Úloha 7.
Frekvence srážek molekul plynu

Marek Duchaň, Erik Búš, Radek Slavíček

Zadání

Uvažujme o plynu molekul s koncentrací n, jejichž rychlosti mají Maxwellovo rozdělení. Za předpokladu, že srážky molekul v plynu můžeme popisovat jako srážky tuhých koulí s průměrem d, lze pro frekvenci srážek v jednotce objemu plynu odvodit výraz

$$Z = \frac{1}{2} n^2 \pi d^2 \int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int_{-\infty}^{+\infty} c(u,v,w,u',v',w') f(u,v,w) f(u',v',w')\, \mathrm{d}u\, \mathrm{d}v\, \mathrm{d}w\, \mathrm{d}u'\, \mathrm{d}v'\, \mathrm{d}w' \; .$$

kde $c = \sqrt{(u-u')^2 + (v-v')^2 + (w-w')^2}$ je velikost relativní rychlosti a

$$f(u,v,w) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{m(u^2+v^2+w^2)}{2k_B T}\right] \; .$$

Metodou Monte-Carlo vypočtěte bezrozměrnou konstantu

$$\frac{Z}{n^2 \pi d^2 c_0} \; ,$$

v níž $c_0 = \sqrt{3k_B T/m}$ značí střední kvadratickou rychlost molekul plynu, a porovnejte svůj výsledek získaný s různým počtem vyčíslení integrandu s přesnou hodnotou $2/\sqrt{3\pi}$. Při výpočtu je výhodné převést integrál do bezrozměrných veličin $\tilde{u} = u\sqrt{m/k_B T}$ atd.

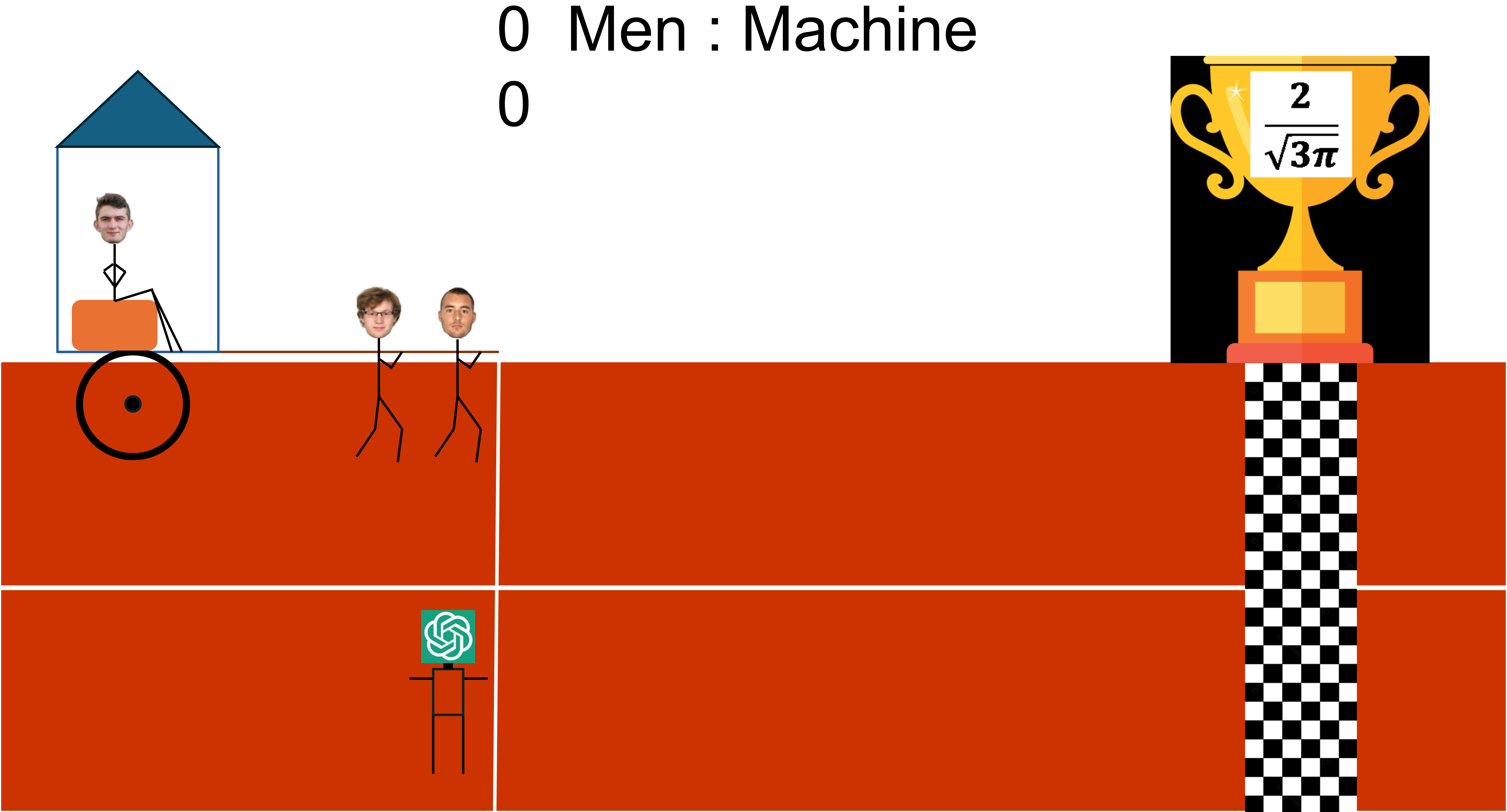
Úprava na bezrozměrný integrál

$$\frac{Z}{n^2\pi d^2 c_0} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \cdot (\frac{1}{2\pi})^3 \iiint \iiint_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}\tilde{f} \mathrm{d}\tilde{u}\ \mathrm{d}\tilde{v}\ \mathrm{d}\tilde{w}\ \mathrm{d}\tilde{u}'\mathrm{d}\tilde{v}'\mathrm{d}\tilde{w}'$$

$$\tilde{c} = \sqrt{(\tilde{u} - \tilde{u}')^2 + (\tilde{v} - \tilde{v}')^2 + (\tilde{w} - \tilde{w}')^2}$$

