1 A dinamikai rendszer

Ez a program olyan 1-dimenziós végtelen részecskerendszer mozgását szimulálja, ahol minden részecske tömege 1, valamely két kitűntetett szomszédos részecske között taszító erő hat, melynek potenciálja $\tilde{U}(d) = \frac{c^2}{2d^2}$ (itt d a két részecske távolsága), a többi részecske szabadon repül, csak a kitűntetett kettővel ütköznek rugalmasan. A c a folyamat során konstans, de az értéke véletlen, vagyis a kezdeti feltételekkel rögzítjuk c-t is.

A folyamat kezdetén a részecskék helye 1 intenzitású Poisson pontfolyamat, a részecskék sebességei mindentől független standard normálisok, továbbá

$$c = W d_0, \tag{1}$$

ahol W mindentől független standard normális, d_0 pedig a két kitűntetett részecske kezdeti távolsága.

Ez a rendszer bizonyos értelemben az $M \to 0$ határesete egy olyan rendszernek, ahol nincs potenciál, mindenki szabadon repül amíg nem találkozik senkivel, ám a két kitűntetett részecske között egy nagyon kicsi M tömegű részecske van mindentől független, 0 várható értékű és $\frac{1}{\sqrt{M}}$ szórású kezdősebességgel, és a két szomszédjával rugalmasan ütközik.

2 A feladat

Keressük a két kitűntetett részecske által alkotott rendszer tömegközéppontja helyének szórását az idő függvényében. Reméljük, hogy a szimulációs eredményekből leolvasható a szórás aszimptotikus viselkedése. Ehhez N darab T ideig tartó szimulációt végzünk független kezdőfeltételekkel, és az N elemű mintából számolunk empirikus szórásnégyzetet. Ez egyszerűen a négyzet átlaga, mert a várható érték nulla.

3 A program működéséről

A szimuláció célja a két kitűntetett részecske nyomon követése valamely $T > 10$ ideig. Ehhez nem kell végtelen sok részecskét nyomon követni: bőven elég azokat, akik kezdetben $10T$-nél közelebb vannak. Így akár ha $T = 10^6$ is, a kísérletet akár 10^{10}-szer elvégezve, 0.9999 valószínűséggel egyszer sem fordul elő, hogy olyan részecske ütközne a kitűntetettekkel, amit nem követtünk nyomon. További gyorsítás képpen el lehetne dobni azokat, akik nincsenek ilyen messze, de nincs elég nagy sebességük a kitűntetettek irányában. A jelenlegi program-verzió még nem ilyen okos.

A mozgást a két kitűntetett részecske által alkotott rendszer tömegközéppontjából nézzük, vagyis d helyett mindig $x = \frac{d}{2}$-t használunk, ami (előjel erejéig) a kitűntetett részecskék helye a tömegközépponti rendszerben. Erre az x-re két ütközés között az $U(x) = \frac{c^2}{16x^2}$ potenciálban mozgó pontrészecske mozgásegyenlete érvényes: $\ddot{x} = \frac{c^2}{8x^3}$. Ennek megoldása a (t, x) síkon hiperbola:

$$\left(\frac{x}{\frac{c}{4\sqrt{E}}}\right)^2 - \left(\frac{t - t^*}{\frac{c}{4\sqrt{2}E}}\right)^2 = 1, \tag{2}$$

ahol t^* az az időpont, amikor a két részecske legközelebb van (lenne), E pedig az összenergia:

$$t^* = \begin{cases} t_1 + \sqrt{\frac{x_1^2}{2E} - \frac{c^2}{32E^2}}, & \text{ha } v_1 \leq 0 \\ t_1 - \sqrt{\frac{x_1^2}{2E} - \frac{c^2}{32E^2}}, & \text{ha } v_1 > 0 \end{cases},$$

$$E = \frac{1}{2}v_1^2 + \frac{c^2}{4x_1^2}.$$

Itt x_1 és v_1 a hely és a sebesség a t_1 pillanatban. Az E értéke két ütközés között konstans, de ütközéskor megváltozik (szemben c-vel, aki ütközéskor sem változik meg).

Kényelmi okból minden részecske helyét pozitív számként tároljuk, és külön tartjuk nyilván a bal és jobboldali részecskéket. Így mindig csak pozitív x értékekkel kell foglalkozni.

A következő ütközés időpontját megkaphatnánk úgy, hogy minden részecskére megoldjuk t-re az

$$x = x_i + v_i(t - t_1)$$

egyenlet és (2) alkotta egyenletrendszert, ahol x_i és v_i az i-edik részecske helye és sebessége a t_1 időpontban (természetesen a tömegközépponti rendszerben), és kikeressük a legkisebb pozitív megoldást (vagyis a leghamarabbi jövőbeli ütközést). Sok számolás megspórolható azonban, ha számontartjuk, hogy az eddig megvizsgált részecskék közül ki ütközik leghamarabb, és egy újabb részecskére csak akkor oldjuk meg az egyenletrendszert, ha ő *még hamarabb* fog ütközni. Ez pedig pontosan akkor igaz, ha az eddigi nyertes részecske ütközésének pillanatában ő az eddigi nyertestől balra lenne.

Mivel az i-edik részecske mindig a kitűntetettől jobbra indul, vagyis $x_i > x_1$, a fenti egyenletrendszernek mindig legfeljebb egy pozitív megoldása van, éspedig

- ha $v_i > \sqrt{2E}$, akkor nincs pozitív megoldás
- ha nem, akkor

$$t = \frac{x_1 v_i + 2Et^*}{2E - v_i^2} + \frac{1}{2E - v_i^2}\sqrt{2E(v_i t^* + x_i)^2 + \frac{v_i^2 c^2}{16E} + \frac{c^2}{8}}.$$

Egy szimulációs lépés során tehát először megkeressük, hogy melyik részecske fog legközelebb ütközni, hol és mikor, és hogy ekkor mennyi lesz a kitűntetett részecskék sebessége. Ezután a két ütköző részecske sebességét kicseréljük, majd áttérünk az új tömegközépponti rendszerre. Így mindig csak relatív helyeket és sebességeket tartunk nyilván: még a tömegközéppont helyét és sebességét is csak azért, mert erre megy ki az egész.

4 módosítások

Ahogy a vizsgált rendszer egy pillanatszerű ütközésekkel működő rendszer határeseteként születik, a kölcsönhatás természetes választása az elején leírt választás. Mégis érdekes kérdés, hogyan változik az eredmény, ha a kitűntetett részecskék között más a kölcsönhatás, konkrétan a potenciálban szereplő c konstanst nem (1) szerint választjuk. Ezért három lehetséges módosítást vizsgálunk:

- amikor c a (1)-belinek konstansszorosa

- amikor c a kezdőfeltételtől független determinisztikus konstans
- amikor $c = Wd_0$, mint (1)-ben, de W nem mindentől független normális, hanem a kezdőfeltételtől független determinisztikus konstans. Ez annak felel meg, hogy a közelítő rendszerben a kis részecske kezdősebességét lerögzítjük.

5 ellenőrzés

a trajektória szimulációjának helyességét valamelyest ellenőrizhetjük, ha kirajzoltatjuk az összes részecske helyét (a tömegközéppont helyével korrigálva, vagyis nem a tömegközépponti rendszerben). Így látszik, hogy tényleg egyenesek-e a trajektóriák, nem szalasztunk-e el ütközést, és az ütközés utáni trajektóriák a régiek differenciálható folytatásai-e. Ezért a programnak van egy "teszt" üzemmódja, amikor a trajektóriákat az idő függvényében kiíratjuk.