Véletlen fizikai folyamatok

Teams: …

Rácz Zoltán

Elm. Fiz. Tansz., 6.79B sz.
Tel.: +36 1 372 2516
Email: racz@general.elte.hu
Honlap: cgl.elte.hu/~racz

Általános információk

Előadás ideje: Kedd 16:00 – 17:30
Előadás helye: A ép. 7.86 terem
Honlap: http://cgl.elte.hu/~racz/Stochastic-processes.html

Konzultáció: E-mail-en történt megbeszélés után Teams-ben.

Házi feladatok kiadása: Hetente, Teams-en keresztül.

Házi feladatok beküldése: Teams-be a házi feladatban megjelölt időpontig
pdf file-ban Vezetéknév_Keresztnév_n.pdf névvel.

Vizsga: 50% házi feladat (vizsgához: minimum az elérhető össz-pontszám fele),
50% szóbeli (feladatmegoldást is tartalmaz).

- Barrikádok, etikai problémák, információátadás optimalizálása.

Véletlen fizikai folyamatok

(2024/2025)

Rácz Zoltán

ELTE Elméleti Fizika Tanszék

1117 Budapest, Pázmány sétány 1/A

Telefon: ELTE: +36-1-372-2516

E-mail: family-name (racz) "@" general.elte.hu

Skype név: raczzoltanattila

Előadás: Csütörtök, 8:15-9:45, A épület, 2.106-os terem, Jelenléti oktatás

---

Előadással kapcsolatos anyagok (2024/25)

Tematika

An amusing lecture about randomness by Persi Diaconis (Stanford Univesity)

Jean Perrin: Brown-mozgás és molekuláris valóság

Brown-mozgás: Einstein és Langevin elméletei (**1-2:** Könyv Előadás)

Házi feladatok:

HF1: Bolyongásproblémák 1 (60)

Értékelés:

A vizsgajegy a következőkből áll össze:

Házi feladatok 50% (jelenlegi állás)

Szóbeli vizsga 50%.

Vizsgatételek

Ajánlott irodalom:

C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods (Springer-Verlag, New York, 2009)

Javaslatok, kérdések (akár névtelenül is): **Válaszok:**

Last updated: 2021. február 10.

T e m a t i k a

- Véletlen jelenségek leírásának történeti aspektusai: statisztikus fizika, kvantum mechanika, stochasztikus dinamika.
- Einstein gondolatai a véletlen jelenségekről: a Brown mozgás makroszkpikus leírása (egyszerűen a Chapman-Kolmogorov egyenlettől a Fokker-Planck egyenletig).
- A Brown mozgás Langevin megközelítése (a stochasztikus differenciál egyenlet fogalma). Perrin kísérletei és analízisük.
- Véletlen folyamatok diszkrét állapottérben: Master egyenlet. Stacionárius állapotok és az egyensúlyhoz relaxálás. Részletes egyensúly és feltételek az átmeneti valószínűségekre.
- Szimulációs problémák diszkrét állapottérben. Egyensúlyhoz relaxálás a kinetikus Ising modellben spin-flip és spin-exchange dinamika esetén.
- Momentumok, kumulánsok, generátorfüggvények. Alkalmazások sorbanállás és születés-kihalás típusú problémákban. Átlagtér elmélet az alacsony momentumokra.
- Hálózatok (Erdős-Rényi, véletlen rekurzív, preferenciális) dinamikai jellemzése, fokszám-eloszlásuk származtatása a Master egyenlet segítségével.
- Stochasztikus differenciál egyenlet túlcsillapított oszcillátorra: Langevin egyenlet és az egyensúlyi hőtartály zajának tulajdonságai.
- Langevin egyenlet Gauss zajjal: a Fokker-Planck egyenlet deriválása. Gauss zaj alkalmazása szimulációs problémákban.
- Fluktuációk, korrelációk és a teljesítményspektrum számolása a Langevin egyenletből. Feszültség- és áramfluktuációk áramkörökben.
- Fluktuációk egyensúlytól távol. Aktív Brown mozgás, avagy milyen távol van egy élőlény az egyensúlytól?

Véletlen fogalma, mérése és értelmezése

Érmefeldobás -- tisztán fizika

Gyakoriság?

$$P_{fej} = \frac{N_{fej}}{N} \to \frac{1}{2}?$$

Szimmetriák?

$$P_{fej} = \frac{1}{2}$$

$$P_5 = \frac{1}{6}$$

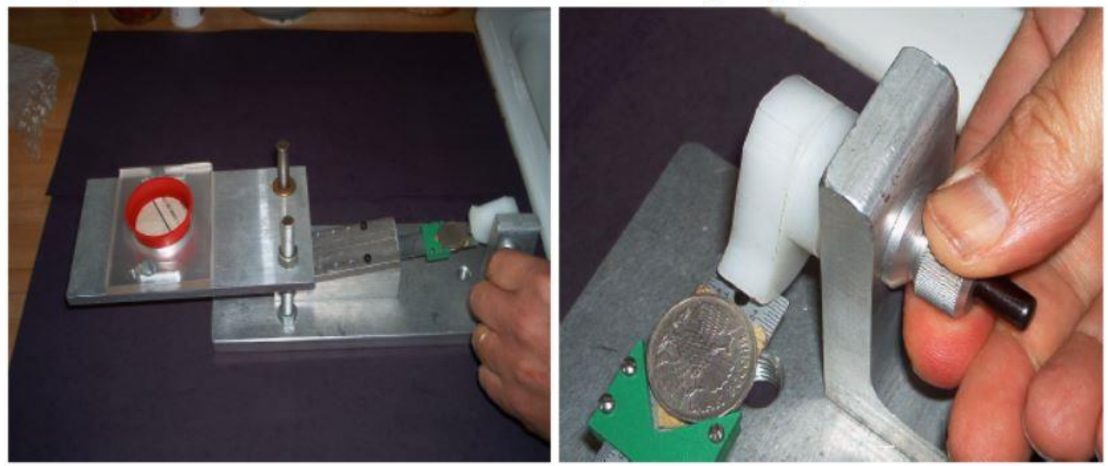
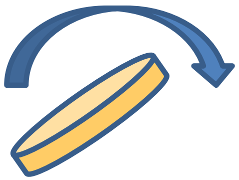


