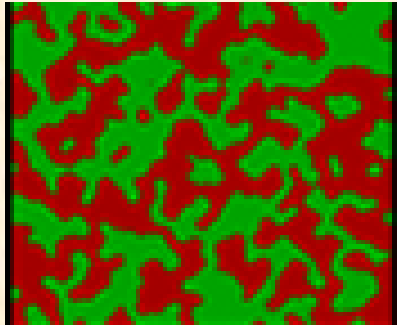




Fizikai szimuláció I.

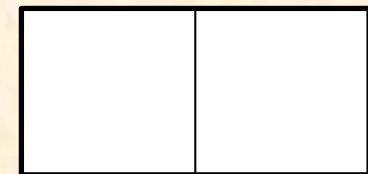
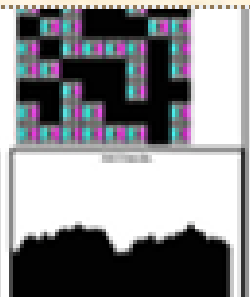
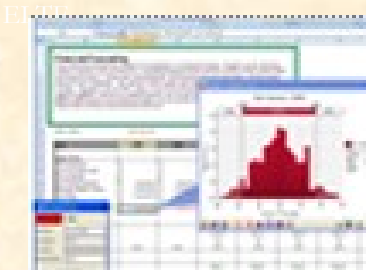
Gázmodellek



Kérdés: ha a molekulák mozgását semmi sem befolyásolja, akkor hogyan töltik ki a rendelkezésre álló teret?

Darázs modell:

- Adott két doboz, és köztük egy rés.
- Az egyikbe darazsokat teszünk.
- A darazsok a két doboz között véletlenszerűen röpködnek.
- Milyen lesz az eloszlásuk a két doboz között?



Gázmodellek

Darázs modell

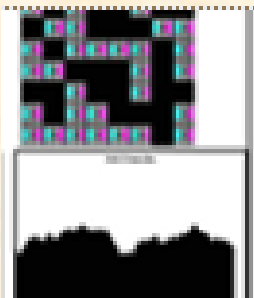
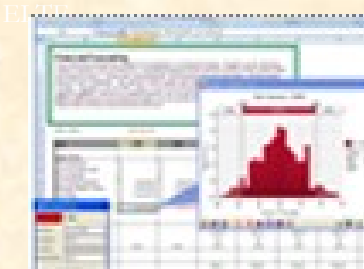
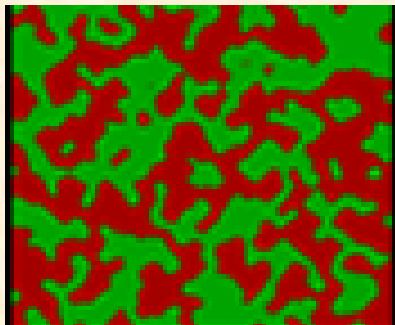
Ábrázolás

N – a darazsak száma

$D(i)$ – az i -edik darázs helye (1 vagy 2)

A – az első dobozban levő darazsak száma

$S(i)$ – ennyiszor volt az első dobozban pontosan i darázs



Gázmodellek

Darázs modell

Szimulációs lépés:

$i := \text{véletlen}(N)$

Ha $D(i) = 1$ akkor $D(i) := 2$; $A := A - 1$

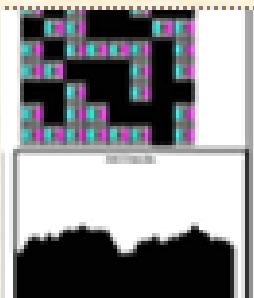
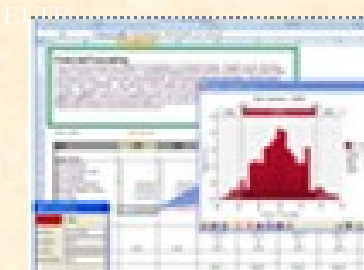
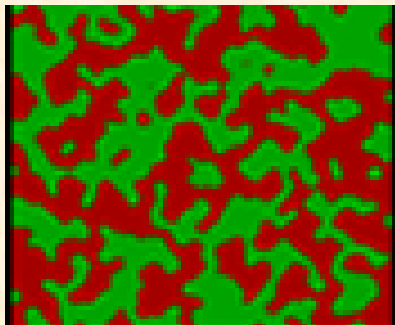
különben $D(i) := 1$; $A := A + 1$

$S(A) := S(A) + 1$

Eljárás vége.

