованного решения f_{α} , вычисление статистических характеристик вектора ξ_{α} и оценивание равномерной и евклидовой

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \max_j |f_{\alpha}(j) - f_+(j)|, \quad j = 1, P; \\ \Delta_2 &= \left(\sum_{j=1}^P (f_{\alpha}(j) - f_+(j))^2 \right)^{1/2} \end{aligned}$$

норм ошибок решения соответственно.

Б. Нахождение моментов μ_0^* , μ_1^* , μ_2^* по вектору f_{α} (3.2) и вычисление их статистических характеристик $M[\mu_k^*]$, $D[\mu_k^*]$.

В. Определение параметров $\langle v \rangle$, $\langle E \rangle$ и построение доверительных интервалов Ξ_v , Ξ_E .

Г. Вычисление «эталонной» максвелловской функции f_0 распределения с параметрами $\langle v \rangle$ и $\langle E \rangle$.

Д. Определение величин

$$\Delta_{10} = \max_j |f_0(j) - f_\alpha(j)|;$$

$$\Delta_{20} = \left(\sum_{j=1}^P (f_0(j) - f_\alpha(j))^2 \right)^{1/2},$$

характеризующих нормы разности между f_α и f_0 .

Последние два этапа используются при испытании гипотез относительно восстановленной функции распределения. Так, если $\Delta_{10} \leq \Delta_1$ и $\Delta_{20} \leq \Delta_2$, то отличие между f_α и f_0 может быть объяснено ошибками решения интегрального уравнения (1.1) и гипотеза, заключающаяся в том, что восстановленная функция f_α принадлежит к классу максвелловских распределений, может быть принята.

4. Метод моментов. В случаях, когда известно, что распределение молекул по скоростям максвелловское, для оценки газодинамических параметров может быть применен более простой в реализации метод моментов [6], связывающий алгебраическими соотношениями моменты функции распределения во временном пространстве $f(t)$ с моментами измеряемого сигнала $U(t)$ и аппаратной функции $A(t)$. На основе этого метода разработаны алгоритмы восстановления параметров функции распределения (средней скорости направленного движения $\langle v \rangle$ и тепловой энергии $\langle E \rangle$) с учетом функции прерывателя и динамической функции детектора и его электронной схемы. В отличие от работы [6] эти алгоритмы включают в себя определение статистических характеристик восстановленных параметров.

Используя связь S и γ с моментами функции $f(t)$ [6], можно показать, что

$$(4.1) \quad D(S) = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^{-2} \left[\frac{D(\nu_2 \{f(t)\})}{(\eta_1 \{f(t)\})^4} + \frac{4\nu_2 \{f(t)\}}{(\eta_1 \{f(t)\})^6} D(\eta_1 \{f(t)\}) \right];$$

$$D(\gamma) = \frac{L^2}{(\eta_1 \{f(t)\})^2 (S+r)^2} \left[\frac{D(S)}{(S+r)^2} + \frac{D(\eta_1 \{f(t)\})}{(\eta_1 \{f(t)\})^2} \right],$$

где $r = (\pi^{1/2} e^{S^2} (1 + \Phi(S)))^{-1}$; Ω — время-пролетная функция [6];

$\eta_1 \{f(t)\} = \int_0^\lambda t f(t) dt$ — первый нормированный момент; $\nu_2 \{f(t)\} =$

$= \int_0^\lambda (t - \eta_1 \{f(t)\})^2 f(t) dt$ — второй нормированный центральный момент; $D(\eta_1 \{f(t)\})$ и $D(\nu_2 \{f(t)\})$ — дисперсии моментов функции $f(t)$, определяемые выражениями

$$(4.2) \quad D(\eta_1 \{f(t)\}) \simeq \frac{D(\mu_1 \{U(t)\})}{(\mu_0 \{U(t)\})^2} + \frac{(\mu_1 \{U(t)\})^2}{(\mu_0 \{U(t)\})^4} D(\mu_0 \{U(t)\}) -$$