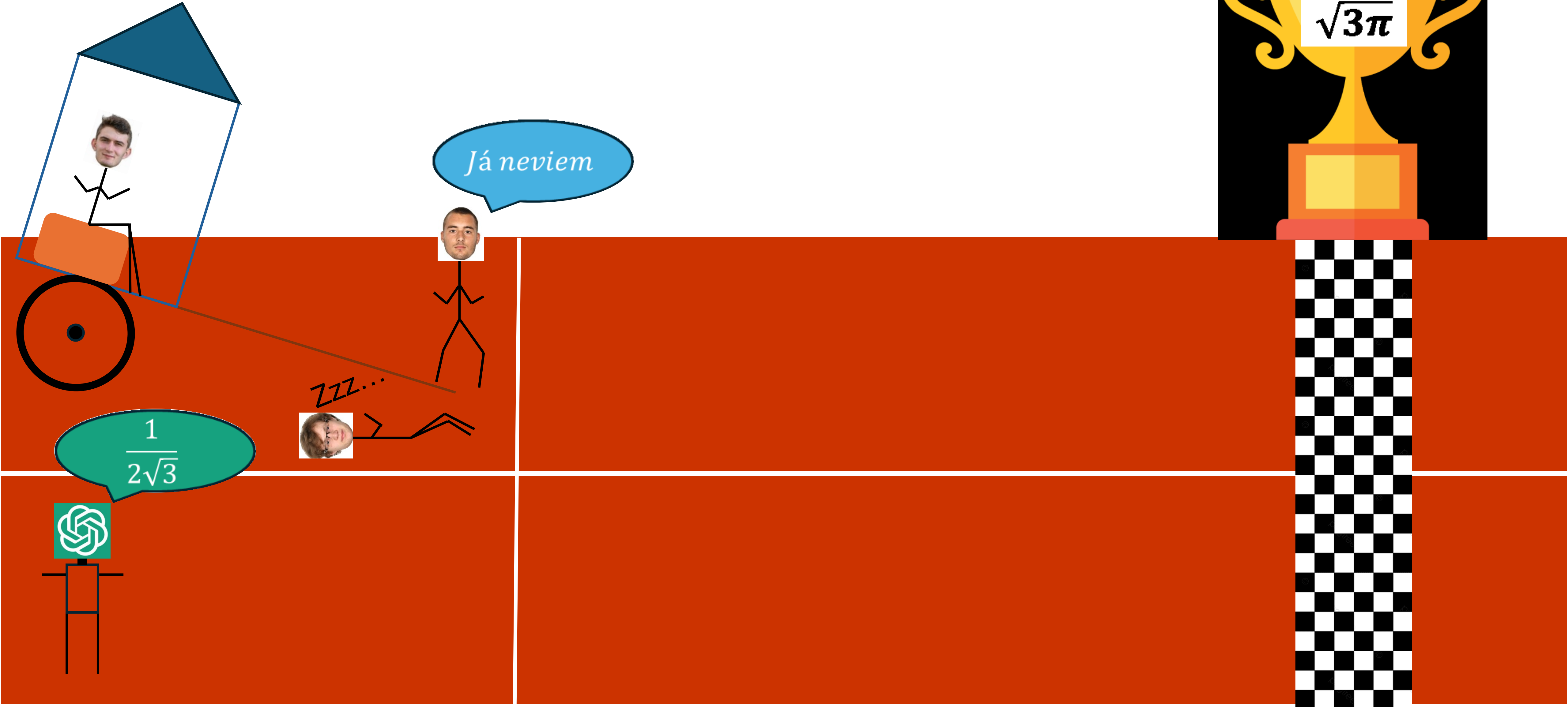
$$\tilde{f} = \exp\left[-\frac{(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{w}^2 + \tilde{u}'^2 + \tilde{v}'^2 + \tilde{w}'^2)}{2}\right]$$