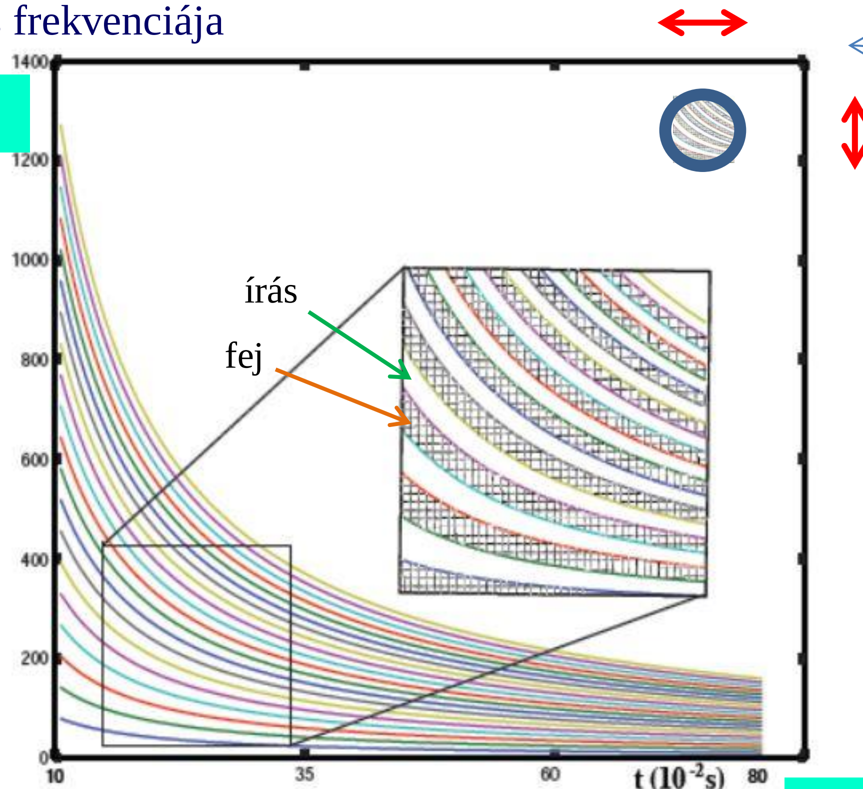
Figure 1.a Figure 1.b

Érmefeldobás -- tisztán fizika

forgás frekvenciája

ν





Kezdőfeltételek határozatlansága (kontrollálhatalansága)

$$P_{fej} = \frac{1}{2}$$

$t \sim$ v

visszatérési idő

$$t = \frac{2\text{v}}{g}$$

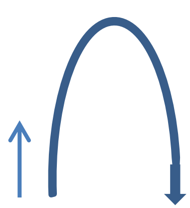
Fordulatok száma a repülés során:

$$N = \frac{t}{1/\nu} = t\nu \quad = const$$

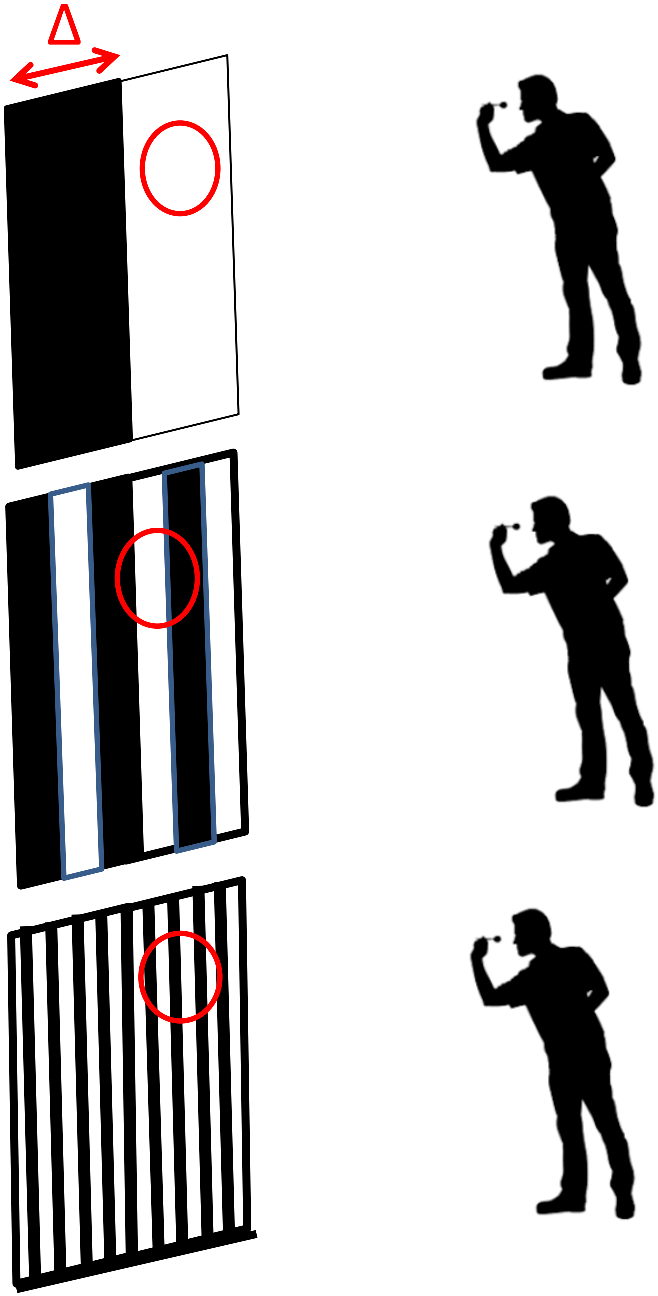
hiperbolák

$$\Delta N = 1 = t\,\Delta\nu \qquad (= \nu\Delta t)$$

v



$$-\frac{1}{2}gt^2 + \text{v}t = 0$$



Valószínűség számolása

H. Poincare 1854-1912

$$\lim_{\Delta\to 0} P_{fehér} = \frac{T_{fehér}}{T_{teljes}} = \frac{1}{2}$$

Függetlenül a ○ alakjától, vagy a körön belüli találati eloszlástól.

