

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО
ФАКУЛЬТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПРОГРАММИРОВАНИЯ

ОТЧЁТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ
«Изучение статистических распределений Максвелла и Больцмана»

Выполнил студент:

Ярощук Владислав Викторович

Группа:

М3108

Проверил:

Санкт-Петербург, 2019 г.

Содержание

1. Задачи	2
2. Решение задач	3
2.1. Исследование распределения Максвелла	3
2.2. Исследование распределения Больцмана	8
3. Вывод	10

Часть 1

Задачи

1. Исследование распределения Максвелла;

- (a) исследовать распределение Максвелла по модулю скорости при различных температурах для различных газов;
- (b) исследовать распределение Максвелла по проекции (составляющей) скорости при различных температурах для различных газов;
- (c) проверить нормировку распределений;
- (d) оценить процент молекул, имеющих скорости $[0, v_{\text{ср.кв.}}]$;
- (e) определить наиболее вероятную скорость;
- (f) определить процент молекул, имеющих скорость, отличающуюся от наиболее вероятной на 1%, 5%.

2. Исследование распределения Больцмана;

- (a) исследовать распределение Больцмана для различных газов при постоянной температуре;
- (b) исследовать распределение Больцмана для различных газов при убывающей с высотой температуре.

Часть 2

Решение задач

2.1. Исследование распределения Максвелла

Начальные параметры:

```
1 (* Constants *)
2 k = 1.380649 * 10^-23; (*Boltzmann constant*)
3 H2m = 2 * 1.6605 * 10^-27;
4 N2m = 28 * 1.6605 * 10^-27;
5 O2m = 32 * 1.6605 * 10^-27;
6 T0 = 73;
7 T1 = 273;
8 T2 = 473;
9
```

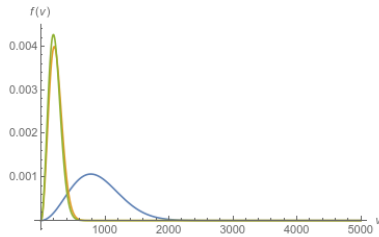
(а) Исследование распределения Максвелла по модулю скорости

$$f(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)$$

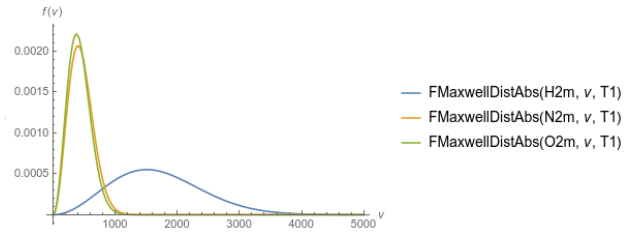
Листинг программы Mathematica (**Plot** для T_0 , для T_1, T_2 аналогично):

```
1 (* Maxwell Distribution for the absolute value of speed *)
2 FMaxwellDistAbs[m_, v_, T_] =
3   4*Pi*v^2*(m/(2*Pi*k*T))^(3/2)*Exp[-m*v^2/(2*k*T)];
4
5 (* T = T0 = 73K *)
6 Plot[{FMaxwellDistAbs[H2m, v, T0],
7       FMaxwellDistAbs[N2m, v, T0],
8       FMaxwellDistAbs[O2m, v, T0]},
9       {v, 0, 5000},
10      PlotLegends -> "Expressions",
11      AxesLabel -> {v, f[v]},
12      PlotRange -> All]
13
```

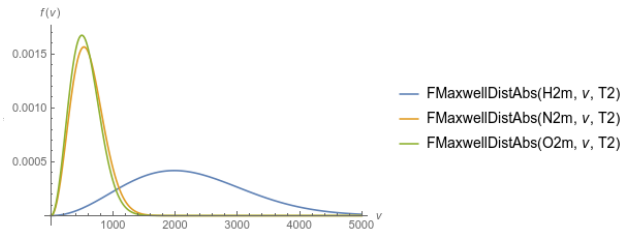
Полученные графики распределения Максвелла по модулю скорости:



