Véletlen fizikai folyamatok

4. beadandó

Márton Tamás

PJF19C
martontamas@caesar.elte.hu

1. feladat

Feladat leírás.

Kétségbeesett telefon érkezik a rendőrségre. A közelben levő erdő közepén egy család táborozott. Este 10 órakor lefeküdtek, s reggel 6-kor arra ébredtek, hogy 3 éves gyerekük eltűnt. Feltéve, hogy nem vadállat, vagy emberrabló az eltűnés oka, határozzuk meg, hogy a rendőrség mekkora terület gyors átkutatására küldjön embereket!

Feladat megoldása.

Egy átlag ember sétálási sebessége $3-5\ \ km/h$, de figyelembe kell vennünk, hogy a gyermek az erdős környezetben az átlag alatt fog haladni ezért a gyermek gyaloglási sebességét én $2\ \ km/h$-nak veszem. Este 10 és reggel 6 óra között 8 óra telt el. Ennyi idő alatt a gyermek, ha radiális irányban halad és feltételezem azt, hogy nem állt meg pihenni akkor a sugár nagysága:

$$s = v \cdot t = r = 2\frac{km}{h} \cdot 8h = 16km \tag{1.1}$$

utat tudott megtenni, tehát a legrosszabb esetben egy 16 km sugarú kör alakú területet kell átkutatni.
A kör területe:

$$T = r^2 \cdot \pi = 16^2 \cdot km^2 \cdot \pi = 804.25km^2 \tag{1.2}$$

Ez Esztergom területének 8 szorosa, ezért meg kell próbálnunk optimalizálni a keresést, úgy hogy figyelembe vesszük, hogy egy kisgyermekről van szó:

- A kisgyermek az első pár órában nagy valószínűséggel nem fog megállni pihenni, de egy idő után biztos elfárad, megijed, megéhezik. Ezért nagy szinte biztos, hogy visszafordul (legalább is Ő azt hiszi, hogy a kiindulási pont felé indul majd vissza). Ezt a pontot én 2 órára becsülöm, hiszen este 10 kor indul el a gyermek és az erdőben előre haladva ekkor már biztosan korom sötét van. Ez kb $4 \pm 1k/m$ becsülöm. Így a kisgyermek $4 \pm 1km$ távolságban bolyong.
- Mikor felkeltek a szülők nyilván azonnal elkezdték keresni, kiabálni és kutatni. A hang intenzitása $I\ 1/r^2$ változik, valamint a fák miatt az érték jobban csökken, valamint nehezebben en is látni miattuk a sötétben. De azt is hozzá kell vennünk, hogy feltehetően nincsen más zaj, tehát a szülők hangja zavartalanul terjedhet a térben. Ezért úgy becsülöm, hogy ha egy $2km$-es körön belül lenne a gyermek akkor meghallaná a hangod és visszatalálna.

Tehát a legnagyobb terület, amit át kell vizsgálni, ha hatékonyak szeretnénk lenni:

$$T = 5^2 km \cdot \pi - 2^2 km \cdot \pi = 65.973 km^2. \tag{1.3}$$

Ezt a területet már jóval könnyebben át lehet kutatni, mint az eredet, még le nem csökkentett erdőrészt.

2. feladat

Feladat leírás.

Határozzuk meg Monte Carlo-szimulácó 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; $x = -\infty, ..., -a, 0, a, ..., na, ...\infty$) a következőképpen fejezhető ki:

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}k(an)^2 \tag{2.1}$$

ahol k a gumiszál rugóállandója. Válasszunk ugrási rátának olyan alakot, ami kielégíti a részletes egyensúly elvét. Ilyen lesz például a következő kifejezés:

$$w(n \to n \pm 1) = \begin{cases} 1 & ha \;\; \Delta E < 0 \\ exp(-\beta \Delta E), & ha \;\; \Delta E > 0 \end{cases} \tag{2.2}$$

$$\Delta E = \frac{1}{2}ka^2[(n \pm 1)^2 - n^2]. \tag{2.3}$$

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, és 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 , és ha $t > \tau$, akkor a rendszer elérkezik az egyensúlyba, s attól kezdve a különböző mennyiségek, mint például a részecske koordinátájának átlagos értéke

$$\langle x\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} a n_k \tag{2.4}$$

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 $\tau - t$ (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, és 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 $\beta k a^2$ 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?
A számoláshoz használt $\beta k a^2$ értékek a következők:

$$\beta k a^2 = [0.15, 0.35, 0.75, 1.50] \tag{2.5}$$

Feladat megoldása.

