

计算物理作业 3

王一杰^a

^a 中国科学技术大学

2021 年 10 月 17 日

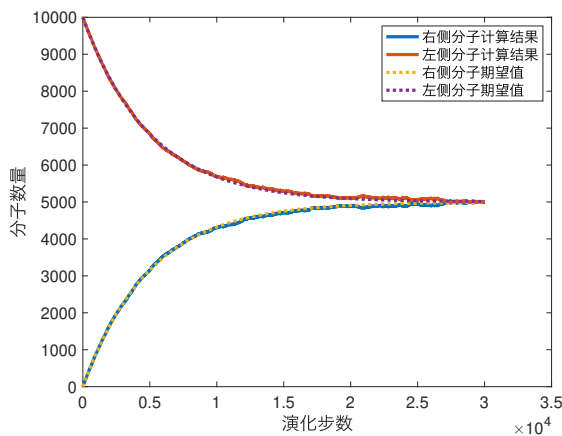
1 Homework 3

1.1 Problem 1

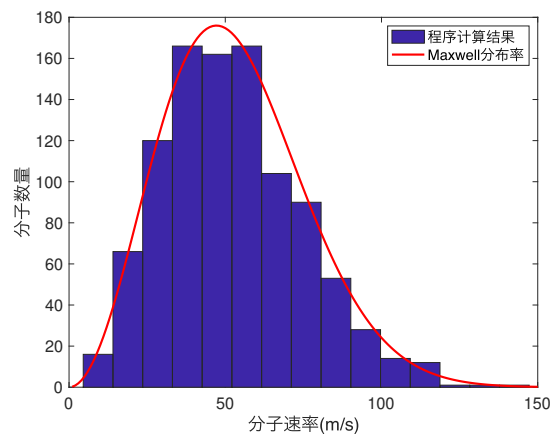
该问题的程序很容易给出如下 (MATLAB 代码):

```
1 N=10000; %粒子数量
2 steps=3.*10.^4; %演化步数
3 state=zeros(1,N); %粒子状态记录, 1代表R, 0代表L
4 statesmemory=zeros(1,steps+1); %记录每次右侧粒子数量
5 statesmemory(1,1)=sum(state);
6 Nstep=1:1:steps+1;
7 for i=1:steps
8     evolutionparticle =round(rand(1,1)*N+0.5); %随机演化
9     state (1, evolutionparticle )=rem(1+state(1,evolutionparticle ),2);
10    statesmemory(1,1+i)=sum(state); %记录每次右侧粒子数量
11 end
12 Lstatesmemory=N-statesmemory; %计算每次演化左侧粒子数量
```

演化结果如图 1(a) 所示, 右侧粒子数量理论计算期望值是 $n_R = \frac{N}{2}(1 - (\frac{2}{N})^n)$, 其中 N 为粒子总数, n 为演化次数, 计算结果与理论计算期望相符。



(a) Problem1 结果



(b) Problem2 结果

图 1: 程序计算结果

1.2 Problem 2

由于最大速率 $V_{max} = 100m/s \ll c$, 故暂不计算相对论效应, 且假设分子质量相同。

第一步是随机选择两个发生相互作用的分子, 这可以用均匀随机变量确定。

第二步是计算质心速率, 若入射速率记为 v_i, v_j , 易于得到质心的速率为: $v_c = \frac{\sqrt{v_i^2 + v_j^2 + 2v_i v_j \cos \theta_i}}{2}$, 其中 θ_i 为两个分子入射夹角, 在三维情况下其分布函数同 $f(\theta_i) = \frac{1}{2} \sin(\theta_i)$, 可以用 $[0, 1]$ 区间的均匀随机变量 x 由变换 $\theta_i = \arccos(2x - 1)$ 确定。

第三步, 由于分子质量相同, 相对质心速率相等且为: $v_{cr} = \frac{\sqrt{v_i^2 + v_j^2 - 2v_i v_j \cos \theta_i}}{2}$ 。

第四步, 易于得到出射速率为 $v_{o1} = \sqrt{v_{cr}^2 + v_c^2 + 2v_{cr} v_c \cos \theta_o}$ 和 $v_{o2} = \sqrt{v_{cr}^2 + v_c^2 - 2v_{cr} v_c \cos \theta_o}$, 其中 θ_o 为两个分子质心出射夹角, 在三维情况下其分布函数同 $f(\theta_o) = \frac{1}{2} \sin(\theta_o)$, 可以用 $[0, 1]$ 区间的均匀随机变量 x 由变换 $\theta_o = \arccos(2x - 1)$ 确定。

上述流程的程序很容易如下 (MATLAB 代码):

```

1 N=1000; %分子数量
2 num=1:1:N; %分子序号
3 v=num*0.1; %分子初始速率
4 steps=10.^6; %演化步数
5 for i=1:1:steps
6     thetai=acos(rand(1,1)*2-1); %入射角
7     evolutionparticle1 =round(rand(1,1)*N+0.5); %分子选择1
8     evolutionparticle2 =round(rand(1,1)*N+0.5); %分子选择2
9     v1=v(1, evolutionparticle1 ); %分子1速率读取
10    v2=v(1, evolutionparticle2 ); %分子2速率读取
11    vc=sqrt(v1^2+v2^2+2*v1*v2*cos(thetai))/2; %分子质心速率
12    thetacout=acos(rand(1,1)*2-1);
13    vcr=sqrt(v1^2+v2^2-2*v1*v2*cos(thetai))/2; %分子相对质心速率
14    vo1=sqrt(vcr^2+vc^2+2*vcr*vc*cos(thetacout)); %分子1出射速率
15    vo2=sqrt(vcr^2+vc^2+2*vcr*vc*cos(pi-thetacout)); %分子2出射速率
16    v(1, evolutionparticle1 )=vo1; %分子1速率存储
17    v(1, evolutionparticle2 )=vo2; %分子2速率存储
18 end
19 hist(v,20);

```

Maxwell 速率分布率给出的分子速率分布结果是 $N(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{1}{2\pi\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{v^2}{2\alpha}} \cdot N$, 其中 v 为分子速率, N 为分子总数, α 满足 $\alpha = \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N v_i^2$ 。

演化结果如图 2(b) 所示, 可见演化结果与 Maxwell 速率分布率基本吻合, 可见程序运行结果良好。