SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓ
Házi feladat 2011

A feladatokat C, C++, vagy FORTRAN valamelyik változata programnyelveken kell megoldani. Mellékelni kell a forráskódot és a megoldás helyességét igazoló eredményeket (grafikonok, és/vagy táblázatok + szöveg), az utóbbiakat pdf formátumban. A megoldásokat 1 teljes héttel a vizsga előtt kell elküldeni Rácz Éva e-mail címére (racze@phy.bme.hu). Az e-mail tárgyát a következőképpen adják meg:
[SzamSzimHF2011] Név, feladat sorszáma
Kérjük, hogy a programokat bőségesen kommentálják, az ábrák és a grafikonok legyenek jól érthető feliratokkal, magyarázatokkal ellátva, persze ésszerű keretek (2-6 oldal) között. Törekedjenek rendszerfüggetlen programokra pl. (OS-specifikus függvényeket kerüljék). Képzeljék magukat a javító helyébe! A konfigurációkat megjelenítő grafikának nem kell különösen igényesnek lennie (GUI inkább ellenjavallt), a lényeget mutassuk be. A feladat megoldása egyéni munka!

1. Képzeljünk el egy L = 1000 egység hosszúságú, egysávos, diszkrét (egységnyi szakaszokból) álló autópályát, amelyen nagyon egyszerű járművek közlekednek. Egy autó hossza egységnyi, és csak egyet tud előre lépni, feltéve, hogy a megcélzott mező üres. A pályán az autók azonos, egységnyi rátával egy Poisson folyamat szerint mozognak balról jobbra, vagyis minden autó következő lépésének idejét a $P(\tau) = e^{-\tau}$ exponenciális eloszlásból vesszük. A járművek a baloldali szélen lépnek be α, és a jobboldalon lépnek ki β rátával (vagyis egy ilyen paraméterű Poisson folyamat szerint). Vizsgálja meg a stacionér sűrűségprofil változását az α és β függvényében! Lehet különböző fázisokról, fázisdiagramról beszélni?

2. Az ú.n. Voter modell a következő: Egy négyzetrács rácspontjain „szavazók" ülnek, akiknek kétféle véleményük lehet: fehér, vagy fekete. A vélemény dinamikája a következő: véletlenszerűen kiválasztunk egy rácspontot és a véleményét azonosítjuk egy véletlenül kiválasztott szomszédjáéval. Írjon programot a következő feltételekkel. Legyen a rács lineáris mérete 100 egység. Használjon helikális határfeltételt. A kezdeti feltétel legyen 50-50%, független eloszlással. Jelenítse meg a konfigurációkat! Vizsgálja meg először kvalitatíve, hogy vannak-e különböző viselkedésű szakaszok az időfejlődésben! Hoshen-Kopelman algoritmussal elemezze 300 MCS/site-ig a fürtstatisztikát!

3. Írjon eseményvezérelt molekuladinamikai programot egy lineáris szemcsés rendszerre! Legyen tökéletes csúszású az ütközés, amit r restitúciós együtthatóval jellemzünk. A részecskék száma N = 20, sugaruk a = 1/2, a rendszer mérete L = 100. A rendszer két végén legyen rugalmasan visszaverő fal. A kezdeti feltétel feleljen meg egy T hőmérsékletű gáznak. Végezzen statisztikai vizsgálatot arra, hogy hogyan függ a rugalmatlan összeomlás (inelastic collapse) fellépésének ideje r –től! Mutassa meg egy viszonylag alacsony r értéknél, hogy a restitúció sebességfüggésével az instabilitást ki lehet küszöbölni!

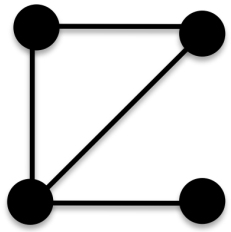
4. Az egyszerű köbös rácsban kristályosodó AB szubsztitúciós ötvözet energiafüggvénye

$$\mathscr{H} = -J_{AA}\sum_{<ij>} n_i n_j - J_{BB}\sum_{<ij>} m_i m_j - J_{AB}\sum_{<ij>} n_i m_j$$

ahol n_i (m_i) az A atomokon 1(0), a B-ken 0(1) értéket vesz fel és a szummák első szomszédokra értendők. Legyenek a csatolások: J_{AA}=1, J_{BB}=2, J_{AB}=3. Minden rácspont betöltött, tehát n_i+m_i=1. Legyen $<n_i>$=1/2. Mi az alapállapot? Mi a rendparaméter? Határozza meg Monte Carlo Kawasaki dinamika (periodikus határfeltétel) segítségével a rendparaméter hőmérséklet-függését! A rendszer méretét a lehetőségekhez illessze!

5. Írjon szimulációs programot a háromdimenziós diffúzió-limitált aggregációs modellre egyszerű köbös rácson és alkalmazza a zajredukciós technikát. Vezessen be az anizotrópia jellemzésére egy mértéket, és határozza meg annak függését a zajredukciós paramétertől! Mekkora rendszereket kell választani, hogy az anizotrópia-effektus látható legyen?

6. A Barabási-Albert modell a hálózatot a következőképpen növeszti: Kiindulunk egy 4 csúcsból álló magból, amelyek össze vannak kötve pl. így:



Minden lépésben egy új csúcs csatlakozik a hálózathoz, három élt hozva. Ezeket egymás után összekötjük a hálózat csúcsaival, mégpedig a pillanatnyi fokszámmal arányos valószínűséggel. (Többszörös él nem megengedett.) A csomósodási, vagy klasztering koefficiens definíciója:

$$C_i = \frac{n(i)}{k_i(k_i-1)/2}$$

ahol $n(i)$ az i csúcsnál lévő háromszögek száma, k_i pedig a fokszáma. (A nevező a lehetséges háromszögek száma.) Határozza meg, hogy hosszú idő után hogyan függ átlagosan a k fokszámtól a csomósodási együttható!

7. Az explozív perkolációs modell a következő: Ahelyett, hogy minden lépésben véletlenül kiválasztanánk egy még be nem töltött élt, két élt választunk, és ezek közül azt töltjük be, amelyik által az újonnan összekötött fürtök méretének szorzata kisebb. Egyenlő esetben véletlen döntést hozunk. „Belső él” elsőbbséget élvez minden összekötéshez képest. Vizsgálja meg négyzetrácson a rendszer rendparaméterének függését a lépések számától! Van-e fázisátalakulás ebben a modellben? Van-e skálázás?