A feladat megoldásához az általam legtöbbet használt, gyorsan írható script programnyelvet választottam a Python-t.
Első lépésben importáltam a feladat megoldásához szükséges csomagokat, valamint egy olyan tömböt, ami tartalmazza a személyes βka^2 paramétereket.

```
%pylab inline
import random

bka2 = [0.15, 0.35, 0.75, 1.50]
```

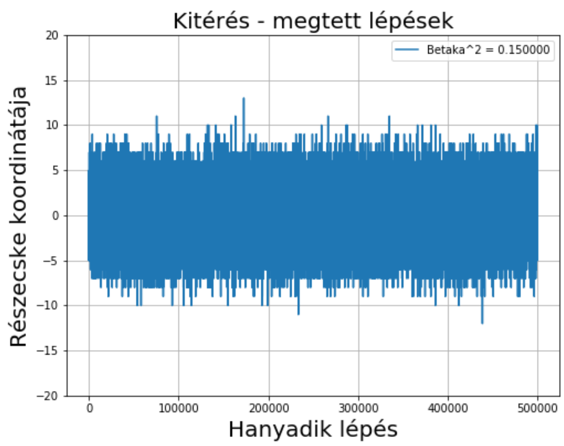
Mivel ΔE kiszámítása is feladat, így definiáltam egy függvényt a kiszámítására, figyelembe véve azt, hogy a két energia különbsége nem fog függeni a $k \cdot a^2$ konstansoktól.

```
def DeltaE(n_1,n_0):
        return (0.5 * ((n_1**2) - (n_0**2)))
```

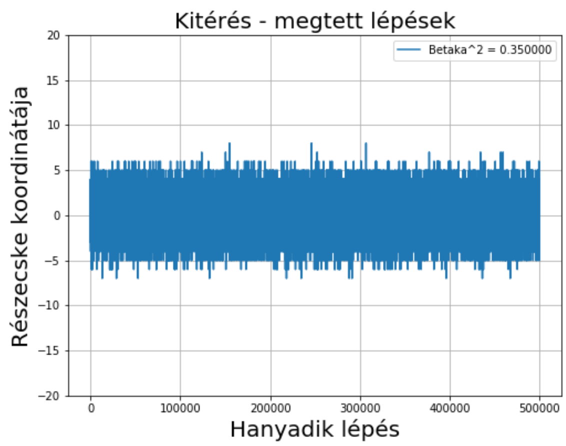
Következő lépésben egy léptetés függvényt definiáltam, melynek két paramétert kell megadni, (n) a rácspont ahol éppen tartózkodunk valamint, hogy a személyes βka^2 paraméterek közül melyiket használom:

```
def Leptetes(n,index):
        pm1 = (random.randint(0,1) * 2) - 1
        p_n= n + pm1
        if DeltaE(p_n, n) < 0:
                n = p_n
        else:
                r_n = random.random()
                if r < exp(-bka2[index] * DeltaE(p_n,n)):
                        n = p_n
                else:
                        n = n
        return n
```

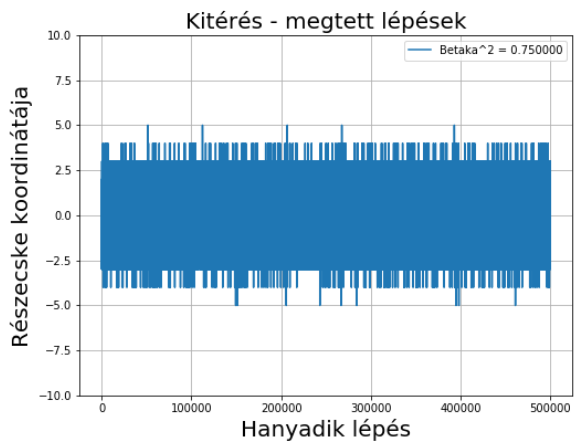
Ami elvégzi a fent leírt lépéseket 4.
Ennek segítségével lefuttattam egy 500000 iterációból álló for ciklust a megadott személyes paraméterekkel először úgy, hogy az origóból indítottam el a részecskét. Jól látható, hogy az origó körül fluktuál (2..1), tehát ez az egyensúlyi pontja.