Valószínűség számolása (Feynman):
Kétségek kvantifikálása

Van Isten?

van

nincs

vagy van, vagy van nincs

Esni fog az eső?

Meteorológus:

80% valószínűséggel

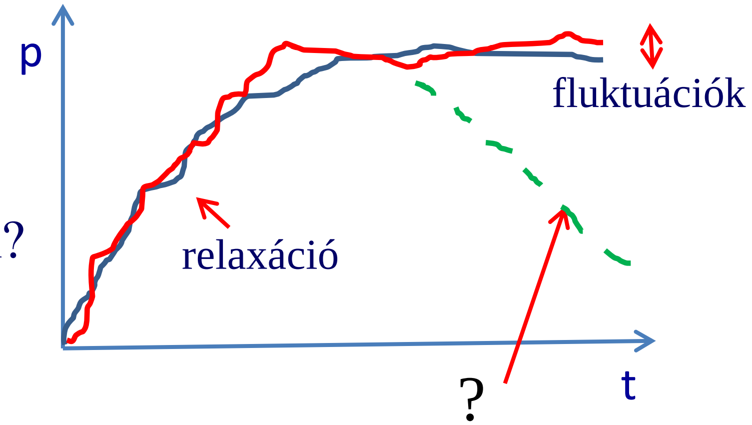
Valószínűség fizikában

(1) Ideális gáz sebességeloszlása (Maxwell, 1860)

$$P(v) \sim e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$$

Maxwell determinisztikusnak gondolta a mechanikát.
A 6N dimenziós állapottérben „minden” állapot egyensúlyi állapot.

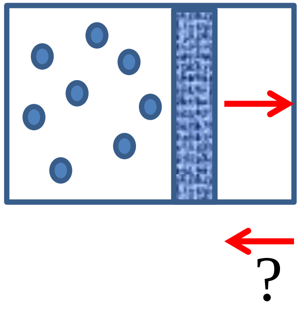
(2) Relaxáció és irreverzibilitás



Hogyan lehetséges determinisztikus,
időtükrözésre szimmetrikus rendszerben?

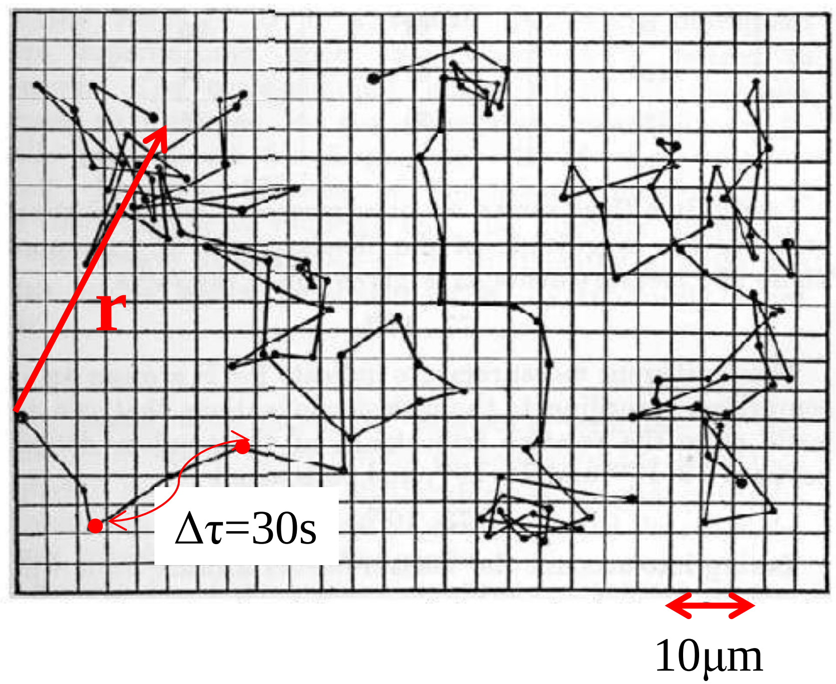
(3) Elektrodinamika determinisztikus.

(4) Kvantum mechanika



Determinisztikus és valószínűségi leírás kombinációja:
Az egyenlet determinisztikus, de valószínűségről szól.

Brown mozgás -- véletlenszerű mozgás jellemzése és leírása



Brown, 1827

Élnek-e a virágporszemek?
És a kőporszemek?

Einstein, 1905

Lényegesen új gondolat:
A dinamika véletlenszerű,
az elmozdulásoknak van egy
valószínűségi eloszlása.

Perrin kísérletei, 1908

$$\boxed{r^2 = 2Dt}$$

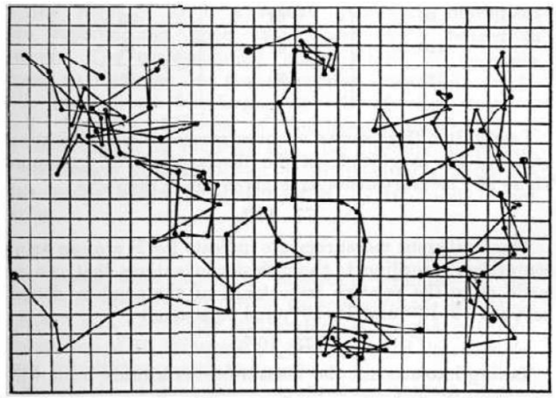
Avogadro szám meghatározható

A történethez:

i) Stochasztikus dinamikát először Rayleigh (1891) feltételez.

ii) Smoluchowski (1906) Einsteintől függetlenül leírta a Brown mozgást.