$$- \frac{\mu_1 \{U(t)\}}{(\mu_0 \{U(t)\})^3} \text{cov}(\mu_1, \mu_0);$$

$$D(\nu_2 \{f(t)\}) \simeq \frac{D(\mu_2 \{U(t)\})}{(\mu_0 \{U(t)\})^2} + 4 \frac{(\mu_1 \{U(t)\})^2}{(\mu_0 \{U(t)\})^4} D(\mu_1 \{U(t)\}) + \left(2 \frac{(\mu_1 \{U(t)\})^2}{(\mu_0 \{U(t)\})^3} - \right.$$

$$\left. - \frac{\mu_2 \{U(t)\}}{(\mu_0 \{U(t)\})^2} \right)^2 D(\mu_0 \{U(t)\}) + 2 \left[- \frac{2\mu_1 \{U(t)\}}{(\mu_0 \{U(t)\})^2} \left(\frac{2(\mu_1 \{U(t)\})^2}{(\mu_0 \{U(t)\})^3} - \right. \right.$$

$$- \frac{\mu_2 \{U(t)\}}{(\mu_0 \{U(t)\})^2} \operatorname{cov}(\mu_1, \mu_0) - 2 \frac{\mu_1 \{U(t)\}}{(\mu_0 \{U(t)\})^3} \operatorname{cov}(\mu_1, \mu_2) + \left(2 \frac{\mu_1 \{U(t)\}^2}{(\mu_0 \{U(t)\})^4} - \frac{\mu_2 \{U(t)\}}{(\mu_0 \{U(t)\})^2} \right) \frac{1}{\mu_0 \{U(t)\}} \operatorname{cov}(\mu_0, \mu_2) \Big],$$

где $\bar{D}(\mu_i)$ находится по формуле (3.3), когда $R_{\xi\xi}(t_i, t_j)$ — корреляционная матрица шума $\xi(t)$; $\operatorname{cov}(\mu_i, \mu_j)$ — корреляция между моментами μ_i и μ_j .

Дисперсии параметров $\langle v \rangle$ и $\langle E \rangle$ определяются из соотношений (4.1), (4.2)

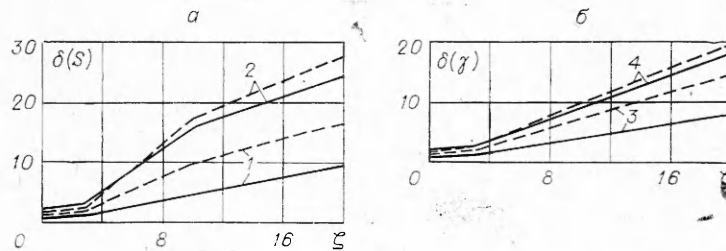
$$D(\langle v \rangle) \cong \gamma^2 D(S) + S^2 D(\gamma);$$

$$D(\langle E \rangle) \cong (m\gamma^2/2)^2 D(\gamma).$$

Алгоритмы реализованы в виде подпрограмм на языке ФОРТРАН-IV.

Следует отметить, что метод моментов позволяет определять гидродинамическую скорость и плотность молекулярного пучка без предположения о максвелловском распределении.

В данной работе изложены два различных подхода к определению параметров из время-пролетных измерений. Для сравнения этих подходов как с точки зрения точности вычисления рассматриваемых параметров, так и с точки зрения затрат машинного времени, необходимого для обработки результатов экспериментов, решалась следующая модельная задача. В качестве входного сигнала $f(t)$ принималась максвелловская функция распределения с параметрами $S = 5$ и $\gamma = 0,15 \cdot 10^5$ см/с. Функция пропускания $A(t)$ выбиралась в виде трапеции с длиной нижнего основания NH . На выходной сигнал $U(t)$, являющийся сверткой функций



Фиг. 2

$f(t)$ и $A(t)$, накладывался случайный процесс $Z(t)$, моделирующий шум измерительной системы, с корреляционной функцией

$$R_Z(\tau) = \sigma^2 \exp(-|\beta|\tau)$$

и нулевым математическим ожиданием, где σ^2 — дисперсия шума.

