熱物理工学

1030359437 前田樹

(1) T=1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0 のそれぞれの条件について数値計算を行い、予想される分布であるボルツマン分布とプロットした。ボルツマン分布は見やすいように任意の定数 C_T を乗じている。

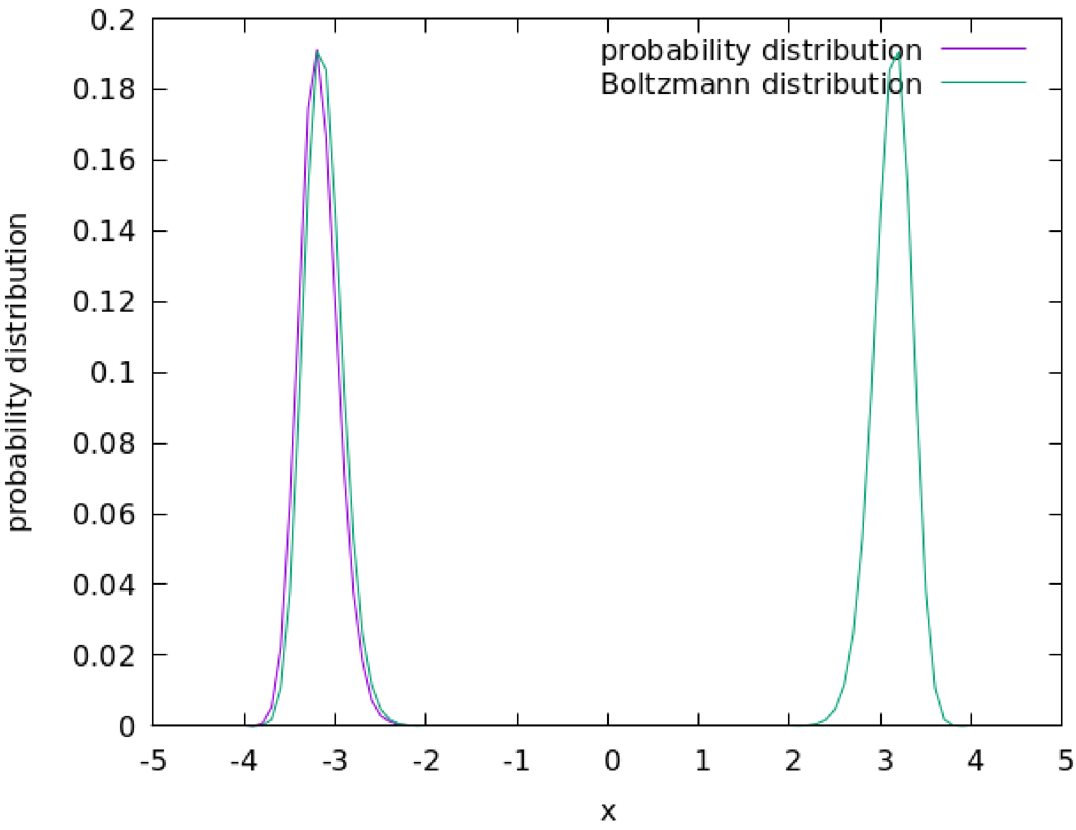


図 1 T=1.0