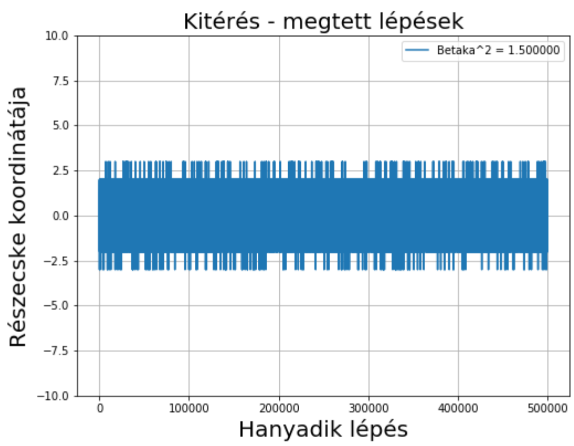
(a) $\beta k a^2 = 0.15$



(b) $\beta k a^2 = 0.35$



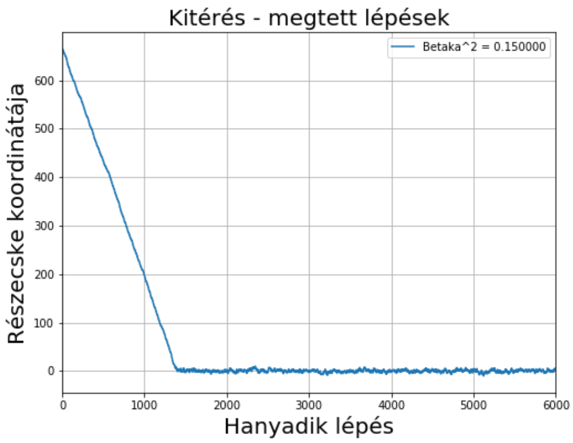
(c) $\beta k a^2 = 0.75$



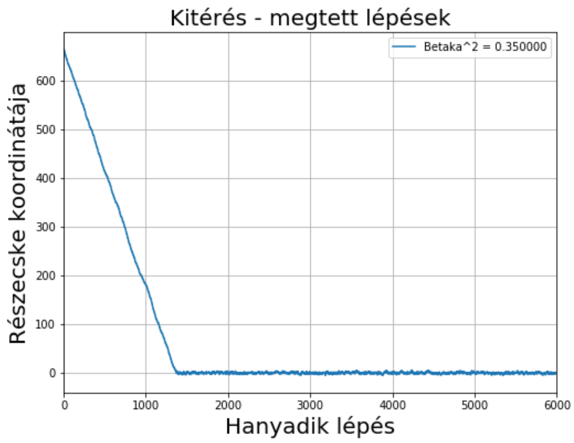
(d) $\beta k a^2 = 1.5$

2..1. ábra. A szimuláció az origóból indítva.

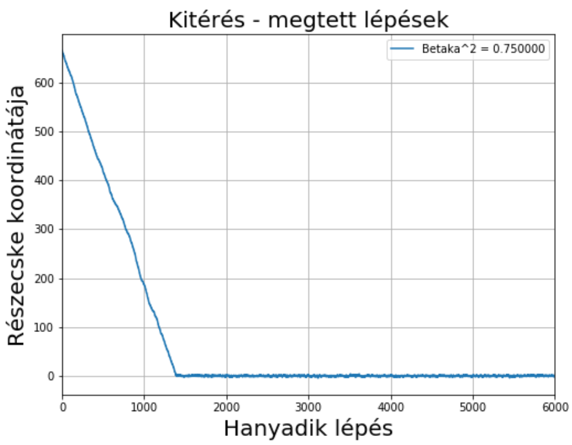
Ezek után a 666. rácspontból indítva újra lefuttattam a szimulációt (2..2) és megmértem a relaxációs idejét a részecskének, azaz azt az időt, amikor eléri az origót. Miután a részecske elérte az origót, azaz az egyensúlyi állapotát, kiátlagoltam minden második időpillanathoz tartozó kitérések és kitérés négyzeteket, hogy azokból szórásnégyzetet számolhassak. Megfigyeltem, hogy a $\sigma^2 \cdot \beta k a^2$ 2 szorzat 0.5 körül fluktuál kicsivel mind a négy paraméterértékre.