Для определения уровня зашумленности выходного сигнала в данной работе введен параметр ζ

$$\zeta = (\|Z\|/\|U\|) \cdot 100\%,$$

где $\|Z\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (Z_i)^2}$ и $\|U\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (U_i)^2}$ — среднеквадратичные нормы.

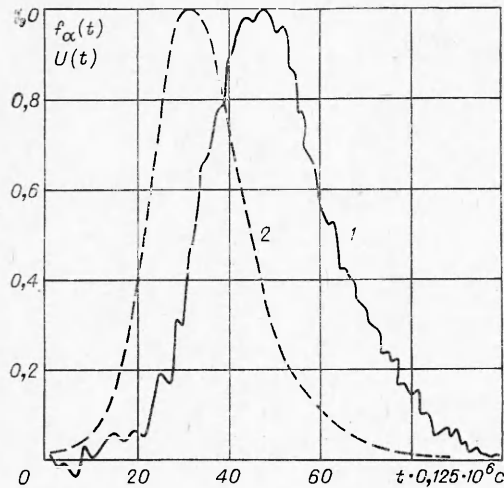
Восстановление S и γ проводилось при значениях $\zeta = 2,8; 10; 18\%$, для функций пропускания $A(t)$ с $NH = 10,14$ при постоянной длитель-

ности $NX = 70$ входного сигнала. Соответственно числа обусловленности P , определяемые соотношением

$$P = \|H'H\| \|(H'H)^{-1}\|,$$

где H — прямоугольная матрица, аппроксимирующая интегральный оператор (1.1), принимали значения $P = 360; 17000$.

На фиг. 2, а, б представлено изменение относительных погрешностей

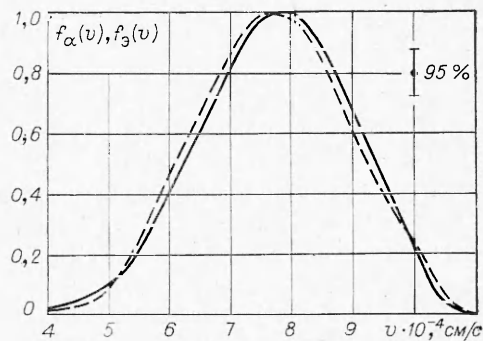


Фиг. 3

восстановленных параметров $\delta(S)$ и $\delta(\gamma)$ в зависимости от ζ при использовании метода статистической регуляризации (кривые 1, 3) и метода моментов (кривые 2, 4), сплошными линиями обозначены кривые при $P = 360$, штриховыми — при $P = 17000$; видно, что погрешности восстановления параметров методом моментов больше соответствующих погрешностей вычисления тех же параметров по восстановленной функции распределения. Эти различия можно объяснить фильтрующими свойствами регуляризующего алгоритма. Машинное время T_c , необходимое для вычисления искомого величин на

ЭВМ «Урал-14Д» на основе восстановления функции распределения, составило ~ 3 мин, а для метода моментов ~ 45 с.

5. Пример обработки результатов экспериментов. На фиг. 3 приведен пример восстановления функции $f(t)$ по экспериментальным данным. Аргументом является время пролета молекулами расстояния от прерывателя до детектора t , с. Кривая 1 — выходной сигнал измерительной системы $U(t)$, 2 — регуляризованное решение $f_\alpha(t)$ интегрального уравнения (1.1); обе кривые нормированы относительно своих максимальных значений. Из фиг. 3 видно, что $f_\alpha(t)$ смещена в сторону меньших t с уменьшением ее ширины. Перестроенная в масштабе скоростей регуляризованная функция $f_\alpha(v)$ (штриховая линия) приведена на фиг. 4. Здесь же построена «эталонная» функция $f_3(v)$ (сплошная линия) и нанесены 95%-ные доверительные интервалы для $f_3(v)$. Нормы ошибок: $\Delta_1 = 0,095$, $\Delta_2 = 0,047$, $\Delta_{13} = 0,068$, $\Delta_{23} = 0,024$.