Analytické řešení

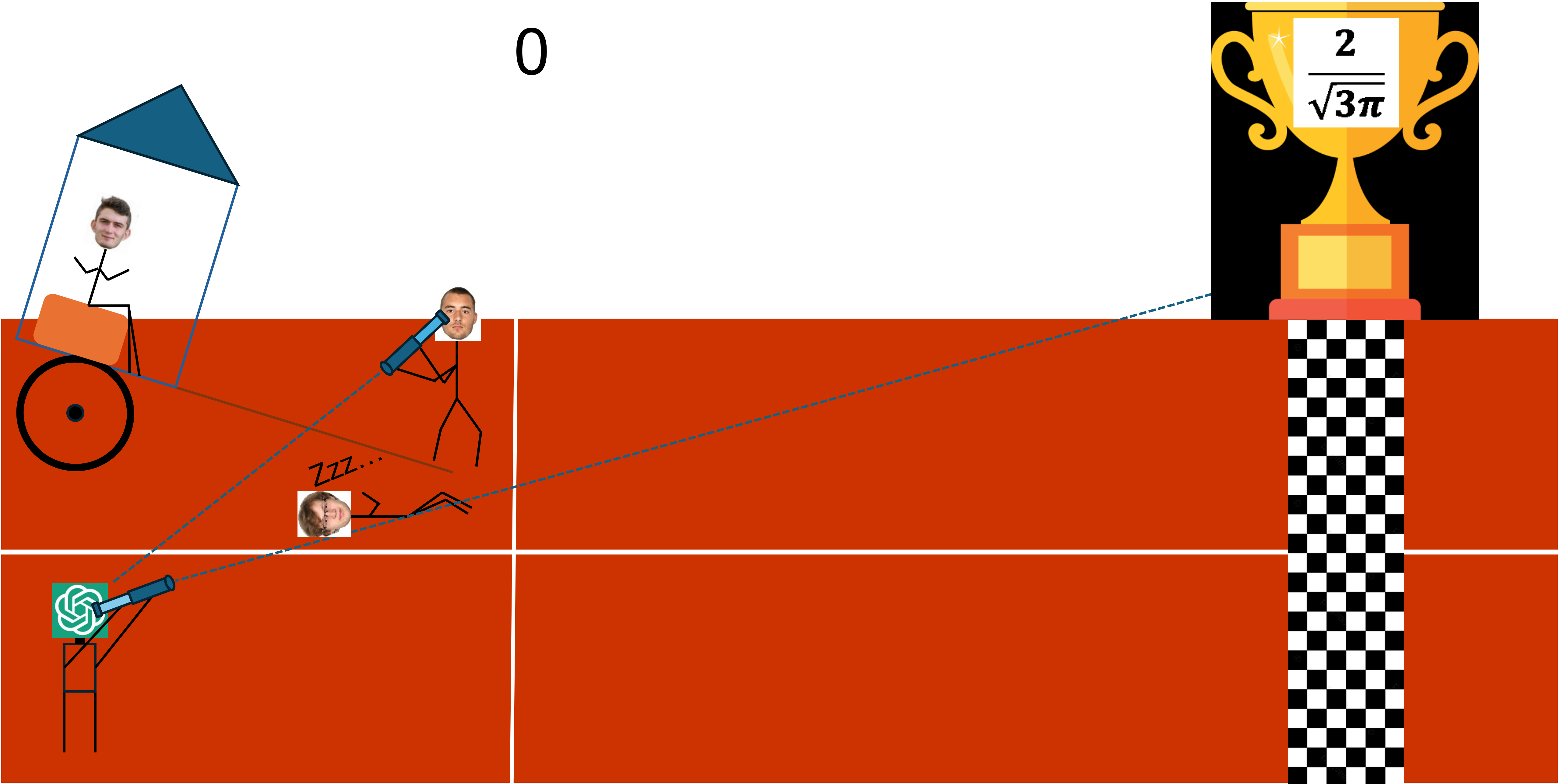

0 Men : Machine
0
$\frac{2}{\sqrt{3\pi}}$

0 Men : Machine

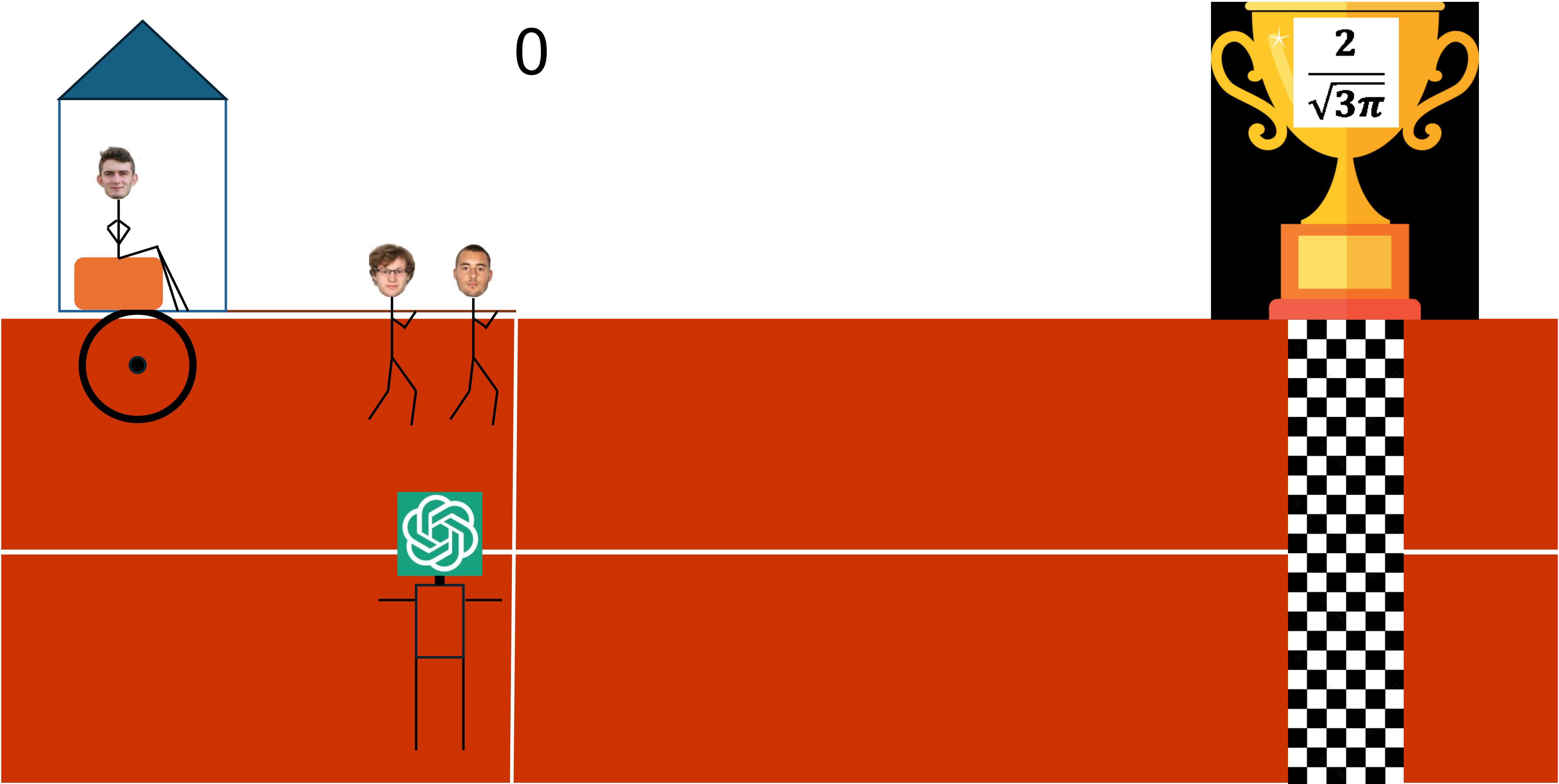
0



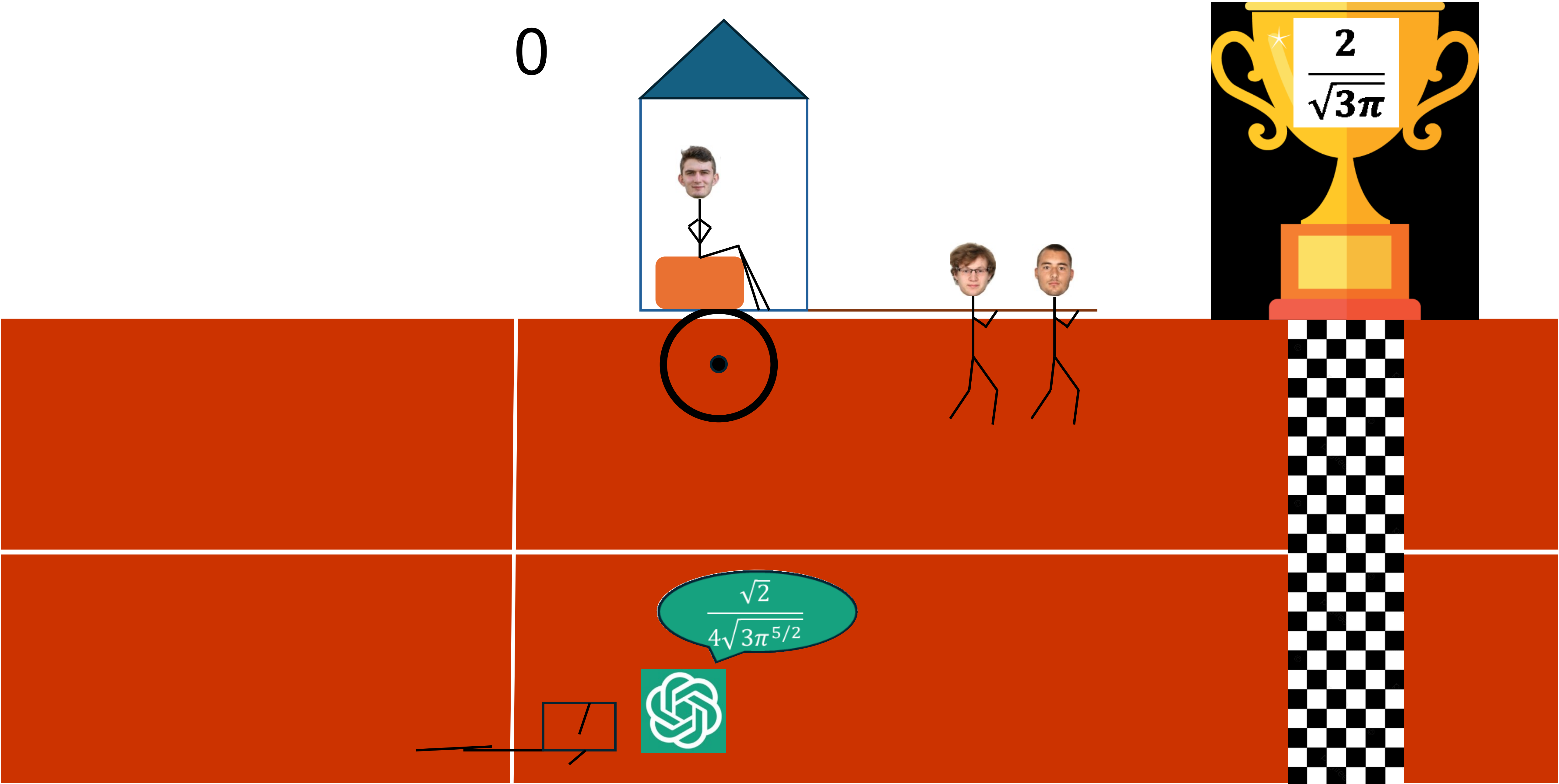
0 Men : Machine
0



0 Men : Machine
0



0 Men : Machine
0



Analytické řešení

Rovnice

$$\frac{Z}{n^2 \pi d^2 c_0} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \cdot (\frac{1}{2\pi})^3 \iiint \iiint_{-\infty}^{+\infty} \tilde{c}\tilde{f} \mathrm{d}\tilde{u}\ \mathrm{d}\tilde{v}\ \mathrm{d}\tilde{w}\ \mathrm{d}\tilde{u}'\mathrm{d}\tilde{v}'\mathrm{d}\tilde{w}'$$

$$\tilde{c} = \sqrt{(\tilde{u} - \tilde{u}')^2 + (\tilde{v} - \tilde{v}')^2 + (\tilde{w} - \tilde{w}')^2}$$

$$\tilde{f} = \exp\left[-\frac{(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{w}^2 + \tilde{u}'^2 + \tilde{v}'^2 + \tilde{w}'^2)}{2}\right]$$

Substituce (zapůjčeno od GPT)

$$\tilde{u} = u + u_0$$

$$\tilde{v} = v + v_0$$

$$\tilde{w} = w + w_0$$

$$\tilde{u}\,' = u - u_0$$

$$\tilde{v}\,' = v - v_0$$

$$\tilde{w}\,' = w - w_0$$