Megfigyelhető jelenségek:

- legtöbbször azok az esetek fordulnak elő, amikor a két dobozban nagyjából egyenlő számú darázs van;



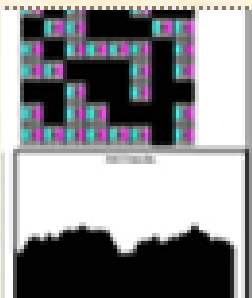
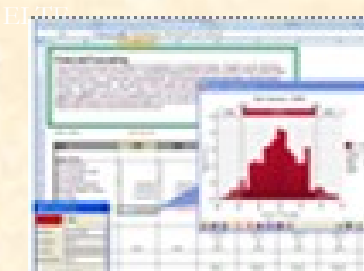
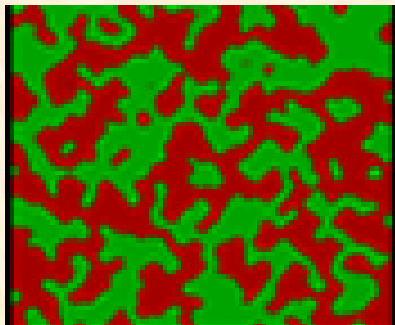
Gázmodellek

2. Elemi modell megfeleltetése:

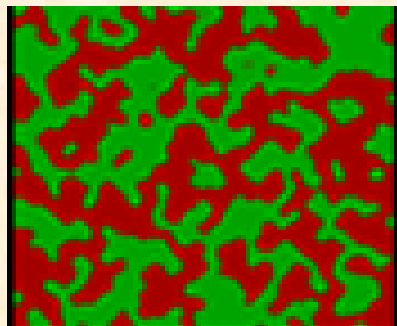
- a *születés* legyen a darázs berepülése az 1. dobozba;
- a *halálozás* legyen a darázs kirepülése az 1. dobozból.

Születés: létszámmal fordítva arányos S_- szabály

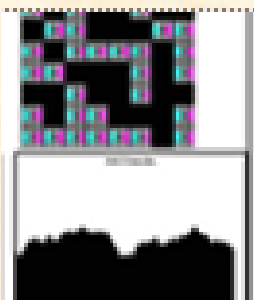
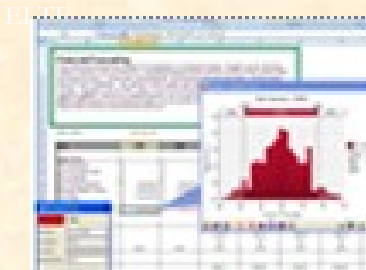
Halálozás: létszámmal arányos S_+ szabály



Gázmodellek



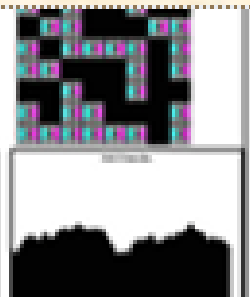
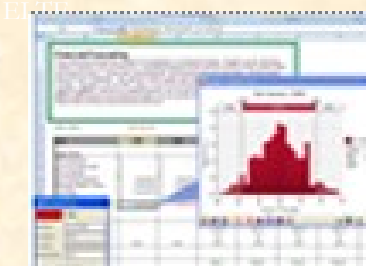
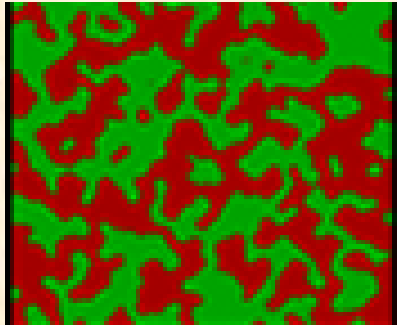
- a kezdőeloszlásnak csak nagyon rövid ideig tartó, kezdeti vizsgálatokra lehet jelentős hatása;
- elég hosszú időt vizsgálva extrém eloszlásokat (az összes darázs az egyik dobozban van) is kapunk kis darázsszámra;
- eredményül az első dobozban levő darazsak számára **binomiális eloszlást** kapunk, ahogyan ezt matematikai megfontolások alapján is vártuk.



Gázmodellek

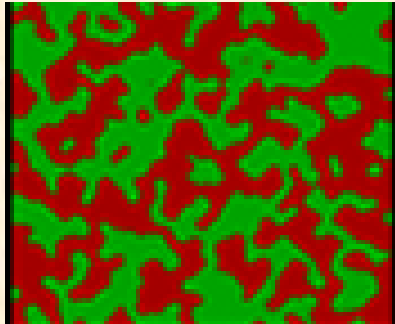
Darázs modell egyenes mentén:

- Adott K doboz, és köztük egy-egy rés.
- Az egyikbe darazsokat teszünk.
- A darazsak a K doboz között véletlenszerűen röpködnek: mindegyikből vagy a balra, vagy a jobbra levő szomszédjába.
- Milyen lesz az eloszlásuk a K doboz között?



Gázmodellek

Darázs modell

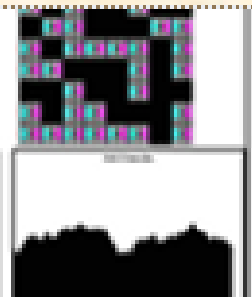
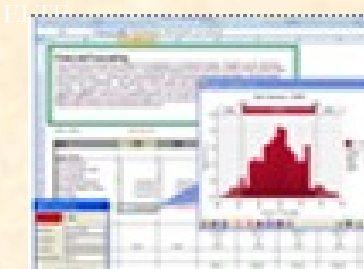


Ábrázolás

N – a darazsak száma

$D(i)$ – az i -edik darázs helye ($1..K$)

$A(i)$ – az i -edik dobozban levő darazsak száma



Gázmodellek

Darázs modell

Szimulációs lépés:

$i := \text{véletlen}(N)$

Ha véletlenszám < 0.5

akkor Balra(i)

különben Jobbra(i)

Eljárás vége.

