Véletlen folyamatok házi feladatai. 10. hét. Beadási határidő: máj. 5., 12:20.

(1) 50pt

Végezzünk szimulációkat az origóhoz gumiszállal kötött, T hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban levő, túlcsillapított mozgást végző részecskére. A rendszer energiáját a részecske állapotát meghatározó koordinátán, x-en, keresztül a következőképpen fejezhetjük ki

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 \,, \tag{1}$$

ahol k a gumiszál rugóállandója, s a mozgást leíró stochasztikus differenciálegyenlet az alábbi alakú

$$\dot{x}(t) = -\mu\frac{dU}{dx} + \eta(t) = -\mu kx + \eta(t). \tag{2}$$

Itt μ egy kinetikus együttható, $\eta(t)$ pedig a termális fluktuációkból adódó véletlen erő.

A fenti egyenlet számítógépes megoldásához időben diszkretizálnunk kell

$$x(t+\varepsilon) = x(t) - \mu kx(t)\varepsilon + \eta_\varepsilon(t) \quad , \tag{3}$$

ahol x növekményének determinisztikus része $-\mu kx(t)\varepsilon$ adott, a stochasztikus részt, $\eta_\varepsilon(t)$-t, pedig minden egyes időpillanatban függetlenül választjuk (az előadáson diszkutáltak szerint) egy Gauss eloszlásból

$$P_G(\eta_\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D\varepsilon}}e^{-\eta_\varepsilon^2(t)/4D\varepsilon} \quad . \tag{4}$$

Fontos megjegyezni, hogy a fenti eloszlás függ a diszkretizációtól (ε), s a zaj amplitúdója D és a kinetikus együttható μ nem függetlenek, hányadosuk a hőmérséklettel arányos

$$\frac{D}{\mu} = k_B T \,. \tag{5}$$

Feladatok:

(1) Iteráljuk a (3) egyenletet a paraméterek, μ, k, D valamilyen megválasztásával, s készítsünk hisztogramot a mért x értékekből. Mutassuk meg, hogy elég kis ε-ra az eredmény nem függ az ε értékétől, s a kapott eloszlás az egyensúlyi eloszlás

$$P^{(e)}(x) = \frac{1}{Z}e^{-kx^2/2k_BT} \quad . \tag{6}$$

(2) Mérjük meg a stacionárius $< x^2 >$ átlagot, s vizsgáljuk, hogy az ekvipartíció tételével összhangban van-e az eredmény különböző ε értékeknél!