Jacobiho matice

$$\mathrm{J} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$|det(J)| = 8$$

Členy po dosazení

$$\sqrt{(\tilde{u} - \tilde{u}\,')^2 + (\tilde{v} - \tilde{v}\,')^2 + (\tilde{w} - \tilde{w}\,')^2} = 2\sqrt{u_0^2 + v_0^2 + w_0^2}$$

$$\exp\left[-\frac{\tilde{u}^2 + \tilde{u}\,'^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{v}\,'^2 + \tilde{w}^2 + \tilde{w}\,'^2}{2}\right] = \exp\left[-(u^2 + u_0^2 + v^2 + v_0^2 + w^2 + w_0^2)\right]$$

Analytické řešení

$$I = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 16\int_{-\infty}^{\infty} dV\sqrt{u_0^2+v_0^2+w_0^2}\cdot e^{-(u^2+u_0^2+v^2+v_0^2+w^2+w_0^2)} =$$

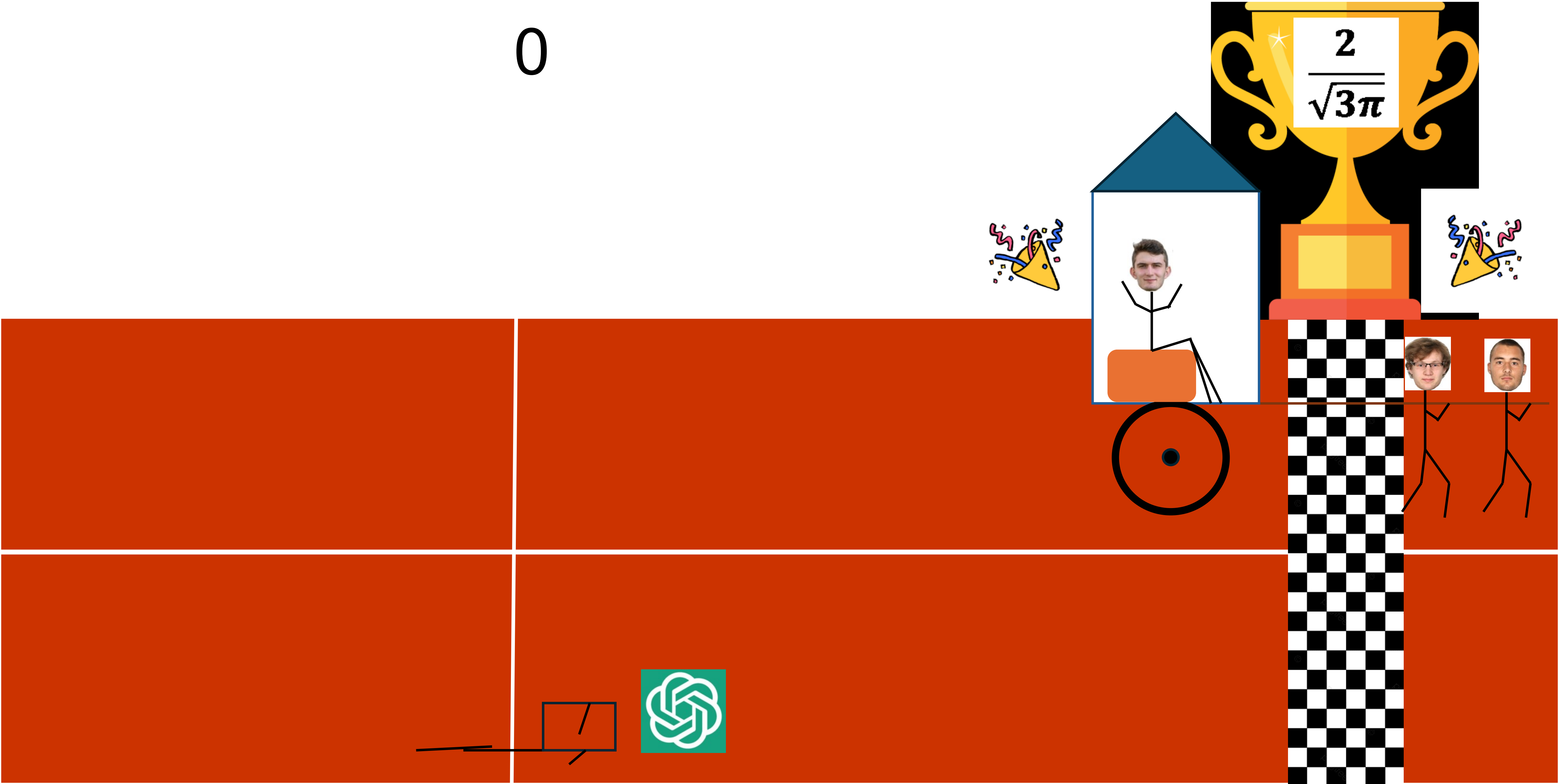
$$\frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 16\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sqrt{r^2}e^{-r^2}r^2\sin(\theta)drd\phi d\theta\int_{-\infty}^{\infty} dudvdwe^{-(u^2+v^2+w^2)} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\pi^3}4\pi\int_0^{\infty} e^{-r^2}r^3dr(\sqrt{\pi})^3 =$$