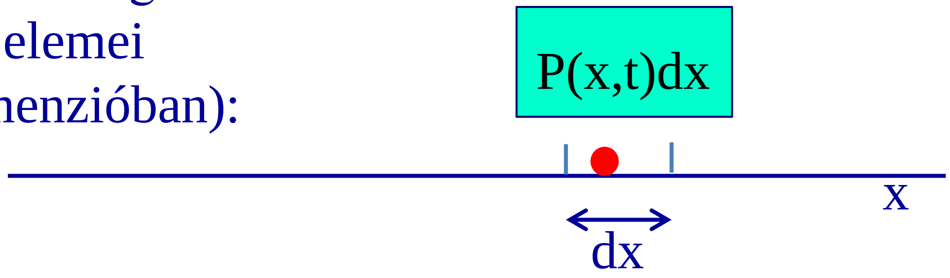
Brown mozgás -- Einstein magyarázata (1905)



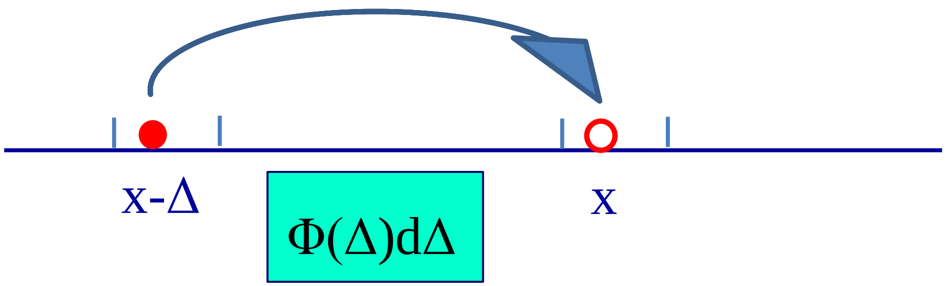
Feltételezések:

1. A virágporszemcsék egymástól függetlenül mozognak (elég egyet nézni).
2. Van egy τ intervallum, amin túl a részecske mozgása független az előző mozgásától (τ sokkal kisebb a megfigyelési időnél).
3. A mozgás leírható valószínűségi alapon.

Valószínűségi leírás elemei (1 dimenzióban):

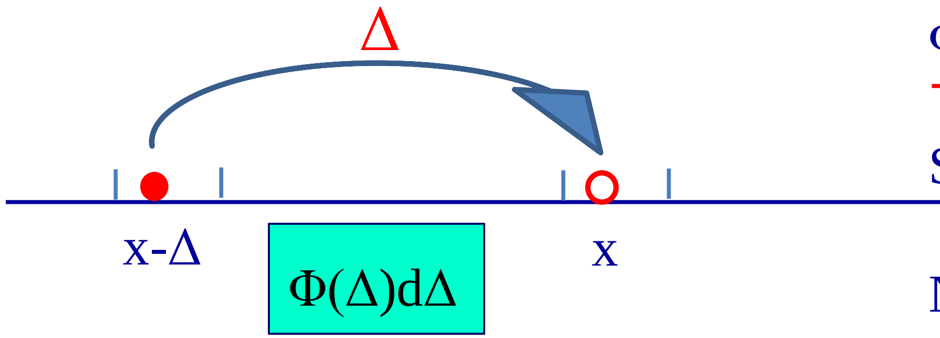


Annak a valószínűsége, hogy a megfigyelt részecske t időpontban x és x+dx között található.



Annak a valószínűsége, hogy a megfigyelt részecske τ idő alatt Δ és $\Delta+d\Delta$ közötti távolságot ugrik előre.

Brown mozgás -- egyenlet a megtalálási valószínűségre I

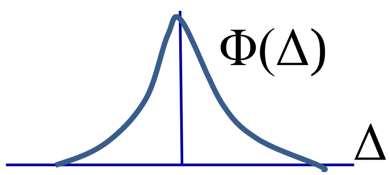


Φ(Δ) tulajdonságai

Szimmetria $\boxed{\Phi(-\Delta)=\Phi(\Delta)}$

Normalizáltság $\boxed{\int \Phi(\Delta)d\Delta=1}$

Nincsenek nagy ugrások



Egyenlet P(x,t)-re

Markov posztulátum (Einstein 2.)

P(x,t+τ) csak P(x,t)-től függ

Ugrási dinamikából következően:

$$\boxed{P(x,t+\tau)\cancel{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} P(x-\Delta,t)\cancel{dx}\,\Phi(\Delta)d\Delta}$$

Chapman-Kolmogorov egyenlet

A történethez: Einstein levezetésének minden lépéséből egy kutatási terület nőtt ki.