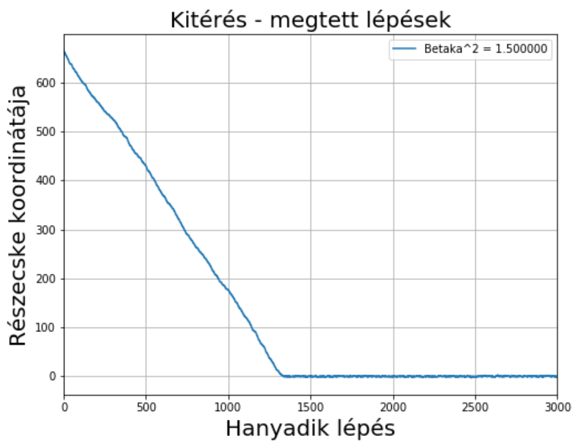
(a) $\beta k a^2 = 0.15$



(b) $\beta k a^2 = 0.35$



(c) $\beta k a^2 = 0.75$



(d) $\beta k a^2 = 1.5$

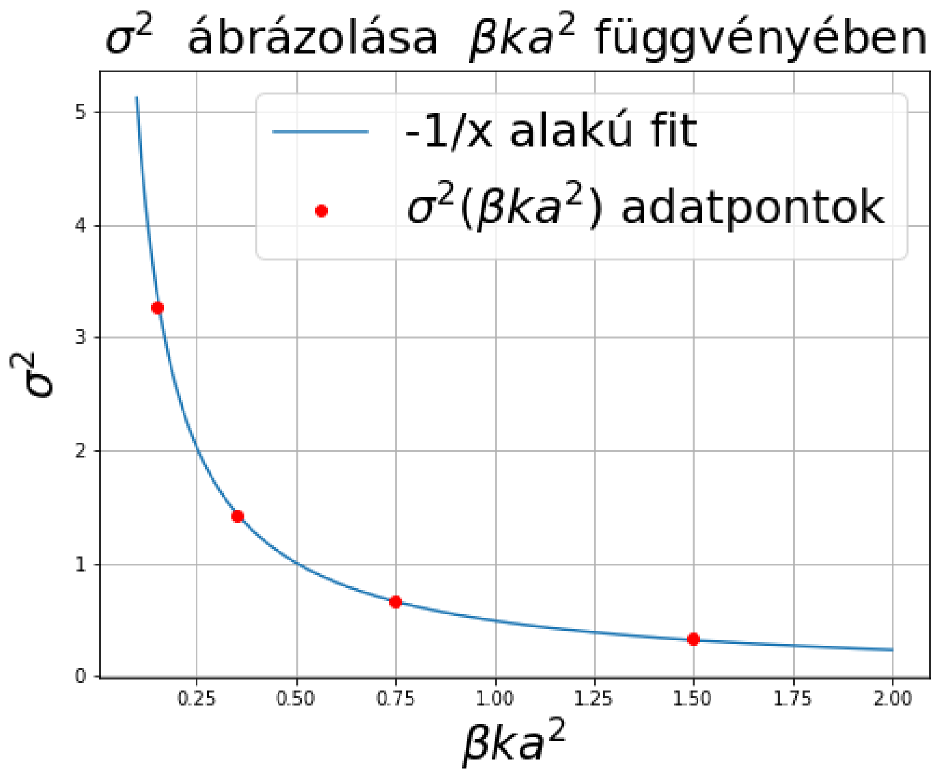
2..2. ábra. A szimuláció a 666. rácspontból indítva.

A mért adatokat táblázatba rögzítem:

1. táblázat. A szimuláció adatai.

βka^2	Kiindulas [a]	Ciklusszám	$\langle x \rangle$	$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle$ - $\langle x \rangle^2$	τ [lépésszám]	$\sigma^2 = \beta ka^2$
0.15	666	500000	0.010066	3.263	1400	0.4894
0.36	666	500000	0.000782	1.416133	1375	0.495647
0.75	666	500000	-0.002790	0.666358	1396	0.499769
1.5	666	500000	0.000034	0.329154	1335	0.493731

Jól látható, hogy $\langle x \rangle$ értéke közelítéssel zéró és független a személyes βka^2 értékétől. Azonban a σ^2 ha ábrázoljuk a βka^2 függvényében akkor egy csökkenő trendet láthatunk. Egy illesztés segítségével megmondható a csökkenés mértéke is.