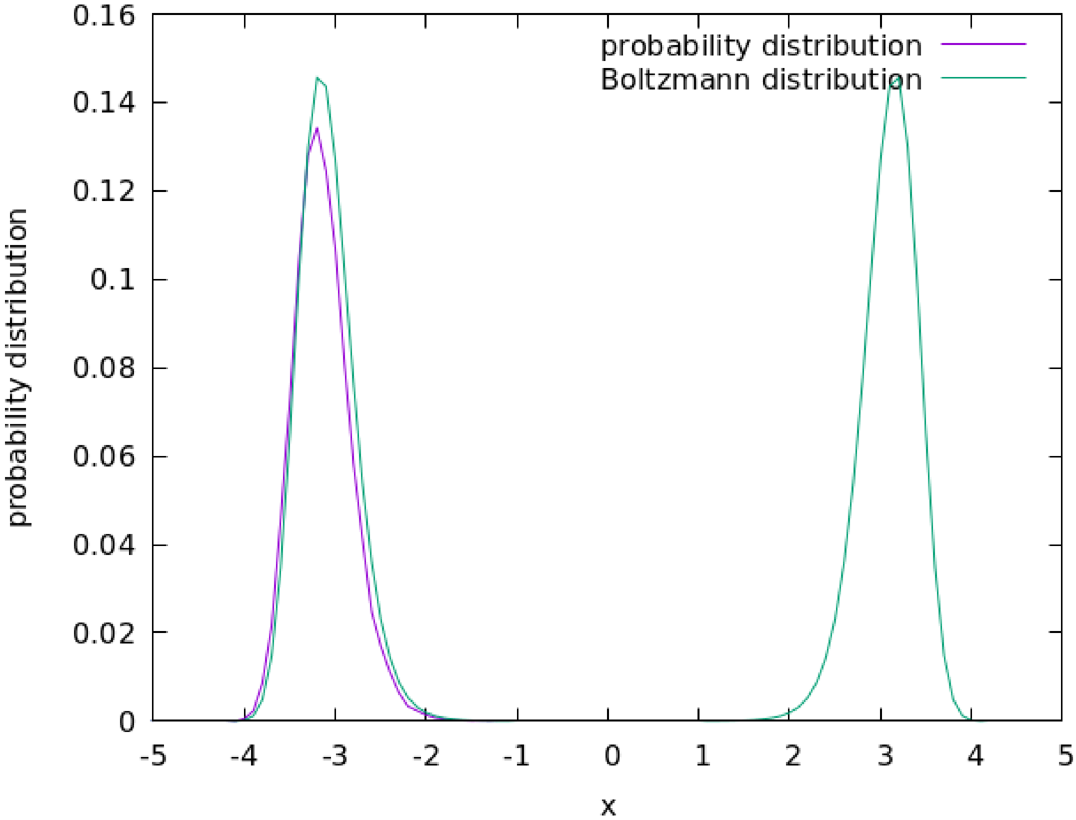
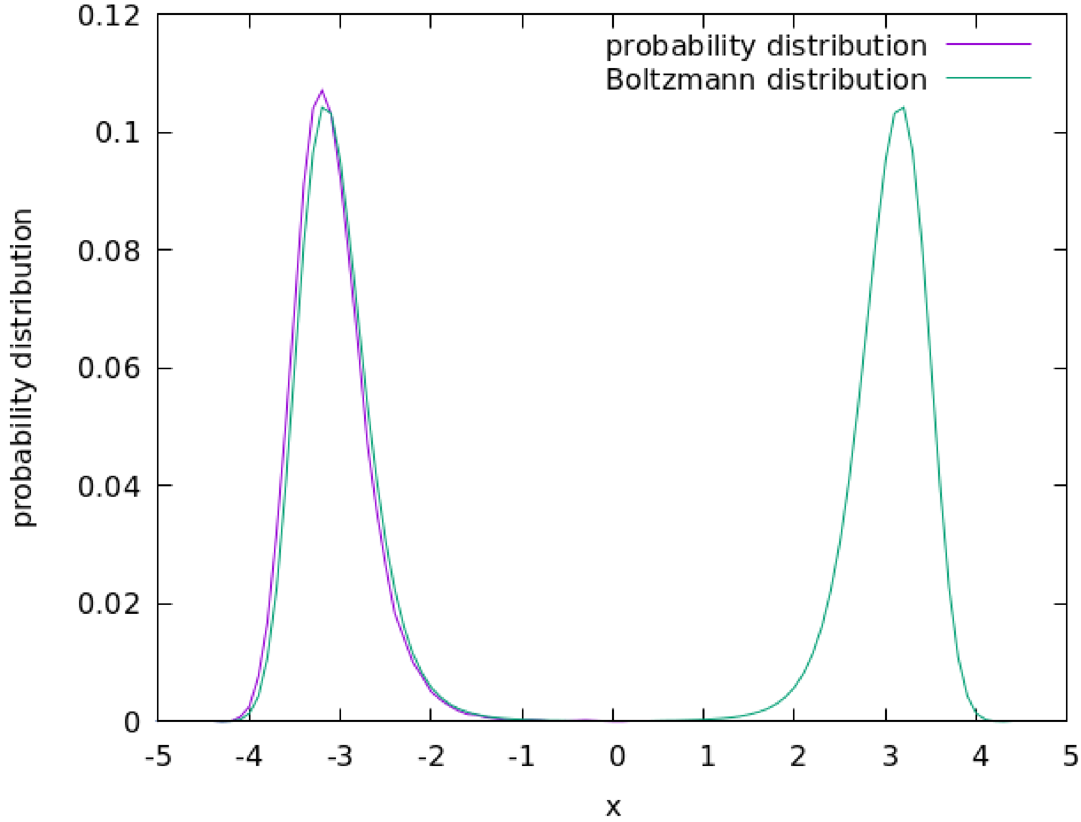
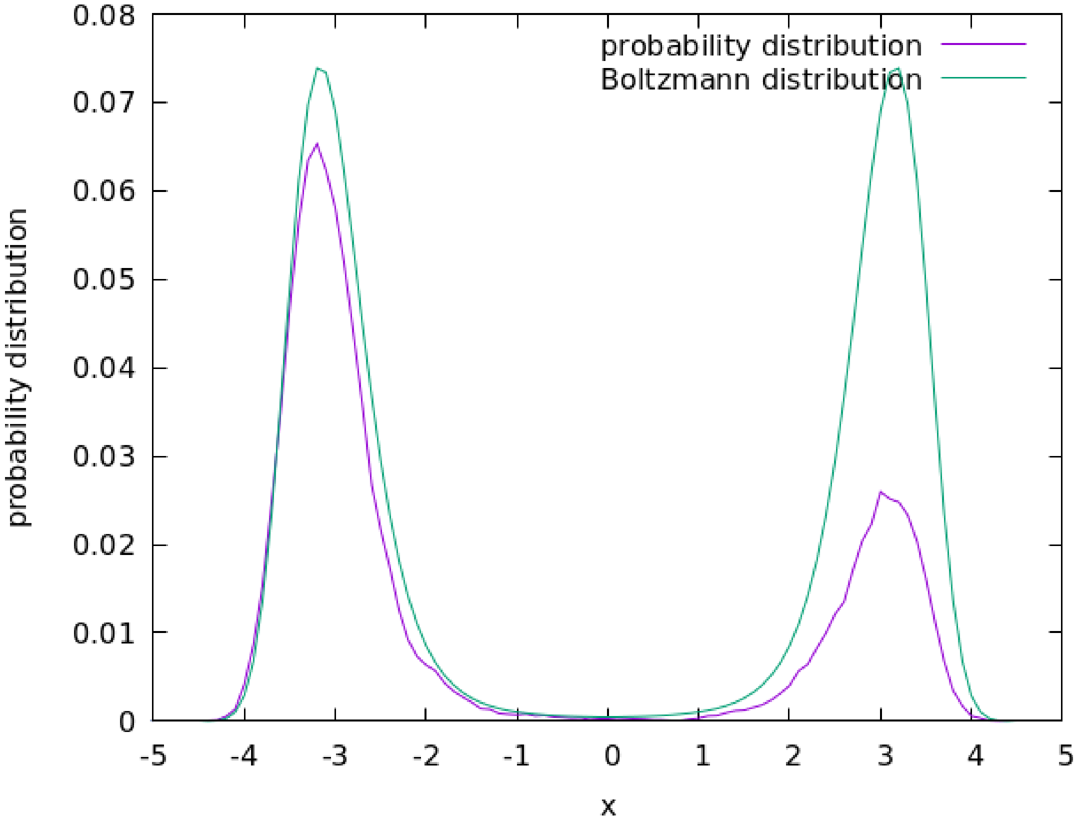