Brown mozgás -- egyenlet a megtalálási valószínűségre II

$$P(x,t+\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x-\Delta,t)\,\Phi(\Delta)\,d\Delta$$

Chapman-Kolmogorov egyenlet

(a valószínűségmegmaradást írja le)

Sorfejtések: τ kicsi (a megfigyelési időhöz képest)
Δ (a τ idő alatt megtett távolság kicsi)

$$P(x,t+\tau) = P(x,t) + \frac{\partial P}{\partial t}\tau + \ldots \qquad P(x-\Delta,t) = P(x,t) - \frac{\partial P}{\partial x}\Delta + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial^2 x}\Delta^2 + \ldots$$

Kramers-Moyal sorfejtés

$$\cancel{P(x,t)} + \underline{\frac{\partial P}{\partial t}\tau} = \cancel{P(x,t)} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\Delta)\,d\Delta}_{1} - \frac{\partial P}{\partial x} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Delta\,\Phi(\Delta)\,d\Delta}_{0} + \underline{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial^2 x}} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \Phi(\Delta)\,d\Delta$$

Fokker-Planck egyenlet

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t}\tau = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial^2 x}\int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \Phi(\Delta)\,d\Delta}$$

Brown mozgás -- egyenlet a megtalálási valószínűségre III

Einstein 1, 2, 3.

$$P(x,t+\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x-\Delta,t)\,\Phi(\Delta)\,d\Delta$$

Chapman-Kolmogorov egyenlet

Kramers-Moyal sorfejtés

Fokker-Planck egyenlet
(adott esetben a diffúziós egyenlet)

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 P}{\partial^2 x}$$

$$D = \frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau}$$

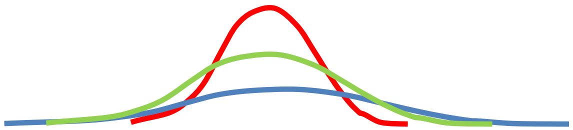
Diffúziós egyenlet megoldása

$$\overline{\Delta^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \Phi(\Delta)\,d\Delta$$

$P(x,t=0) = \delta(x)$ a részecske az origóból indul

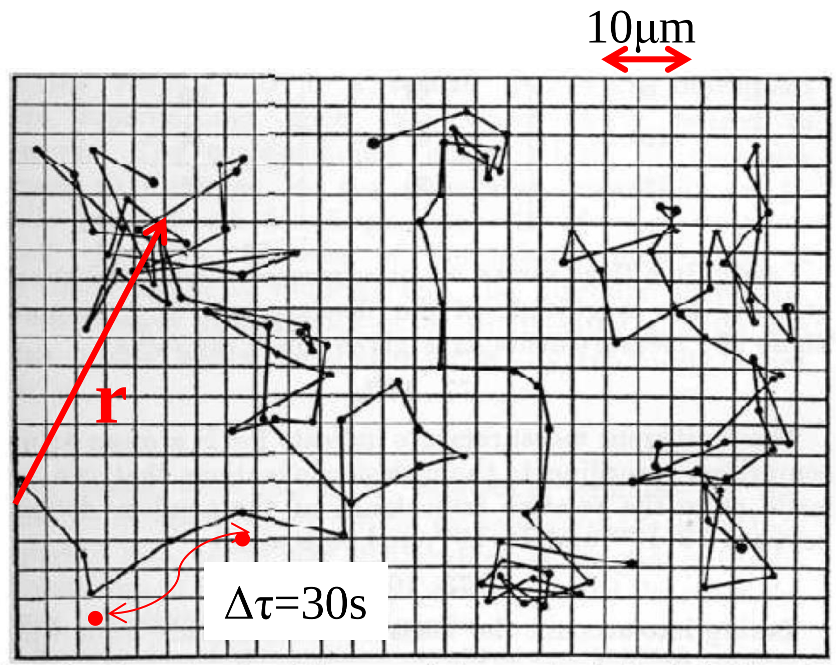
$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\,e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

$$\overline{x^2} = 2Dt$$



A diffúziós együtthatón keresztül az Avogadro szám meghatározható!

Brown mozgás -- leírás sztochasztikus differenciál egyenlettel



Einstein, 1905

A dinamika véletlenszerű, az elmozdulásoknak van egy valószínűségi eloszlása, *P(x,t)*.

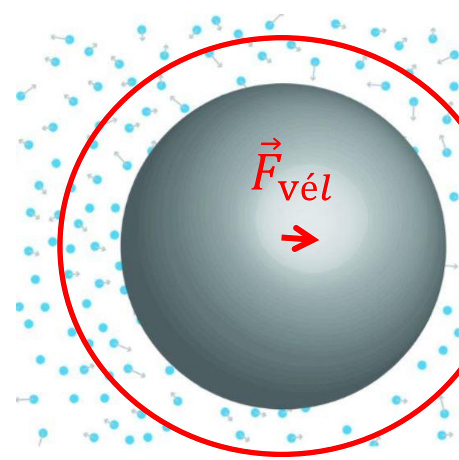
Langevin, 1908

Mozgásegyenlet, amelyben determinisztikus és véletlen (sztochasztikus) erő is van

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{det} + \vec{F}_{\text{vél}}$$