2..3. ábra. σ^2 ábrázolva a βka^2 függvényében az -1/x alakú illesztéssel együtt.

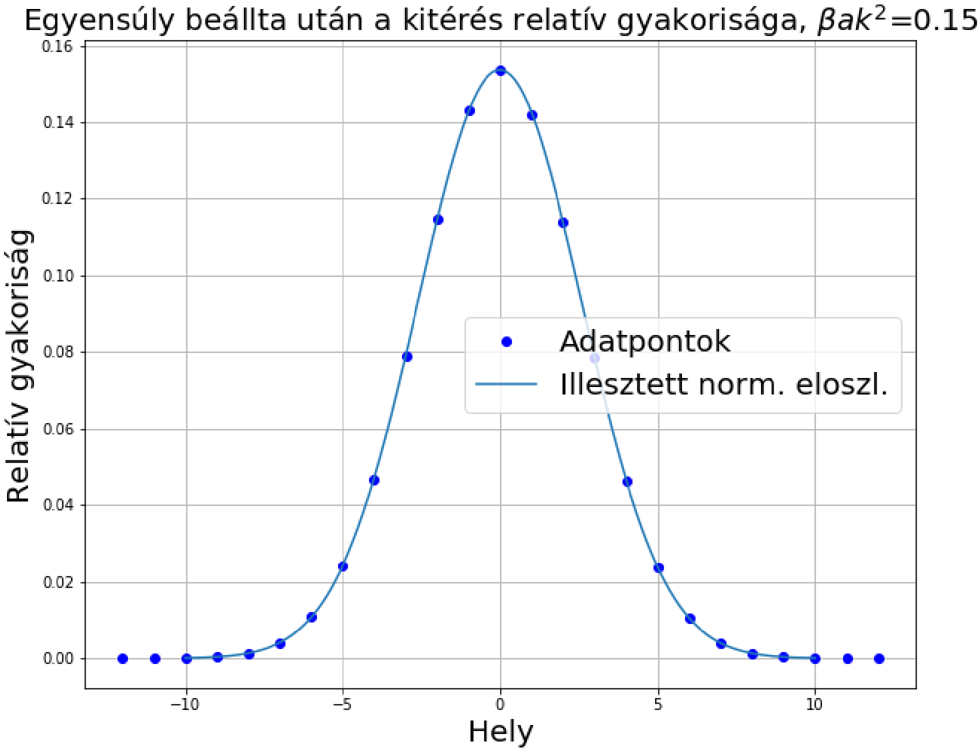
Majd lefuttattam újból a programot különböző kezdeti feltételekre, hogy meg tudjam vizsgálni a relaxációs időt az indítás helyének függvényében, a kapott adatokat az alábbi táblázat tartalmazza:

2. táblázat. A relaxációs idő kiindulóhely függése

x(0)	$\beta k a^2 = 0.15$	$\beta k a^2 = 0.35$	$\beta k a^2 = 0.75$	$\beta k a^2 = 1.5$
-1000	2083	2033	2060	2046
-800	1620	1648	1653	1629
-600	1204	1155	1198	1214
-400	833	834	823	770
-200	438	405	412	382
0	6	2	2	3
200	443	462	386	383
400	826	827	799	803
600	1197	1197	1195	1189
800	1558	1541	1605	1597
1000	1989	1971	2066	2011

A táblázatból jól látható, hogy a relaxációs idő nem függ a kitérés előjelétől, de nagysága körülbelül $|x| \cdot 2$.

Az eloszlásfüggvényét egyensúlyban a $P_{(n)}^{(e)}$-nek, úgy kaptam meg, hogy megnéztem az egyensúly beállta után a kitérések relatív gyakoriságát, és erre a normális eloszlás sűrűségfüggvényét illesztettem.



2..4. ábra. $\beta ka^2 = 0.15$ egyensúlyban a kitérések relatív gyakorisága.

Az illesztett függvény:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \exp^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{2.6}$$

Az illesztés paraméterei:

$$\sigma^2 = 6.74241606 \pm 0.00700286$$
$$\mu = -0.00981588 \pm 0.00165152$$

Az illesztésből jól látszik, hogy a Gauss-görbe tökéletesen illeszkedik az egyensúlyi relatív gyakoriságokra, tehát ezzel az illesztéssel jól becsülhetjük a $P_{(n)}^{(e)}$ függvény alakját.