$$T = T_0 = 73K$$



$$T = T_1 = 273K$$



$$T = T_2 = 473K$$

(b) Исследование распределения Максвелла по проекции скорости

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_i^2}{2kT}\right)$$

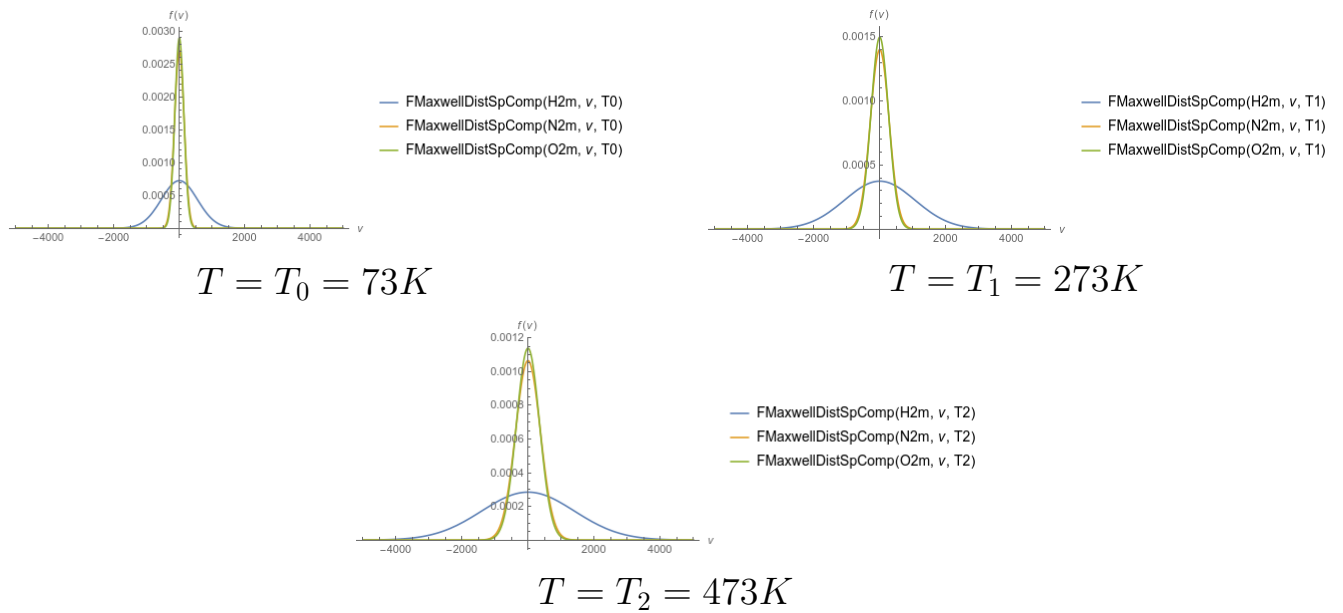
Листинг программы Mathematica (так как распределение аналогично для всех трех проекций, визуализируем для произвольной):

```

1 (* Maxwell Distribution for the speed component in 3-dim space *)
2 FMaxwellDistSpComp[m_, vi_, T_] =
3   Sqrt[m/(2*Pi*k*T)]*Exp[-m*vi^2/(2*k*T)];
4
5 Plot[{FMaxwellDistSpComp[H2m, v, T0],
6       FMaxwellDistSpComp[N2m, v, T0],
7       FMaxwellDistSpComp[O2m, v, T0]},
8      {v, -5000, 5000},
9      PlotLegends -> "Expressions",
10     AxesLabel -> {v, f[v]},
11     PlotRange -> All]
12

```

Полученные графики распределения Максвелла по проекции скорости:



(с) Оценка нормировки распределения Максвелла

Имеем распределения Максвелла по модулю скорости и по проекции скорости из пунктов (а), (б). Тогда, если они нормированы, получим:

$$\int_0^{+\infty} f(v) dv = 1, f(v) — \text{распределение по модулю скорости}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(v_i) dv = 1, f(v_i) — \text{распределение по проекции скорости}$$

Листинг программы Mathematica:

```

1 (* Checking the normalization of the distribution functions *)
2 Integrate[FMaxwellDistAbs[N2m, v, T0], {v, 0, +Infinity}]
3 Integrate[FMaxwellDistSpComp[N2m, v, T0], {v, -Infinity, +Infinity}]
4

```

Полученный результат:

Out[14]= 1.

Out[15]= 1.

Вывод: распределения нормализованы

(d) Определение процента молекул, имеющих модуль скорости из промежутка $[0, v_{\text{ср.кв.}}]$

Среднеквадратическая скорость равна:

$$v_{\text{ср.кв.}} = \sqrt{\int_0^{+\infty} v^2 f(v) dv} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$$

Зная функцию распределения, получим искомый процент молекул:

$$100\% \cdot \int_0^{v_{\text{ср.кв.}}} f(v) dv, f(v) — \text{распределение по модулю скорости}$$

Листинг программы Matematica:

```

1 (* Calculating percentage of molecules with speed in [0, v_avg_sqr] *)
2 vMS[m_, T_] = Sqrt[3*k*T/m]; (* The mean square speed *)
3 H2T0SqrSpd = vMS[H2m, T0]; (* The mean square speed for H2 when T=T0 *)
4 Integrate[FMaxwellDistAbs[H2m, v, T0], {v, 0, H2T0SqrSpd}] * 100
5
```

Полученный результат (60.8%):

