Véletlen folyamatok házi feladatai. **11-12. hét.** **Beadási határidő: máj. 11. 9PM**

(1) 200pt

Példa arra, hogy az előadáson tárgyalt és a HF10-ben használt termális zaj gauss alakja nem egyértelmű, megfelelően választott más funkcionális formák is használhatók.

A zajtól eltekintve a feladat ugyanaz, mint a HF10-ben.

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

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

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

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

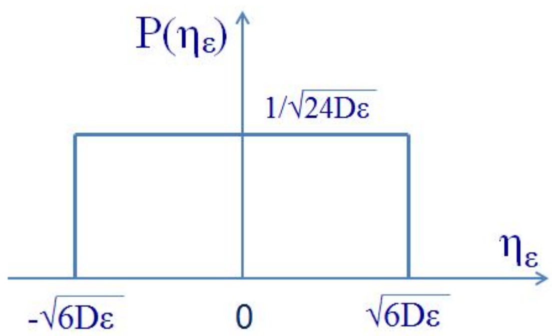
Itt μ egy kinetikus együttható [példaként lásd a 10-11. heti előadást, vagy az előadásjegyzet (9) egyenletét], $\eta(t)$ pedig a termális fluktuációkból adódó véletlen erő.

A fenti egyenlet számítógépes megoldásához diszkretizálnunk kell időben

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

ahol x növekményének determinisztikus része $-\mu\left[ax(t) + bx^3(t) + q\right]\varepsilon$ adott, a stochasztikus részt, $\eta_\varepsilon(t)$-t, pedig minden egyes időpillanatban függetlenül választjuk (és itt a zaj egy másik lehetséges reprezentációja) a következő eloszlásból

$$P(\eta_\varepsilon) = \begin{cases} 1/\sqrt{24D\varepsilon} & \text{for} \quad |\eta_\varepsilon| \le \sqrt{6D\varepsilon} \\ 0 & \text{for} \quad \sqrt{6D\varepsilon} < |\eta_\varepsilon| \end{cases} . \tag{4}$$



Könnyen látható, hogy az eloszlás normalizált, s η_ε átlaga nulla $\langle\eta_\varepsilon\rangle = 0$. Rövid számolás (remélem megcsinálják) azt is megmutatja, hogy $\langle\eta_\varepsilon^2\rangle = 2D\varepsilon$. Ezen kívül az is megmutatható (ez már hosszabb számolás), hogy a fenti eloszlásból következően nagy időkre, a részecske termális egyensúlyba jut, azaz a helyeloszlása a Boltzmann eloszlás, $P^{(e)}(x) \sim \exp\left[-U(x)/k_bT\right]$. Persze ehhez az is kell, hogy a zaj amplitúdója D és a kinetikus együttható μ nem függetlenek egymástól, hányadosuk a gaussi zajhoz hasonlóan a hőmérséklettel arányos

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

Az alábbiakban a rendszer viselkedését a következő két hőmérsékleten kell vizsgálni: ($k_BT_1 = 1.5$, $D = 1.5, \mu = 1$) és ($k_BT_2 = 0.7$, $D = 1.4$, $\mu = 2$).

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

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

(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 szokásosan megfogalmazott tételével, illetve annak általánosításával:

$$\langle x \frac{\partial U}{\partial x} \rangle = k_B T \quad . \tag{7}$$

(iii) Tegyük fel, hogy egy felkészületlen diák a zajt ε-tól függetlennek veszi

$$P(\eta) = \begin{cases} 1/\sqrt{24D} & \text{for} \quad |\eta| \le \sqrt{6D} \\ 0 & \text{for} \quad \sqrt{6D} < |\eta| \end{cases} \quad . \tag{8}$$

Szimuláljuk a rendszert különböző ε-okra, s nézzük meg, hogy a kis ε limeszben látható-e egyensúlyhoz tartás valamilyen $k_B T$ hőmérsékleten (például a $D/\mu = k_B T$ hőmérsékleten).

(iv) Egy másik felkészületlen diák a zaj ε-függését nézi el

$$P(\eta) = \begin{cases} 1/(\sqrt{24D}\,\varepsilon) & \text{for} \quad |\eta| \le \sqrt{6D}\,\varepsilon \\ 0 & \text{for} \quad \sqrt{6D}\,\varepsilon < |\eta| \end{cases} \quad . \tag{9}$$

Szimuláljuk a rendszert különböző ε-okra, s nézzük meg, hogy a kis ε limeszben látható-e egyensúlyhoz tartás valamilyen $k_B T$ hőmérsékleten (például a $D/\mu = k_B T$ hőmérsékleten).

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,