Фиг. 4

Из неравенств $\Delta_{13} < \Delta_1$, $\Delta_{23} < \Delta_2$ следует, что отклонение $f_\alpha(v)$ от $f_3(v)$ может быть объяснено ошибками решения интегрального уравнения (1.1) и функция $f_\alpha(v)$ для обработанного эксперимента представляется максвелловской. При обработке сигнала, изображенного на фиг. 3 (кривая 1), методом статистической регуляризации получены оценки $S^* = 3,8$

с доверительными интервалами от 3,4 до 4,2 и $\gamma^* = 0,19 \cdot 10^5$ см/с с доверительными интервалами от $0,16 \cdot 10^5$ до $0,22 \cdot 10^5$ см/с. Метод моментов дал результаты для $S^* = 4,2$ и для $\gamma^* = 0,17 \cdot 10^5$ см/с с доверительными интервалами 3,4 — 5,0 и $0,14 \cdot 10^5$ — $0,20 \cdot 10^5$ см/с соответственно.

Поступила 14 VIII 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Hostettler H. U., Bernstein R. B. Improved slotted disk type velocity selector for molecular beams.— «Rev. Scient. Instrum.», 1960, vol. 31, N 8.
2. Muntz E. P. The direct measurements of velocity distribution function.— In: Rarefied Gas Dynamics. Proc. 4 th Symposium. Vol. 2. N. Y.—L., Academic Press, 1966.
3. Hagena O., Henkes W. Untersuchung der thermischen Relaxation bei Düsenströmungen durch Analyse der gaskinetischen Geschwindigkeitsverteilung. — «Z. für Naturforschung», 1960, Bd 15a, N 10.
4. Hagena O. F., Varma A. K. Time-of-flight velocity analysis of atomic and molecular beams.— «Rev. Scient. Instrum.», 1968, vol. 39, N 1.
5. Anderson J. B., Fenn J. B. Velocity distribution in molecular beams from nozzle sources.— «Phys. Fluids», 1965, vol. 8, N 5.
6. Alcalay J. A., Kunth E. L. Molecular-beam time-of-flight spectroscopy.— «Rev. Scient. Instrum.», 1969, vol. 40, N 3.
7. Young W. S. Distortions of time-of-flight signals.— «Rev. Scient. Instrum.», 1973, vol. 44, N 6.
8. Павлов Э. П., Перминов В. Д. К определению функции распределения молекул по скоростям в молекулярном пучке методом механического селектирования.— ПМТФ, 1972, № 4.
9. LeRoy R. L., Govers T. R. Ideal intensities of supersonic molecular beams.— «Canad. J. Chem.», 1970, vol. 48, N 11.
10. Willis D. R., Hamel V. B. Non-equilibrium effects in spherical expansions of polyatomic gases and gas mixtures.— In: Rarefied Gas Dynamics. Proc. 5 th Symposium. Vol. 2. N. Y.—L., Academic Press, 1967.
11. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М., «Наука», 1967.
12. Воскобойников Ю. Е., Томсонс Я. Я. Восстановление реализаций входных сигналов измерительных систем.— В кн.: Электродиффузионная диагностика турбулентных потоков. Новосибирск, изд. Ин-та теплофизики СО АН СССР, 1973.
13. Воскобойников Ю. Е., Томсонс Я. Я. Выбор параметра регуляризации и ошибки восстановления входного сигнала в методе статистической регуляризации. — «Автоматрия», 1975, № 4.

УДК 533.6.011

НЕРАВНОВЕСНОЕ РАСШИРЕНИЕ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ТОРМОЖЕНИЯ ДО 1200 К

Н. Г. Жаркова, В. В. Проккоев, А. К. Ребров,
В. Н. Ярыгин

(Новосибирск)

При расширении молекулярных газов возможно одновременное протекание качественно различных релаксационных процессов: неравновесной конденсации, колебательной и вращательной релаксации. Теоретические методы для рассмотрения таких течений на кинетическом уровне не разработаны. Нет и целенаправленных систематических экспериментальных исследований для установления границ влияния отдельных релаксационных процессов. В отдель-