Perrin kísérletei, 1908

$$r^2 = 2\mathbf{D}t$$



Kísérlet: **D** makroszkópikusan mérhető

Elmélet: **D** mikroszkópikus mennyiségeken keresztül kifejezhető

Avogadro szám meghatározható

Brown mozgás – a mozgásegyenlet

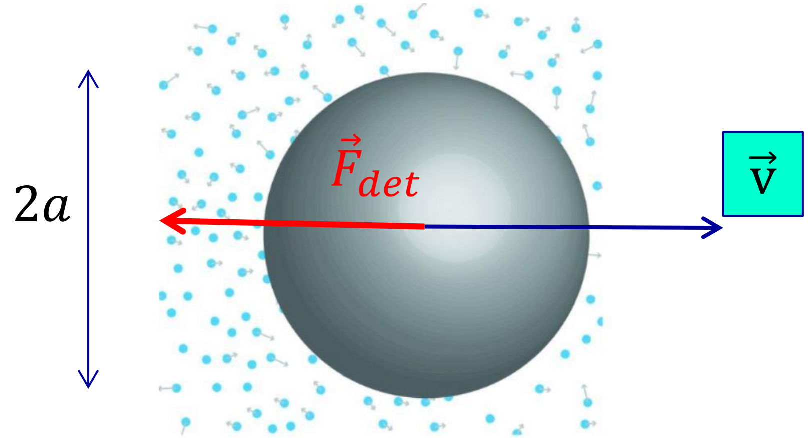
Langevin, 1908

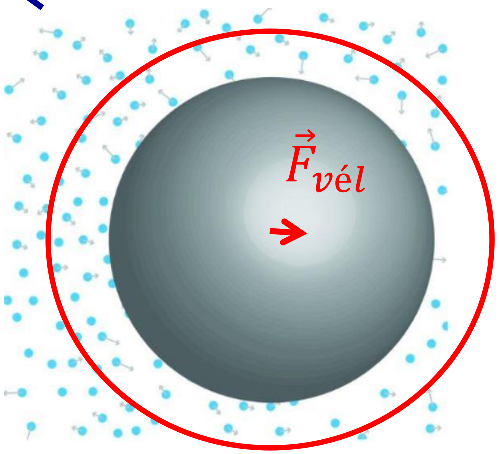
A determinisztikus és a véletlen szétválasztása

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{det} + \vec{F}_{vél}$$

Determinisztikus erő makroszkópikus szintről: Súrlódási erő

Véletlen mikroszkópikus szinten: Fluktuációk a gáz részecskéinek helyében és sebességében



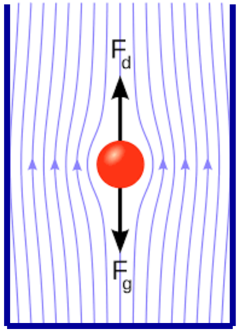


Hidrodinamikából: Stokes törvény:

$$\vec{F}_{det} = -6\pi\eta a\,\vec{v}$$

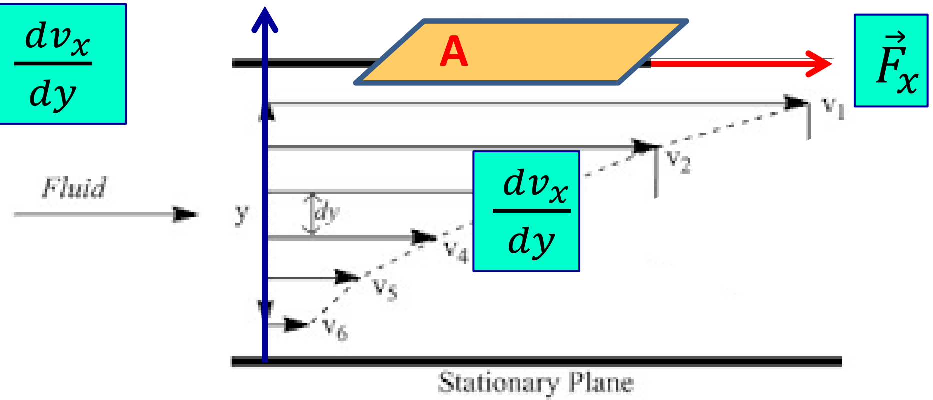
viszkozitás gömb sugara

Viszkozitás (η) mérése: Folyadékban süllyedő golyó végsebessége



A viszkozitásról + egy kis dimenzióanalízis

η definíciója: $\vec{F}_x = A\,\eta\,\frac{dv_x}{dy}$



η dimenziója:

$[\,\eta\,] = [\,F\,] \,/\, [\,\frac{dv_x}{dy}\,][\,A\,] =$

$(ML/T^2) \,/\, (1/T)(L^2) = M/LT =$ kg/ms

Vízre: $\eta = 10^{-3}$kg/ms

Stokes törvény levezetése dimenzióanalízisből:

$$F = f(v, a, \eta) \sim \eta\, g(v, a) \sim \eta\, v\, h(a) \;\sim \eta\, v\, a$$

$\downarrow$ ML/T^2

$\downarrow$ M/LT

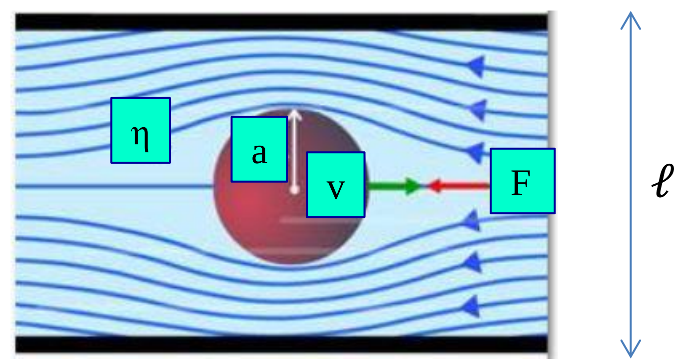
másholnincs M

M/T^2

máshonnan nem jöhet még 1/T

ML/T^2

más nem marad



$$\vec{F}_{det} = -6\pi\eta a\,\vec{v}$$

$f(v, a, \eta, \ell) \sim \eta v a\, Q(a/\ell)$

Brown mozgás – a mozgásegyenlet (d=1 dimenzióban)

$$\boxed{m\ddot{x} = -6\pi\eta a\dot{x} + F_{\text{vél}}}$$

Mit tudunk a véletlen erőről? $\boxed{\langle F_{\text{vél}}\rangle = 0}$

$x\,\cdot$

$$x\ddot{x} = (\dot{\overline{x\dot{x}}}) - \dot{x}^2 = \frac{1}{2}\ddot{\overline{x^2}} - \dot{x}^2$$

$$x\dot{x} = \frac{1}{2}\dot{\overline{x^2}}$$

Mi az amit szeretnénk levezetni?
Egyenletet $\boxed{\langle x^2\rangle}$-re.

$$\frac{1}{2}m\ddot{\overline{x^2}} - m\dot{x}^2 = -3\pi\eta a\dot{\overline{x^2}} + xF_{\text{vél}}$$