$$\frac{4}{\sqrt{3\pi}}\int_0^{\infty}\frac{1}{2}te^{-t}dt =$$

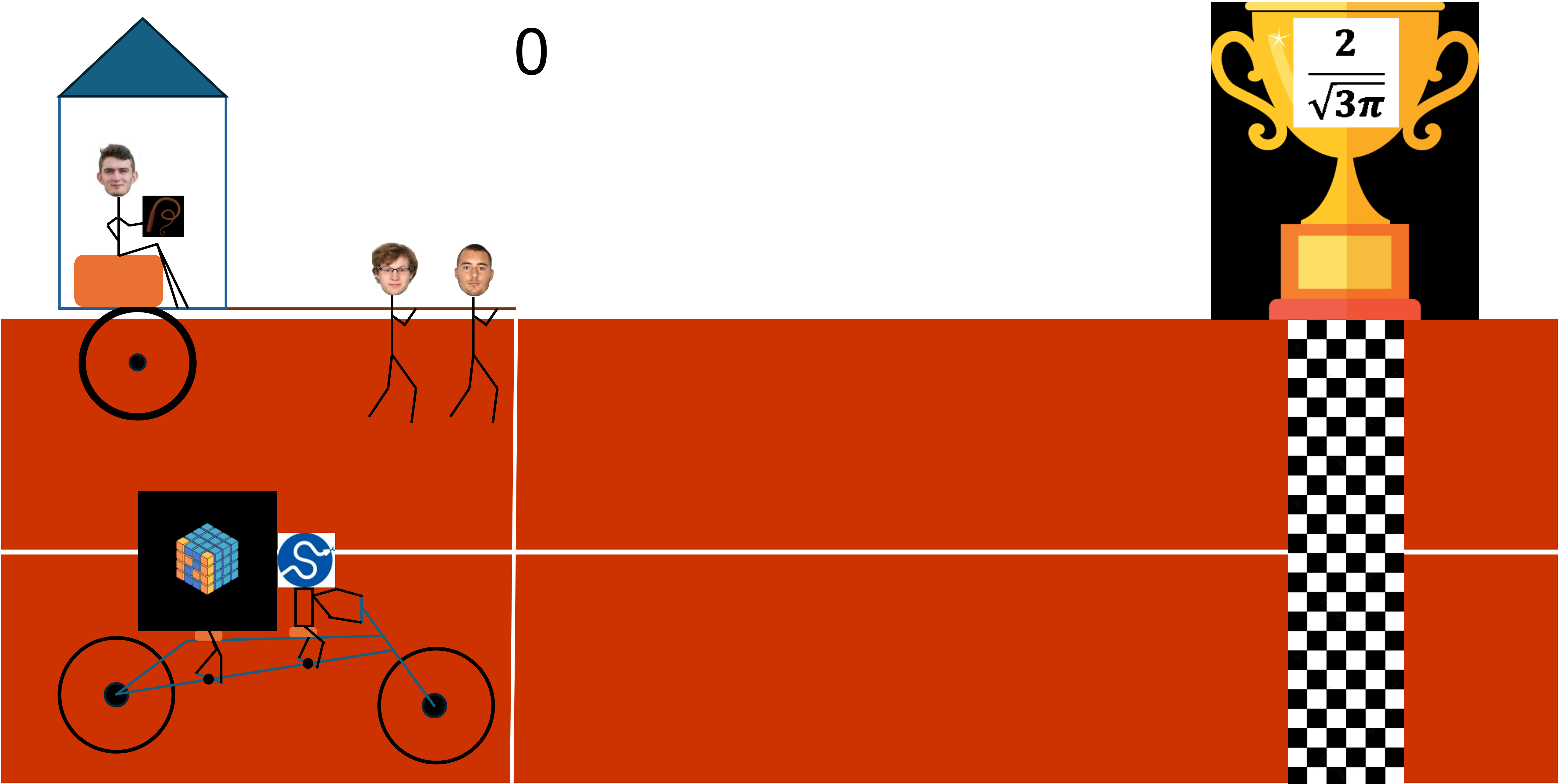
$$\frac{2}{\sqrt{3\pi}}\Gamma(2) = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$$