Out[25]= 60.8375

(e) Определение наиболее вероятной скорости

Наиболее вероятная скорость соответствует максимальному значению плотности вероятности распределения. Тогда решив $\frac{\partial f(v_{\text{н.в.}})}{\partial v_{\text{н.в.}}} = 0$ относительно $v_{\text{н.в.}}$, получим:

$$v_{\text{н.в.}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

Зная функцию распределения, получим искомый процент молекул:

$$100\% \cdot \int_0^{v_{\text{ср.кв.}}} f(v) dv, f(v) — \text{распределение по модулю скорости}$$

Листинг программы Matematica:

```

1 (* The most probable speed *)
2 vP[m_, T_] = Sqrt[2*k*T / m];
3
4 (* For different temperatures, H2 gas *)
5 H2T0MPSpeed = vP[H2m, T0]
6 H2T1MPSpeed = vP[H2m, T1]
7 H2T2MPSpeed = vP[H2m, T2]
8
```

Полученный результат, м/с:

Out[]= 779.083

Out[]= 1506.62

Out[]= 1983.14

(f) Вычисление процента молекул со скоростями, отличающимися от наиболее вероятной на 1%, 5%

Используя значения наиболее вероятной скорости из пункта (е), получим искомый процент молекул (отличие принято за m процентов):

$$100\% \cdot \int_{v_{H.B.} - v_{H.B.} \cdot m\%}^{v_{H.B.} + v_{H.B.} \cdot m\%} f(v) dv, f(v) — \text{распределение по модулю скорости}$$

Листинг программы Mathematica:

```

1 (* Calculating percintage of molecules with speeds v_most_prob + -
   v_most_prob * 1% *)
2 Integrate[
3   FMaxwellDistAbs[H2m, v, T0],
4   {v, H2T0MPSpeed - H2T0MPSpeed * 0.01,
5     H2T0MPSpeed + H2T0MPSpeed * 0.01}] * 100
6
7 (* Calculating percintage of molecules with speeds v_most_prob + -
   v_most_prob * 5% *)
8 Integrate[
9   FMaxwellDistAbs[H2m, v, T0],
10  {v, H2T0MPSpeed - H2T0MPSpeed * 0.05,
11    H2T0MPSpeed + H2T0MPSpeed * 0.05}] * 100
12

```

Полученный результат (1.66%, 4.97%):

```

In[26]:= (* Calculating percintage of molecules with speeds v_most_prob ± v_most_prob * 1% *)
Integrate[FMaxwellDistAbs[H2m, v, T0], {v, H2T0MPSpeed - H2T0MPSpeed * 0.01, H2T0MPSpeed + H2T0MPSpeed * 0.01}] * 100
Out[26]= 1.66032

In[27]:= (* Calculating percintage of molecules with speeds v_most_prob ± v_most_prob * 5% *)
Integrate[FMaxwellDistAbs[H2m, v, T0], {v, H2T0MPSpeed - H2T0MPSpeed * 0.05, H2T0MPSpeed + H2T0MPSpeed * 0.05}] * 100
Out[27]= 4.97441

```


2.2. Исследование распределения Больцмана

Начальные параметры (нормальные условия при $h = 0$, концентрация n_0 равна постоянной Лосмидта):

```

1 | (* Constants *)
2 | R = 8.31445985; (* The gas constant *)
3 | g = 9.8066; (* Acceleration *)
4 | n0 = 2.68678112*10^25; (* Loschmidt constant *)
5 |
6 | (* Molar mass *)
7 | H2M = 2;
8 | N2M = 26;
9 | O2M = 32;
10 | AirM = 29;
11 |
```

Функции изменения температуры с высотой (T_0 постоянна, T_1 убывает с увеличением высоты, достигая значения 0):

$$T_0(h) = 273.15K = const$$

$$T_1(h) = T_0 - 6.5h$$

Листинг программы Mathematica:

```

1 | (* Temperature *)
2 | T0[h_] = 273.15;
3 | T1[h_] = Piecewise[{ {T0[0] - 6.5 * h, T0[0] >= 6.5 * h},
4 |                      {0, T0[0] < 6.5 * h} }];
5 |
```

Распределение Больцмана (μ — молярная масса газа):

