

统计力学及应用作业 2

College of Engineering 2001111690 袁磊祺

March 27, 2021

1

简单抽样

如图 1.1 所示, 使用简单抽样, 求得的面积收敛到 3. 图 1.2 显示了抽样的点分布, 可以发现是均匀分布在整 $[-2, 2] \times [0, 3]$ 的空间的.

重要抽样

假设 x 点分布的概率密度满足

$$g(x) = \frac{\pi}{2} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right), \quad (1.1)$$

并用

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)/g(x_i) \quad (1.2)$$

计算面积, 如图 1.3 所示, 使用重要抽样, 求得的面积收敛到 3.

图 1.5 表面重要抽样可以更快地收敛到 3, 并且震荡较小.

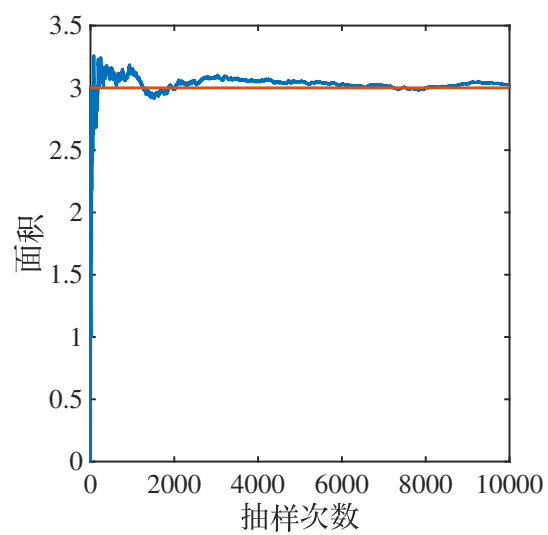


图 1.1. 简单抽样.

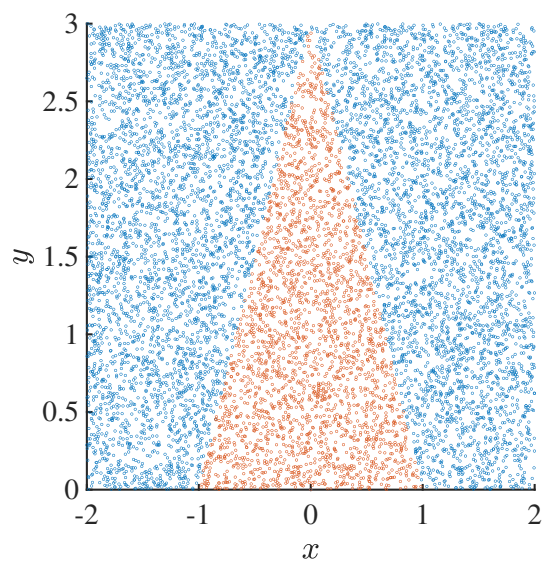


图 1.2. 简单抽样散点分布图.

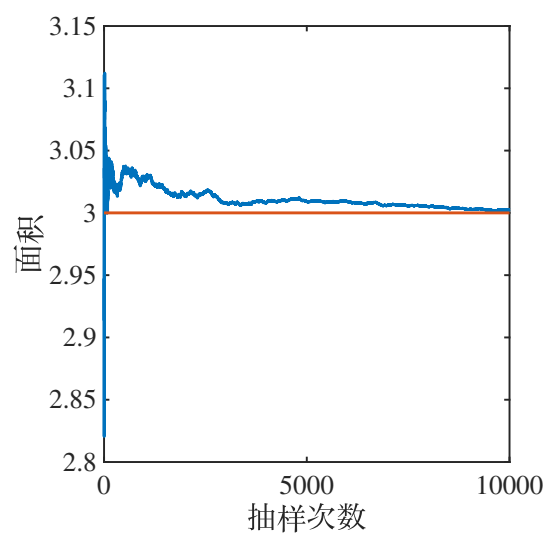


图 1.3. 重要抽样.

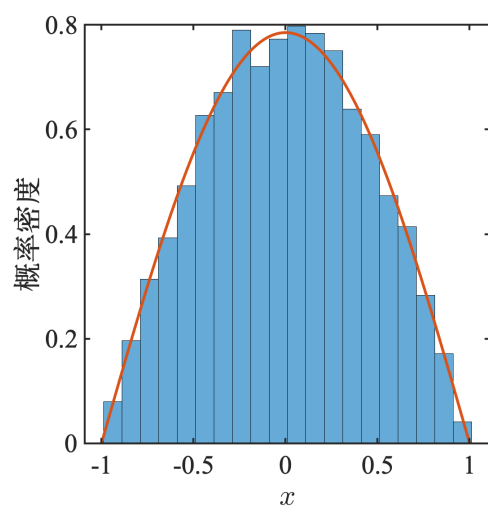


图 1.4. x 点的分布概率密度.

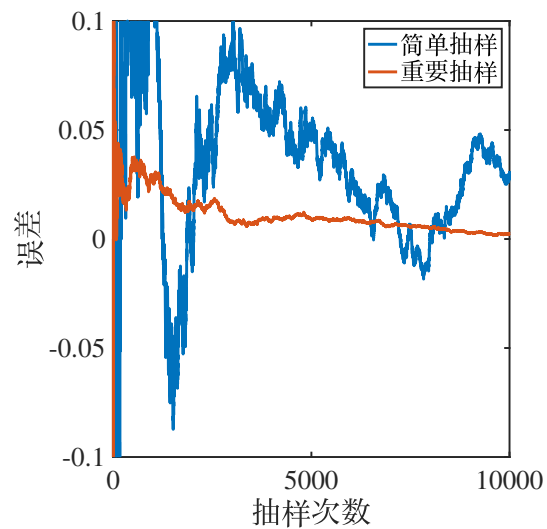


图 1.5. 两种方法的误差比较.

态密度

转子的态密度

考虑 $\theta = \frac{\pi}{2}$ 的情况,

$$\varepsilon = \frac{p_\varphi^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}. \quad (2.1)$$

其中

$$I = mr^2. \quad (2.2)$$

由不确定关系

$$\Delta\varphi\Delta p_\varphi = h, \quad (2.3)$$

又 $\varphi \in [0, 2\pi]$, 例子可能的状态数为

$$\frac{2\pi dp_\varphi}{h}, \quad (2.4)$$

所以态密度

$$D(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\pi}{h} \sqrt{\frac{2I}{\varepsilon}} d\varepsilon. \quad (2.5)$$

氮分子的态密度

考虑 $\theta = \frac{\pi}{2}$ 的情况,

$$\varepsilon = \frac{p_\varphi^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}. \quad (2.6)$$

其中

$$I = mr^2. \quad (2.7)$$

则

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{p_\varphi^2}{2I}. \quad (2.8)$$

是一个椭球, 三个轴的长度为

$$a = \sqrt{2m\varepsilon}, \quad b = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m\omega^2}}, \quad c = \sqrt{2I\varepsilon}, \quad (2.9)$$

体积为

$$V = \frac{4\pi}{3}abc. \quad (2.10)$$

又, 考虑到 φ 的积分为 2π , 以及不确定度为 h^2 所以态密度

$$D(\varepsilon) = \frac{2\pi}{h^2} \frac{dV}{d\varepsilon} = \frac{6\pi}{h^2\omega} \sqrt{2I\varepsilon}. \quad (2.11)$$