1 Men : Machine
0

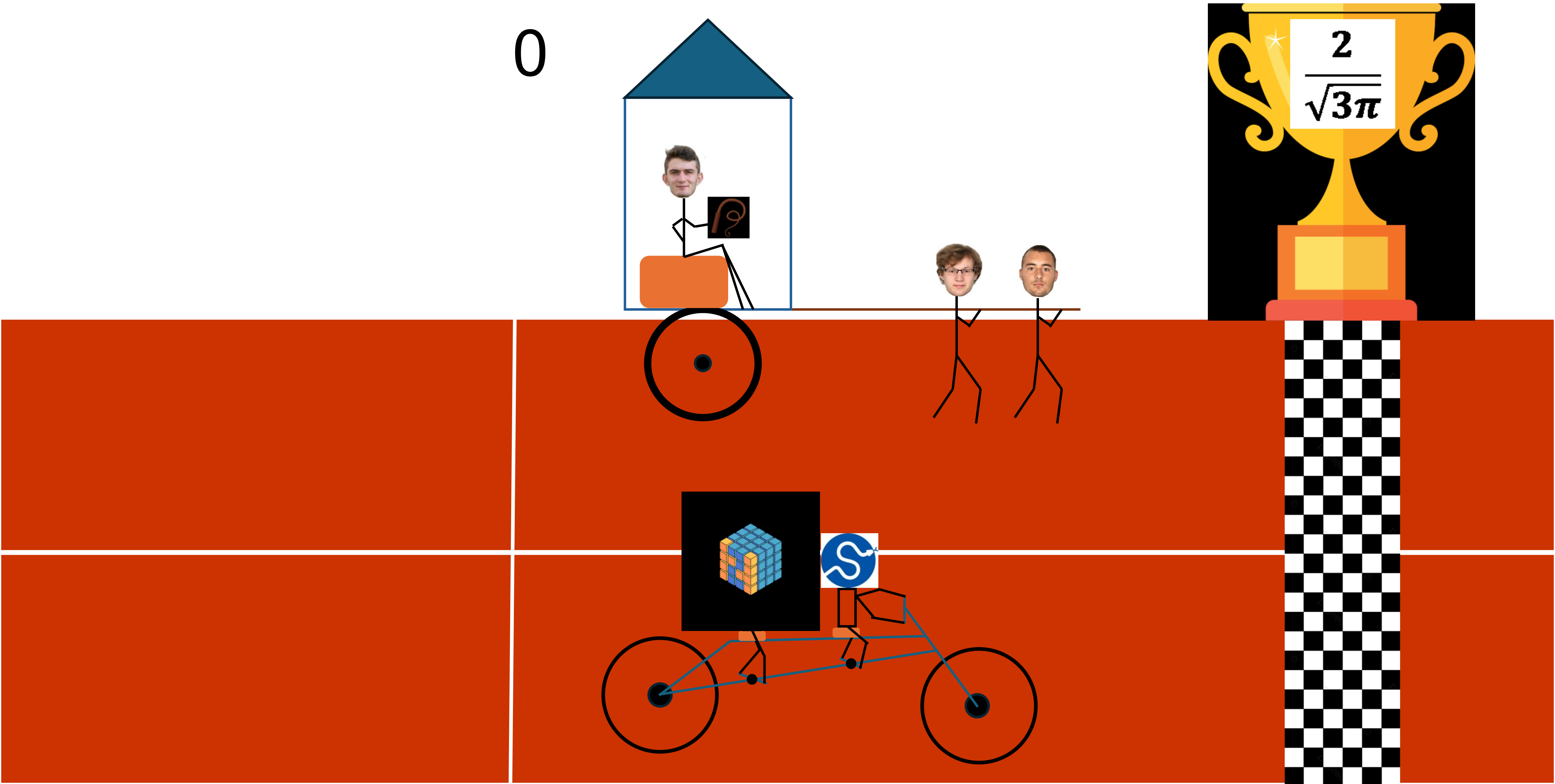


Numerické řešení

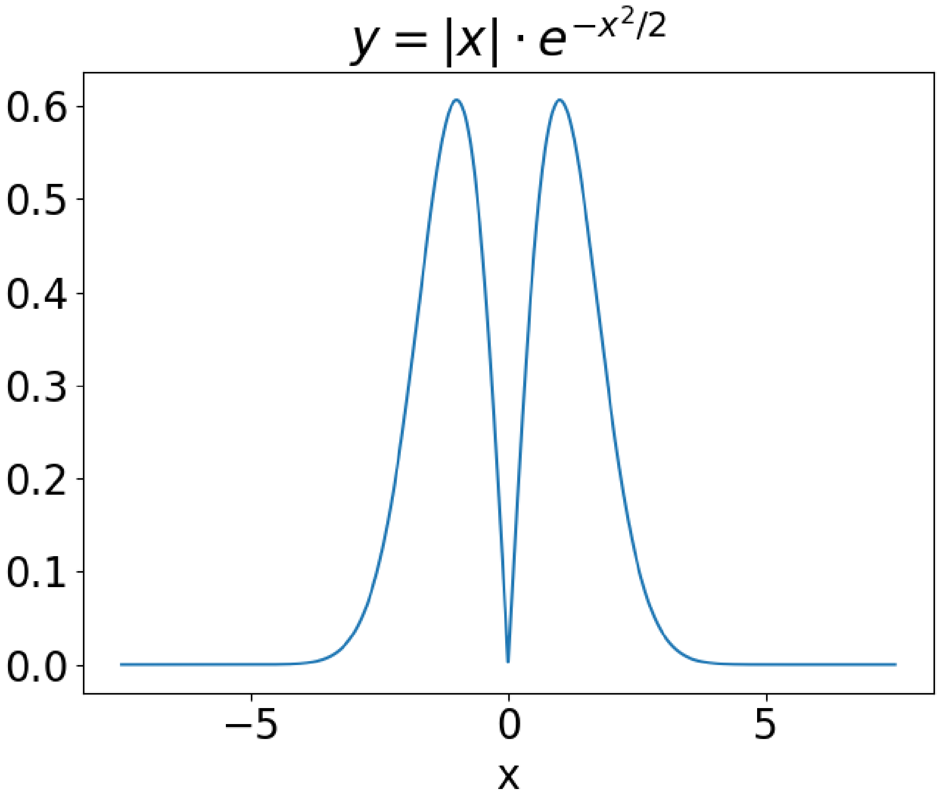
1 Men : Machine 0

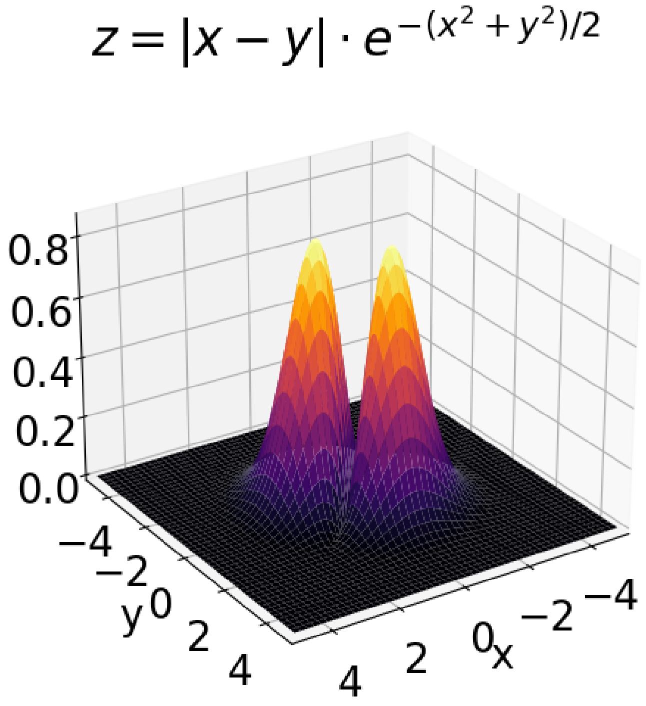


1 Men : Machine
0



Jak ta funkce asi vypadá?