Átlagolás: T hőmérsékleten egyensúlyban van a rendszer

$$\frac{1}{2}m\langle\ddot{\overline{x^2}}\rangle - m\langle\dot{x}^2\rangle = -3\pi\eta a\langle\dot{\overline{x^2}}\rangle + \langle xF_{\text{vél}}\rangle$$

Ekvipartíció: $\frac{1}{2}m\langle\dot{x}^2\rangle = \frac{1}{2}k_BT$

$\langle xF_{\text{vél}}\rangle = 0$

Átlagos munka

$\langle xF_{\text{vél}}\rangle > 0\ ?\quad T \to \infty$

$\langle xF_{\text{vél}}\rangle < 0\ ?\quad T \to 0$

$$\frac{1}{2}m\frac{d^2}{dt^2}\langle x^2\rangle - k_BT = -3\pi\eta a\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle$$

$$\boxed{\frac{d^2}{dt^2}\langle x^2\rangle + \frac{6\pi\eta a}{m}\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle = \frac{2k_BT}{m}}$$

Brown mozgás – a mozgásegyenlet megoldása

$$\boxed{\frac{d^2}{dt^2} < x^2 > + \frac{6\pi\eta a}{m}\frac{d}{dt} < x^2 > = \frac{2k_B T}{m}}$$

$$y = \frac{d}{dt} < x^2 > \quad \rightarrow \quad \frac{dy}{dt} + \frac{6\pi\eta a}{m} y = \frac{2k_B T}{m} \quad \rightarrow \quad y = \frac{k_B T}{3\pi\eta a} + \underbrace{Ce^{-\frac{6\pi\eta a}{m}t}}$$

elhanyagolható t > 10^{-6}s-ra.

$$y = \frac{d}{dt} < x^2 > = \frac{k_B T}{3\pi\eta a}$$

$$\downarrow$$

$$< x^2 > = \frac{k_B T}{3\pi\eta a} t + \tilde{C}$$

$$\frac{6\pi\eta a}{m} = \frac{20\,\frac{10^{-3}kg}{ms}\,10^{-6}m}{10^3\,\frac{kg}{m^3}\,10^{-18}m^3} = 2\;10^7\,\frac{1}{s}$$

nagy t-re

$$\boxed{< x^2 > = 2\frac{k_B T}{6\pi\eta a} t = 2Dt}$$

Avogadro szám

$$\boxed{N_A = \frac{RT}{6\pi\eta a D}}$$

$N_A k_B = R$

gas constant

$$\boxed{D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a} = \frac{N_A k_B T}{6\pi\eta a}\frac{1}{N_A} = \frac{RT}{6\pi\eta a}\frac{1}{N_A}}$$

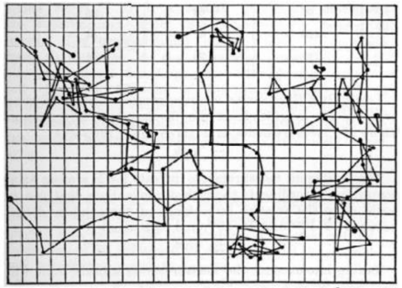
A történethez: Avogadro számot Perrin vezette be1908-ban. Avogadro sohasem becsülte meg ezt a számot.

Avogadro szám becslései

Johann Magnenus, német szerzetes (1646) --- Demokritosból kiindulva, feltételezte, hogy egyfajta atomból épül fel minden. Borsószemnyi tömjént égetett el és szagolt.

*'In this piece of incense, which itself was not larger than a pea, there were at least 7.7763 x 10*17 elementary atoms. From this one can see how small an atom is and one can guess how large the number of atoms might be in the whole Universe'.*

Robert A. Millikan, amerikai fizikus (1909) --- megmérte az elektron töltését (olajcsepp kísérlet), s mivel egy mólnyi elektron töltése ismert volt, csak egy osztás kellett N_A meghatározásához (2% accuracy).