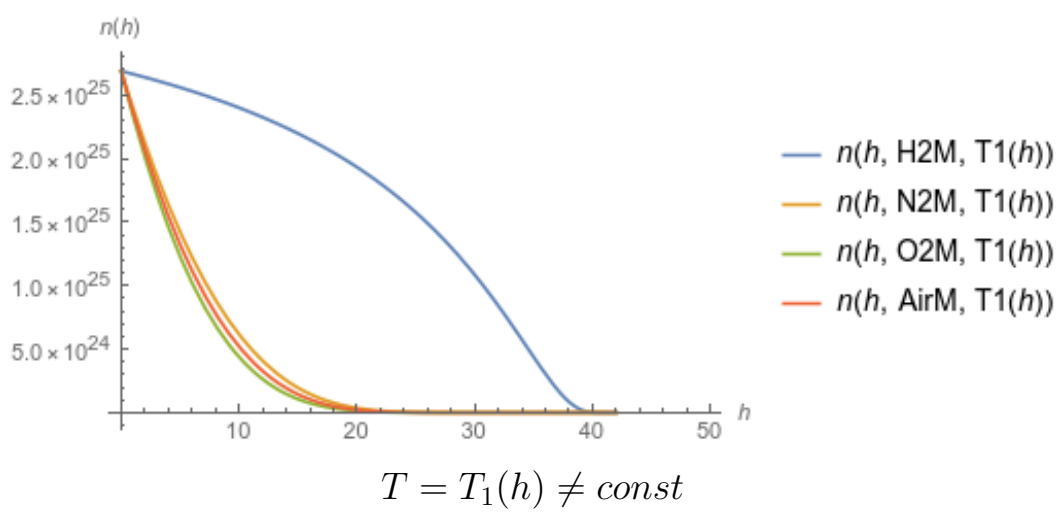
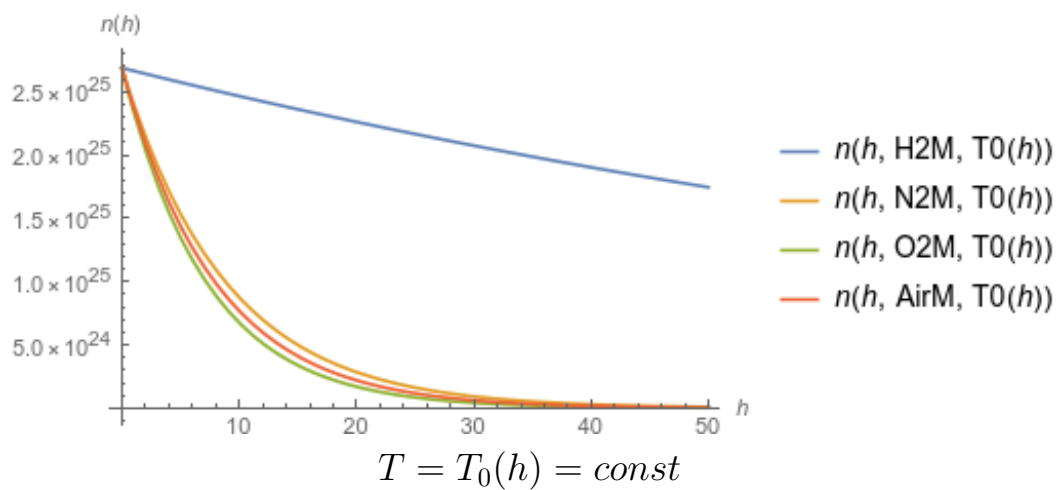
$$n(h) = n_0 \cdot \exp\left(-\frac{\mu gh}{RT}\right)$$

Листинг программы Mathematica (**Plot** для T_0 , для T_1 аналогично):

```

1 | (* Boltzmann distribution *)
2 | n[h_, M_, T_] = n0*Exp[-M*g*h/(R*T)];
3 |
4 | Plot[{n[h, H2M, T0[h]],
5 |       n[h, N2M, T0[h]],
6 |       n[h, O2M, T0[h]],
7 |       n[h, AirM, T0[h]]},
8 |     {h, 0, 50},
9 |     PlotLegends -> "Expressions",
10 |    AxesLabel -> {h, n[h]}]
11 |
```

Полученные графики распределения Больцмана:



Часть 3

Вывод

Выполнены поставленные задачи:

- исследовано распределение Максвелла по модулю скорости при различных температурах для различных газов;
- исследовано распределение Максвелла по проекции (составляющей) скорости при различных температурах для различных газов;
- для обоих распределений подтверждено визуализацией, что число молекул с большими скоростями прямо пропорционально температуре и обратно пропорционально массе молекулы;
- проверена и подтверждена нормировка распределений;
- оценен процент молекул, имеющих скорости $[0, v_{\text{ср.кв.}}]$;
- определена наиболее вероятная скорость молекул при различных температурах;
- определен процент молекул, имеющих скорость, отличающуюся от наиболее вероятной на 1%, 5%.
- исследовано распределение Больцмана для различных газов при постоянной температуре;
- исследовано распределение Больцмана для различных газов при убывающей с высотой температуре;
- для обоих случаев подтверждено визуализацией, что с увеличением высоты концентрация убывает, скорость убывания прямо пропорциональна массе молекулы.

Для выполнения были использованы инструменты Wolfram Mathematica:

- Plot - построение двумерных графиков функций;
- Piecewise - кусочное задание функций;
- Integrate - интегрирование функций.