

Véletlen folyamatok házi feladatai. 4. hét. Beadási határidő: Márc. 17., 12:20.

(1) (60 pont)

Határozzuk meg Monte Carlo szimuláció segítségével az origóhoz gumiszállal kötött, T hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban levő részecske egyensúlyi tulajdonságait. A részecske egydimenziós rácson ugrál, energiája az állapotát meghatározó koordinátán keresztül (a hosszúságú ugrásokat feltételezünk; $x = -\infty, \dots, -a, 0, a, \dots, na, \dots, \infty$) a következőképpen fejezhető ki

$$U(n) = \frac{1}{2}k(an)^2, \quad (1)$$

ahol k a gumiszál rugóállandója.

Válasszunk ugrási rátának olyan alakot, ami kielégíti a részletes egyensúly elvét. Ilyen lesz például a következő kifejezés:

$$w(n \rightarrow n \pm 1) = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E < 0 \\ \exp(-\beta\Delta E) & \text{if } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (2)$$

ahol

$$\Delta E = \frac{1}{2}ka^2[(n \pm 1)^2 - n^2]. \quad (3)$$

Indítsuk a részecskét az origóból (az egyensúlyi átlagok nem függhetnek a kezdeti feltételtől, tehát eredményeink helyességét ellenőrizhetjük azzal, hogy az origótól távolabb indítjuk a részecskét, s megnézzük ugyanazt kapjuk-e).

A szimulálás a következő lépésekből áll.

1. Véletlenszerűen kiválasztunk egy irányt.
2. Megnézzük, hogy ha az adott irányba lép a részecske, akkor mennyit változik a rendszer energiája, azaz kiszámítjuk ΔE -t.
3. Ha $\Delta E < 0$, akkor megteszük a lépést.
4. Ha $\Delta E > 0$, akkor húzunk egy véletlen számot P -t a $[0, 1]$ intervallumból, s ha $P < \exp(-\beta\Delta)$, akkor megteszük a lépést, egyébként pedig megyünk az (1)-es ponthoz.

Az (1)-(4) pontokat sokszor, N -szer elvégezve azt mondjuk, hogy $t = N\tau_0$ idő telt el. Egy rendszernek van általában egy relaxációs ideje, τ , s ha $t > \tau$, akkor a rendszer elérkezik az egyensúlyba, s attól kezdve a különböző mennyiségek, mint például a részecske koordinátájának átlagos értéke

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N an_k, \quad (4)$$

vagy a koordináta fluktuációja, $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, az egyensúlyi értéke körül fluktuál. Az egyensúlyi átlagokat tehát kiszámíthatjuk mint időátlagokat. Ez azt jelenti, hogy t_1 időnként kiszámítjuk (megmérjük) az x és az x^2 értékét, majd elég sok ilyen mérésből átlagokat számolunk, s ezek megadják a T hőmérsékleti termodinamikai átlagokat, $\langle x \rangle$ -t és $\langle x^2 \rangle$ -t.

Határozzuk meg az $\langle x \rangle = a\langle n \rangle$, $\langle x^2 \rangle = a^2\langle n^2 \rangle$ átlagokat $\beta ka^2 = 0.15, 0.3, 0.6, 1.2$ értékeknek megfelelő hőmérsékleteken! Értelmezzük az eredményt! Határozzuk meg, hogy egyensúlyban hogy néz ki a $P^{(e)}(n)$ eloszlásfüggvény!