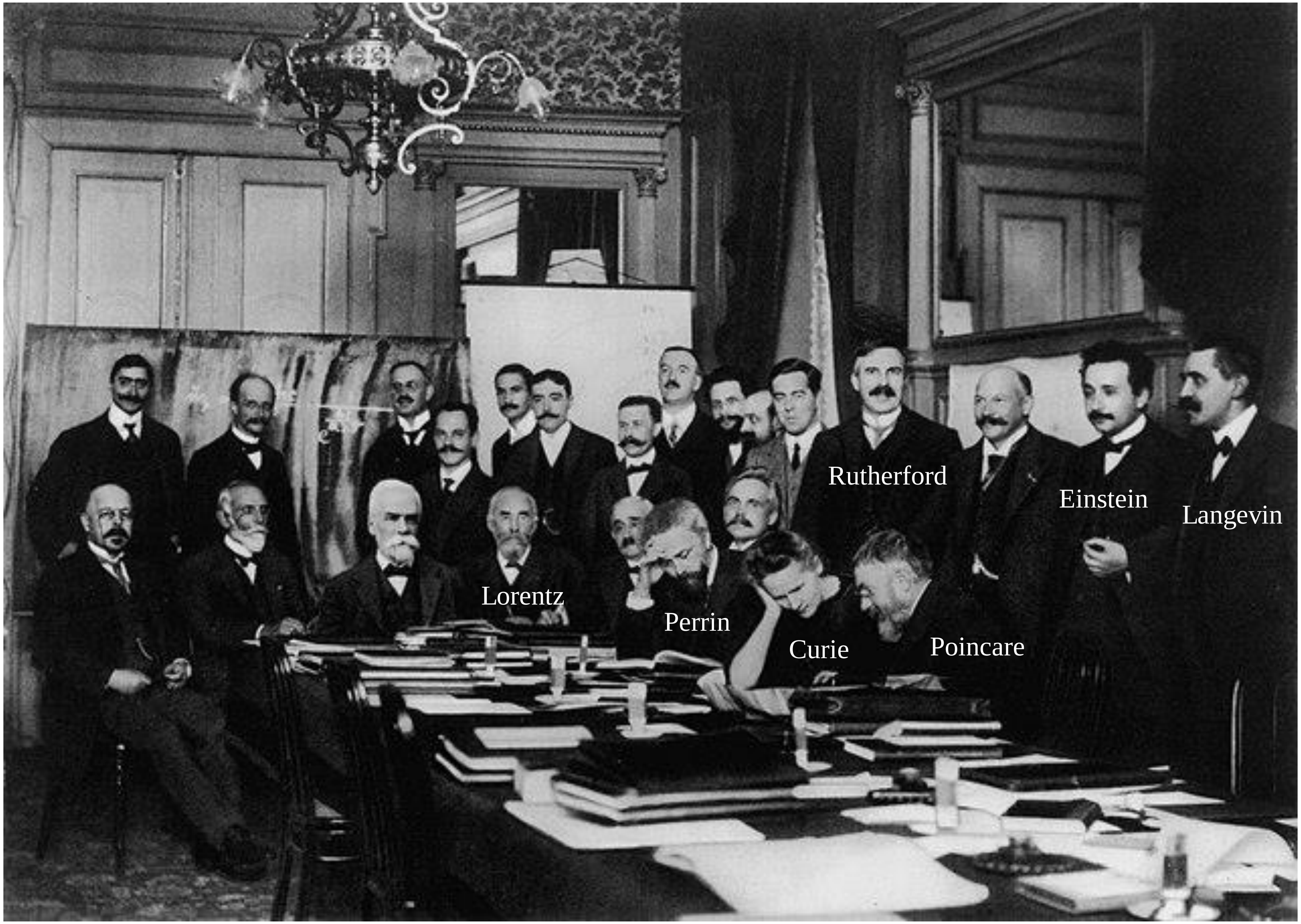
Jean Baptist Perrin, francia fizikus (1909)
Brown mozgás diffúziós állandójának méréséből (0.01% accuracy).

Others
Oil on water, X ray measurements, …

HF2: $D = \frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau}$ $\overline{x^2} = 2Dt$

Hibaszámítás!!!

Solvey conference - 1911

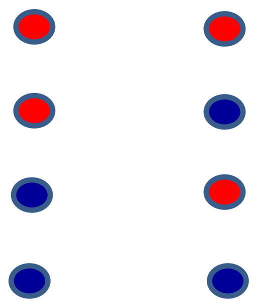


Hogyan tovább?

Einstein

Valószínűségi folyamatok
diszkrét állapottérben,
eloszlások időfejlődése

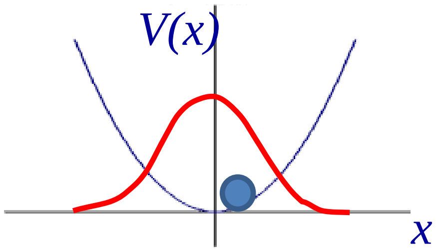
M(arci) J(ulcsi)



$w(1\rightarrow 2)$	1	$P(1,t)$
	2	$P(2,t)$
	3	$P(3,t)$
	4	$P(4,t)$

Langevin

Valószínűségi folyamatok
leírása a valószínűségi változóra
vonatkozó egyenletekkel



$$m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx} + F_{\text{vél}} \quad ?$$

$$P(x, t \rightarrow \infty)$$

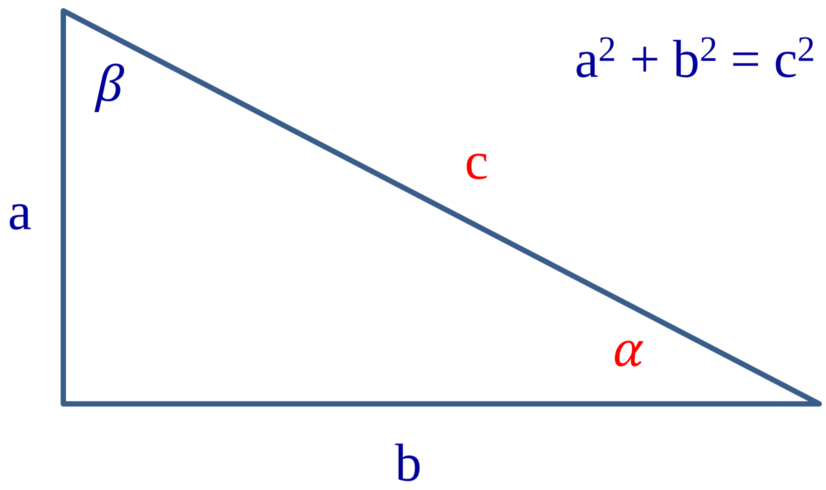
$$P_{eq}(x) \sim e^{-V(x)/k_B T}$$

$$P(1,t+dt) = P(1,t) - w(1\rightarrow 2)dt\, P(1,t) + w(2\rightarrow 1)dt\, P(2,t) + \ldots$$

$$\partial_t P(1,t) = - w(1\rightarrow 2)P(1,t) + w(2\rightarrow 1)P(2,t) + \ldots$$

$$\vdots$$

Jutalomjáték – Pitagorasz tétele dimenzióanalízissel



$a^2 + b^2 = c^2$

Két paraméter, pl. c és α meghatározzák a derékszögű háromszög tulajdonságait

$T(c, \alpha) = c^2 f(\alpha)$

L dimenziótlan

$T = T_1 + T_2$

$T_1(a, \alpha) = a^2 f(\alpha)$

$T_2(b, \alpha) = b^2 f(\alpha)$

$T = \underline{c^2} f(\alpha) = T_1 + T_2 = \underline{a^2} f(\alpha) + \underline{b^2} f(\alpha)$