probability distribution
Boltzmann distribution
0.16
0.14
0.12
0.1
0.08
0.06
0.04
0.02
0
-5
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
5
x
probability distribution

図 2 T=2.0



0.12
0.1
0.08
0.06
0.04
0.02
0
-5
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
5
x
probability distribution
probability distribution
Boltzmann distribution

図 3 T=3.0



probability distribution
Boltzmann distribution
0.08
0.07
0.06
0.05
0.04
0.03
0.02
0.01
0
-5
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
5
x
probability distribution

図 4 T=4.0

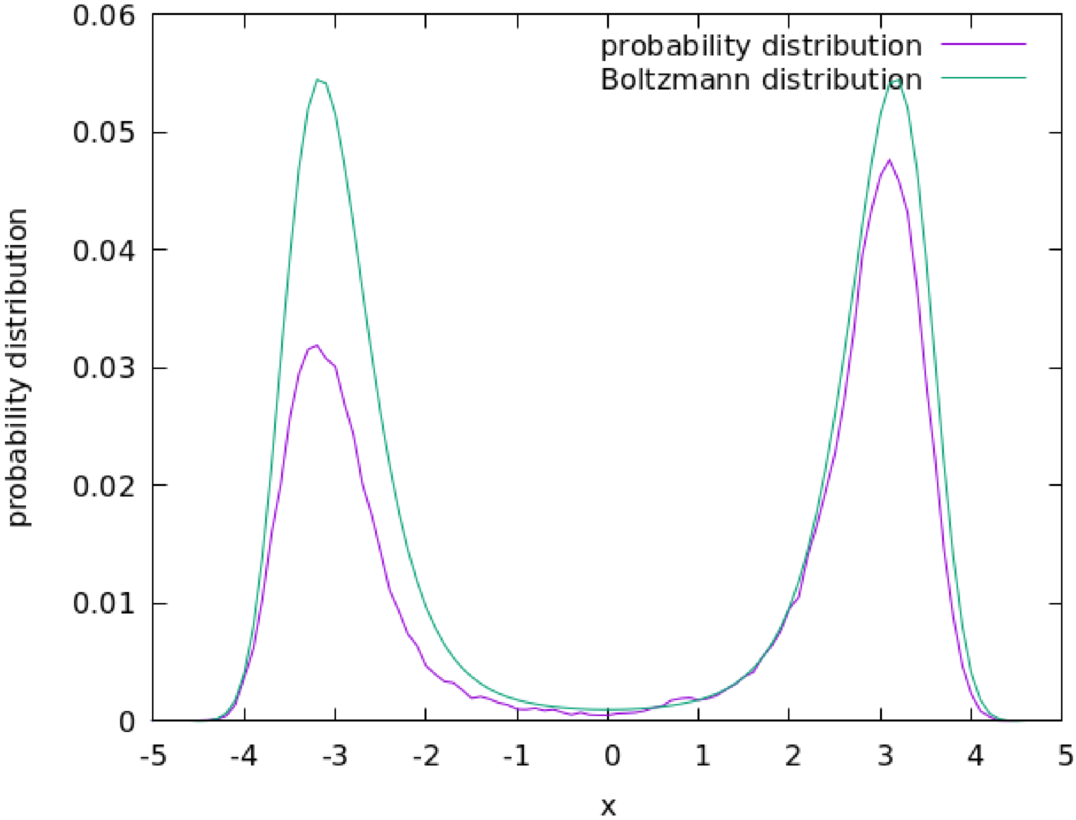


図 5 T=5.0

以上の結果からわかるように、1.0≦T≦3.0 では遷移が起こらず、3.0<T の範囲で遷移が発生していることが分かる。また、4.0<T<5.0 の範囲内において、理想的な分布に従うことが予想される。

