

Véletlen folyamatok házi feladatai. 4. hét. Beadási határidő: Márc. 12., 8PM.

(1) (30 pont)

Kétségbeesett telefon érkezik a rendőrségre. A közelben levő erdőség közepén egy család táborozott. Este 9-kor lefeküdtek, s reggel hétkor arra ébredtek, hogy 3 éves gyermekük eltűnt. Feltéve, hogy nem egy farkas, vagy egy emberrabló az eltűnés oka, határozzuk meg, hogy a rendőrség prioritása mekkora terület gyors átkutatása kell legyen!

(2) (70 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 szimuláció és 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?

$\beta ka^2 = 0.10, 0.21, 0.45, 0.80$	Barna Zsombor
0.16, 0.34, 0.71, 1.05	Juhász János
0.06, 0.13, 0.23, 0.50	Lukács Krisztián
0.04, 0.09, 0.20, 0.42	Nemeskéri Dániel
0.09, 0.20, 0.38, 0.70	Szilágyi Máté
0.11, 0.21, 0.46, 0.89	Villám Barna