

Véletlen folyamatok házi feladatai. 4. hét. Beadási határidő: Márc. 11., 10:00.

(1) (20 pont)

Az atomreaktorokban keletkező, erősen sugárzó hulladékok tárolására a geológiailag stabil, gránit alapú ősmasszívumokat tekintik alkalmasak (Finnországban most épül egy barlang-rendszer, amelybe 100 éven keresztül tervezik felhalmozni a hulladékot, ami után az egészet betemetik). Tegyük fel, hogy a terület geológiailag valóban stabil, s a radioaktív magok csak a grániton keresztül történő diffúzióval tudnak a felszínre jutni. Keressük ki a gránit diffúziós együtthatóját nagyobb rendszámú atomokra (pl. az U^{233} izotópra) és számítsuk ki, hogy milyen mélyre kell eltemetni a hulladékot ahhoz, hogy 100000 év elteltével még ne észleljünk radioaktivitást a barlang felett a felszínen!

(2) (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

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

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 ellenőrizzük eredményeink helyességét azzal, hogy az origótól távolabb indítjuk a részecskét, s megnézzük ugyanazt kapjuk-e).

A számolás 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 megtesszük a lépést.
4. Ha $\Delta E > 0$, akkor húzunk egy véletlen számot P -t a $[0, 1]$ intervallumból, s ha $P < \exp(-\beta \Delta E)$, akkor megtesszük 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 a relaxáció utáni időkre ($t > \tau$) vett időátlagokat. Ez azt jelenti, hogy meg kell becsülnünk τ -t (pl. távolból indítva mikor ér a részecse $x \approx 0$ környékére), majd t_1 időnként kiszámítjuk (megmérjük) az x és az x^2 értékét, s 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 az alábbiakban megadott egyéni βka^2 értékeknek megfelelő hőmérsékleteken! Értelmezzük az eredményt! Határozzuk meg, hogy egyensúlyban hogy néz ki a $P^{(e)}(n)$ eloszlásfüggvény! Ismerjük egzaktul a $P^{(e)}(n)$ eloszlásfüggvényt?

$\beta ka^2 = 0.15, 0.25, 0.50, 0.98$	Albert Andrea
0.12, 0.24, 0.48, 0.90	Bakó Bence
0.13, 0.26, 0.52, 1.00	Borkovits Bendegúz
0.10, 0.21, 0.50, 0.80	Bódy Lőrinc
0.18, 0.32, 0.64, 1.05	Dajka Bence
0.15, 0.36, 0.75, 1.30	Fejes Milán
0.06, 0.12, 0.24, 0.50	Fodor Dániel
0.06, 0.24, 0.52, 1.00	Godó Dániel
0.07, 0.14, 0.30, 0.60	Klement Balázs
0.10, 0.20, 0.40, 1.10	Méhes Máté
0.22, 0.44, 0.90, 1.20	Míg András
0.07, 0.16, 0.36, 0.90	Misur Patrícia
0.23, 0.45, 1.00, 1.50	Papp János
0.14, 0.30, 0.62, 1.30	Papp Krisztína
0.15, 0.35, 0.75, 1.40	Sándor Szende
0.07, 0.15, 0.35, 0.80	Szénási Attila
0.17, 0.36, 0.72, 1.40	Márkusz István
0.04, 0.16, 0.65, 1.20	Vass Máté