(2) 与えられたコードを一部改変することで 1 ステップ前の x→現在の x に負から正へと符号変換が行われたときに遷移回数としてカウントするように改変を行った。

```c
for (int i = 0; i < 500; i++)
{
  temperature += 0.01;
  factor = sqrt((3 * 2 * temperature) / delta_t);
  int transition_count;

  x = -4.0; // 初期位置は左の谷の近く -4.0 に固定
  for (step = 0; step <= TOTAL_STEP; step++)
  {
    // if (step % SAVE_STEP == 0)
    // {
    //   // printf("%9d %10.3f\n", step, x);
    //   fprintf(fout, "%9d %10.3f\n", step, x);
    // }
    x += delta_t * (force(x) + fr(factor)) / gamma;

    if (x * prev_x < 0)
    {
      if (prev_x < 0)
      {
        transition_count++;
      }
    }
    prev_x = x;
  }
  fprintf(fout, "%.2f %d\n", temperature, transition_count);
}
```

0.01≦T≦5.00 で数値計算を行い、その結果をプロットしたのが以下の図である。ただし、縦軸(遷移回数)は対数軸に、横軸は 1/T とし、必要なデータ以外は落とした。

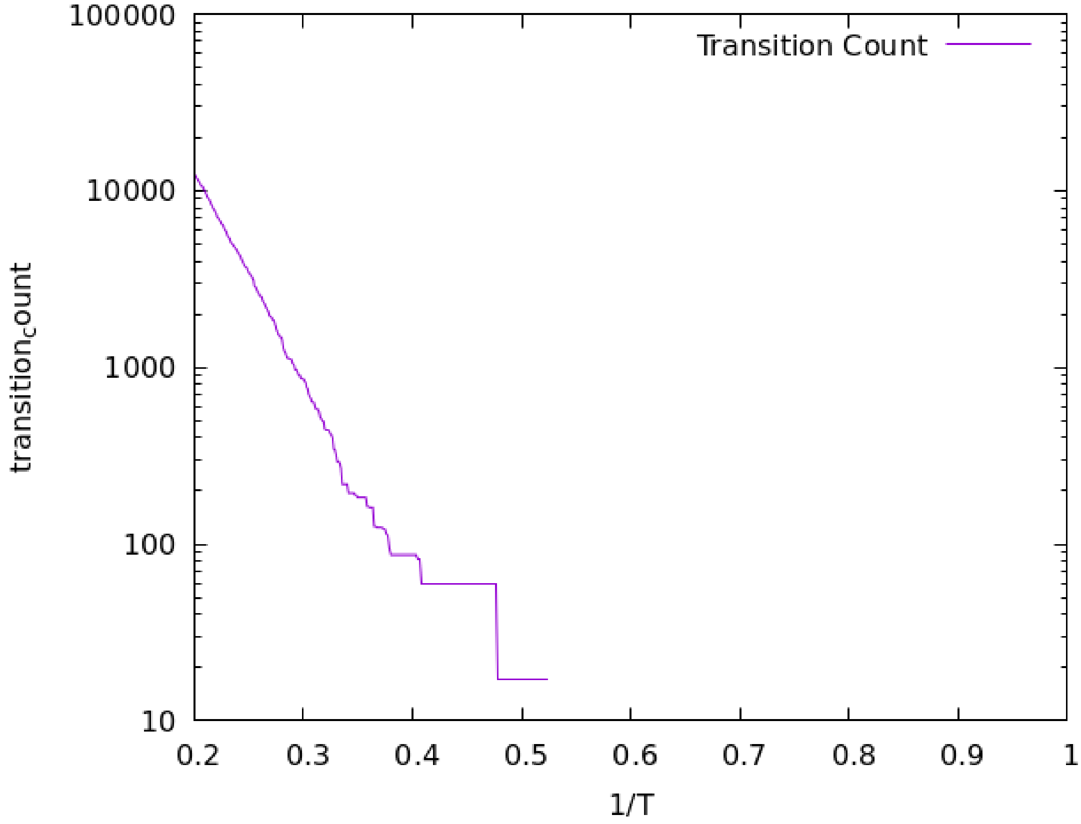


図 6 遷移関数のグラフ

0.2≦1/T≦0.4 でおおよその線形関係が見られた。この結果からアレニウスの式である exp(1/T)と遷移関数には相関があることが分かる。ここから、粒子の遷移回数には化学反応の反応速度と対応するという結果が得られる。