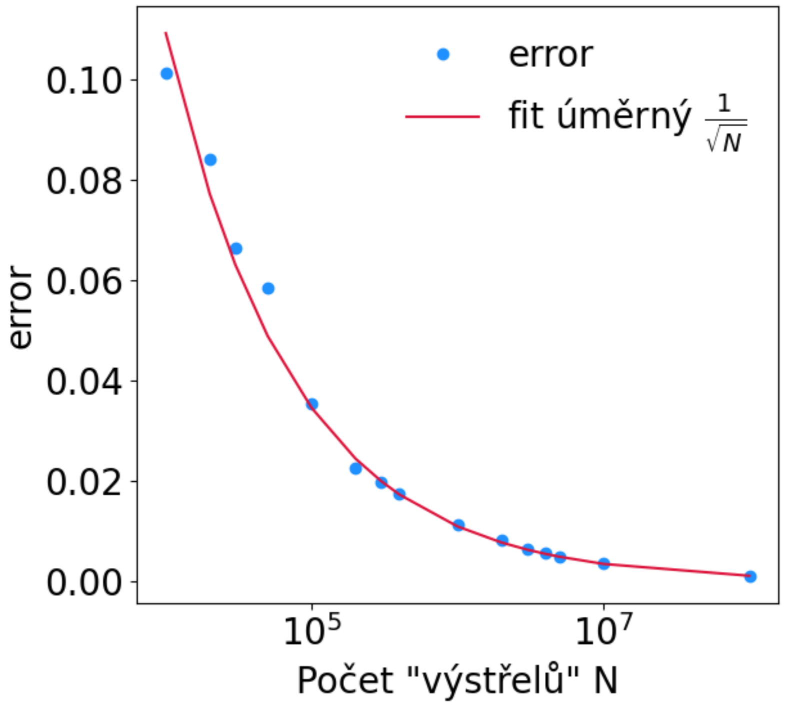


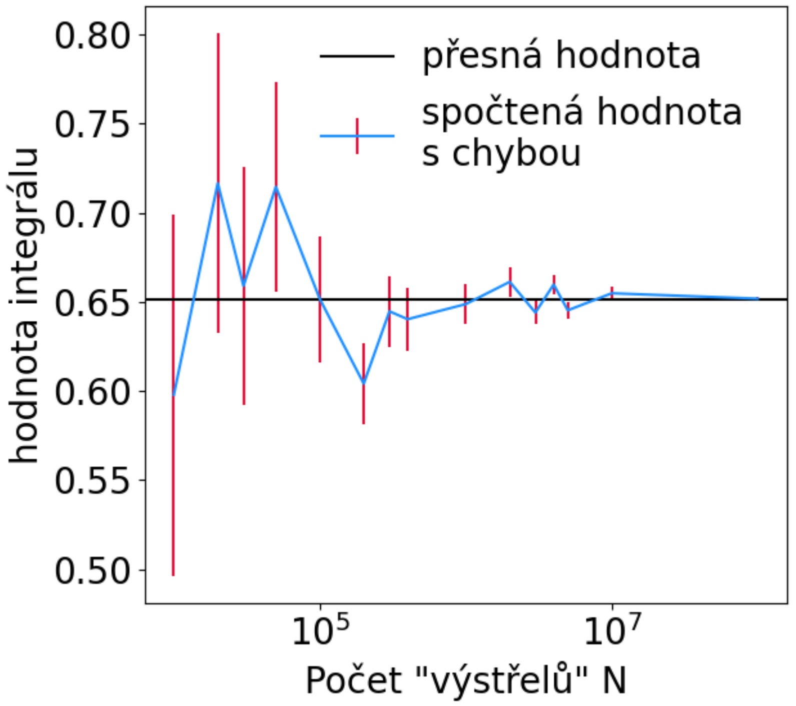
Vidíme, že pro integraci postačí meze +/- 5.

Připomínka metody Monte-Carlo

- Potřebujeme N vektorů pseudonáhodných čísel $\overrightarrow{x_i}$ o rozměru dimenze a funkci $f(\vec{x})$, kterou chceme integrovat.
- Střední hodnoty vyčíslíme jako aritmetický průměr:
- $\langle f \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f\,(\overrightarrow{x_i})$
- $\langle f^2 \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^2(\overrightarrow{x_i})$
- Hodnotu integrálu I a střední kvadratickou odchylku σ pak aproximujeme následovně:
- $I = V\langle f \rangle \approx \frac{V}{N} \sum_{i=1}^{N} f\,(\overrightarrow{x_i})$
- $\sigma = V \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$

