

Véletlen folyamatok házi feladatai. 10. hét. Beadási határidő: ápr. 27., 9PM

(1) 100pt

Végezzünk szimulációkat egy T hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban levő, az x -tengely mentén $U(x)$ potenciálban túlszabályozott mozgást végző részecskére. A részecske energiáját az x koordinátán keresztül a következőképpen fejezhetjük ki

$$U(x) = \frac{1}{2}ax^2 + \frac{1}{4}bx^4 + qx, \quad (1)$$

ahol a tekinthető a részecskét az origóhoz kötő rugó rugóállandójának, a b paraméter a rugó nemlinearitását jellemzi, q pedig a $-x$ irányba mutató konstans erő. A mozgást leíró stochasztikus differenciálegyenlet az alábbi alakú

$$\dot{x}(t) = -\mu \frac{dU}{dx} + \eta(t) = -\mu (ax + bx^3 + q) + \eta(t). \quad (2)$$

Itt μ egy kinetikus együttható [példaként lásd a 10-11. heti előadást, vagy az előadásjegyzet (9) egyenletét], $\eta(t)$ pedig a termális fluktuációkból adódó véletlen erő.

A fenti egyenlet számítógépes megoldásához diszkretizálnunk kell időben

$$x(t + \varepsilon) = x(t) - \mu [ax(t) + bx^3(t) + q] \varepsilon + \eta_\varepsilon(t) \quad , \quad (3)$$

ahol x növekményének determinisztikus része $-\mu [ax(t) + bx^3(t) + q] \varepsilon$ adott, a stochasztikus részt, $\eta_\varepsilon(t)$ -t, pedig minden egyes időpillanatban függetlenül választjuk (az előadásjegyzetben leírtak szerint) egy Gauss eloszlásból

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

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

$$\frac{D}{\mu} = k_B T. \quad (5)$$

Az alábbiakban a rendszer viselkedését a következő két hőmérsékleten kell vizsgálni: ($k_B T_1 = 1.5$, $D = 1.5$, $\mu = 1$) és ($k_B T_2 = 0.7$, $D = 1.4$, $\mu = 2$).

Feladatok:

(i) Iteráljuk a (3) egyenletet az a, b, q paraméterek alább megadott értékeinél. 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

$$P^{(e)}(x) = \frac{1}{Z} e^{-U(x)/k_B T} \quad . \quad (6)$$

(ii) Mérjük meg a stacionárius $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ és $\langle x^4 \rangle$ átlagokat, s vizsgáljuk meg, hogy összhangban van-e az $\langle x^2 \rangle$ -re kapott eredmény az ekvipartíció tételével!

Az (a, b, q) paraméterek egyénekre szabott értékei:

(1,0,-2) – Csontos András, (-1,1,2) – Igari Barnabás, (-2, 1, 1) – Molnár Barnabás,
(1,1,-2) – Sípos Balázs, (-3,1,0) – Szabó-Ádám Krisztián,