第三次大作业：第二题　玻尔兹曼方程【分值：50 分】

作业提交截止时间：2020 年 6 月 5 日 24 点
邮件发给方助教： fangyongkang@pku.edu.cn

对于非平衡态统计物理来说，玻尔兹曼方程在其中占有极大地位。首先简要介绍一下，玻尔兹曼方程是描述分布函数 $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ 在相空间演化的偏微分方程，其一般形式如下：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \tag{1}$$

式中左边第二项是漂移项，第三项是外力项，右边表示的是碰撞项，也就标志了玻尔兹曼方程是在有外力的情况下的演化方程，同时注意的是这里指出了碰撞项，即体系内粒子相互作用对演化的影响，一般的，在考虑 BGK 近似下，也就是常说的弛豫时间近似，碰撞项可以写为如下形式：

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -\nu(f - f_0) \tag{2}$$

其中，f_0 为麦克斯韦-玻尔兹曼分布，ν 为碰撞频率.

另外，玻尔兹曼基于玻尔兹曼方程也提出了用于判断体系演化方向的 H 定理，内容如下：定义了一个状态函数:

$$H(t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \ln f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{p} \tag{3}$$

则此状态函数 H 将在麦克斯韦-玻尔兹曼分布下取极小值；而对于其他分布，则会有较大值，并且在考虑了碰撞项后，这些分布将不可逆的向最小化状态函数 H 的方向演化.

有了以上的知识准备后，我们看这样一个问题, 考虑两个体积为 V 的盒子，两盒子竖直叠放中间有一挡板，盒子内粒子种类相同，分别与温度为 T_1 和 T_2 的大热源接触，其中的粒子已经达到了稳定的玻尔兹曼分布. 之后我们去除挡板，再将盒子与温度为 T_3 的大热源相接触，请回答以下问题：

1. 首先得到取出挡板后的粒子瞬时分布，并画出在盒子内的空间以及动量上的分布图像.
2. 在不考虑任何外力的情形下，计算盒内的粒子分布函数在相空间内随时间的演化结果. 并计算状态函数 $H(t)$ 的演化结果. 均以图像展示并配以文字解释.
3. 现在我们考虑粒子处于重力场中，试画出在盒子内初始空间以及动量上的分布图像. 计算盒内粒子分布函数在相空间内随时间的演化结果. 并计算状态函数 $H(t)$ 的演化结果. 均以图像展示并配以文字解释.

提示：

- 我们知道满足玻尔兹曼分布的分布函数 $f_0 \propto \exp(-\frac{E}{kT})$，同时分布函数的积分满足 $\int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = N$，$N$ 为粒子数.
- 为了尽可能保证粒子数守恒，我们认为粒子在到达空间边界时发生弹性碰撞.
- 简化起见，在本题中我们考虑 $T_1 = 10$，$T_2 = 20$，$T_3 = 30$，$N = 1$，并且仅考虑 z 方向，每个盒子 z 方向高度固定为 1. 同时令 $k = 1$，$m = 1$，碰撞频率 $\nu = 100$，在第三问考虑重力场后，重力加速度取 $g = 10$.(已忽略各物理量的单位)