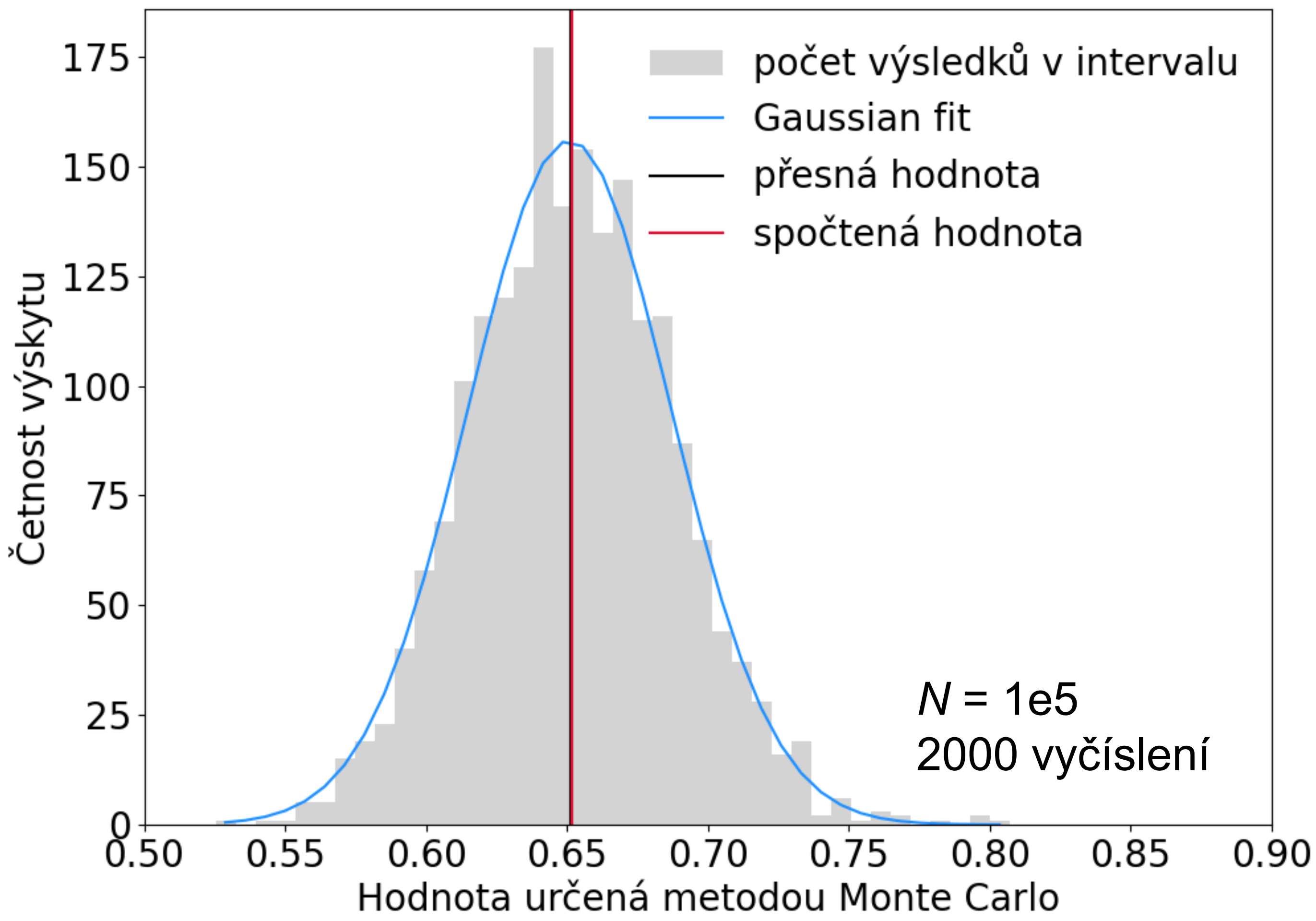
Řešení pro různá N





- Jedno vyčíslení integrálu pro různá N
- $\sigma \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$
- Spočtená hodnota konverguje směrem k přesné hodnotě s rostoucím N

Řešení při průměrování

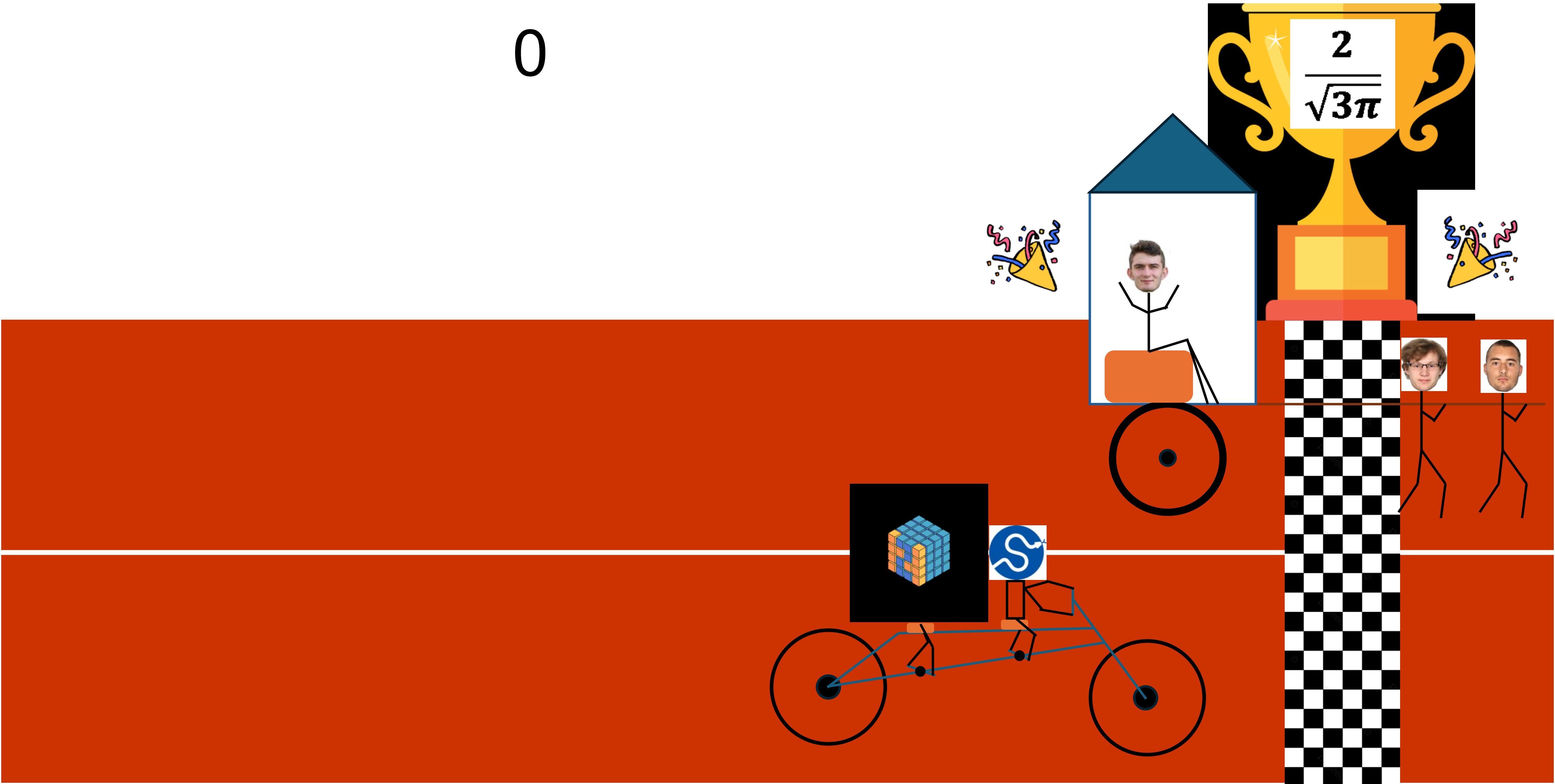


Počítáme 2000 vyčíslení integrálu Monte Carlo s *N* = *1e5* a výslednou hodnotu určíme jako aritmetický průměr hodnot jednotlivých vyčíslení.

Centrální limitní věta nám říká, že při průměrování velkého množství naměřených hodnot bude jejich rozdělení normální. Nezávisle na tom, jaké rozdělení má samotná měřená veličina.

Výsledky si ukážeme přímo v kódu.

2 Men : Machine
0



Závěr

- Spočítali jsme frekvenci srážek metodou Monte-Carlo.
- Ověřili jsme, že chyba se škáluje s $1/\sqrt{N}$.
- Ověřili jsme platnost centrální limitní věty.
- Náš výpočet Monte-Carlo je efektivnější než ekvidistanční integrace pomocí rovnoběžníkového pravidla s 10 násobkem bodů.

Děkujeme za pozornost