Balra(i):

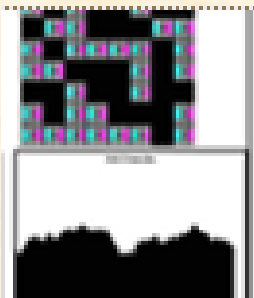
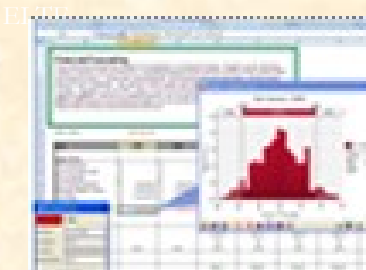
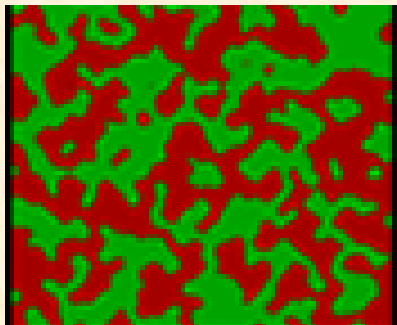
Ha $D(i) > 1$ akkor $A(D(i)) := A(D(i)) - 1$

$D(i) := D(i) - 1$

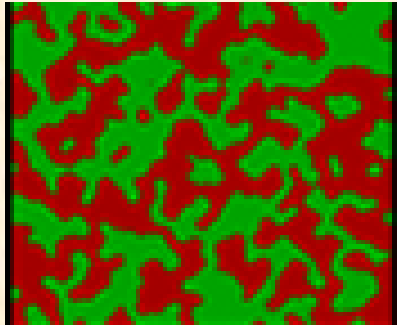
$A(D(i)) := A(D(i)) + 1$

Elágazás vége

Eljárás vége.



Gázmodellek



Jobbra (i) :

Ha $D(i) < K$ akkor $A(D(i)) := A(D(i)) - 1$

$D(i) := D(i) + 1$

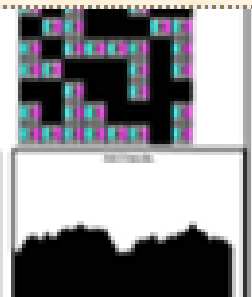
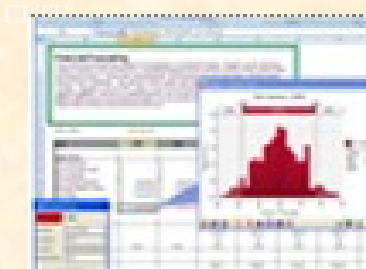
$A(D(i)) := A(D(i)) + 1$

Elágazás vége

Eljárás vége.

Megfigyelhető jelenségek:

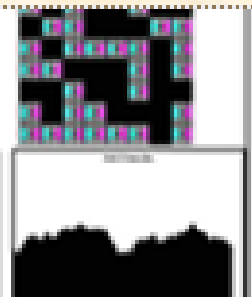
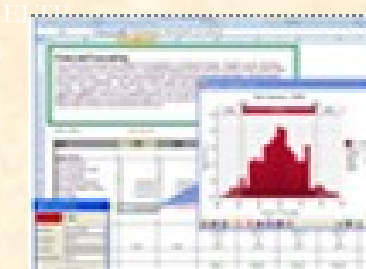
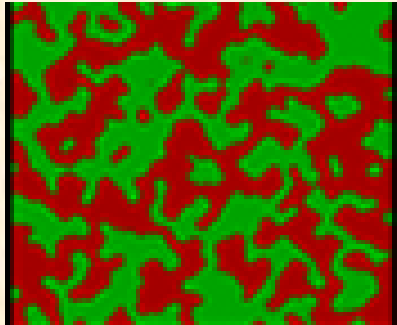
- a darazsak egyenletes eloszlása a legvalószínűbb;
- itt is a 2. elemi modell (S_- , S_+) feltételei teljesülnek, ami stabilitásra utal.



Gázmodellek

Gravitációs darázs modell :

- Adott K doboz, s köztük egy-egy rés.
- Az egyikbe darazsokat teszünk.
- A darazsak a K doboz között véletlenszerűen röpködnek: mindegyikből lefelé P , felfelé $1-P$ valószínűséggel.
- Milyen lesz az eloszlásuk a K doboz között?



Gázmodellek

Gravitációs darázs modell

Szimulációs lépés:

$i := \text{véletlen}(N)$

Ha véletlenszám $< P$

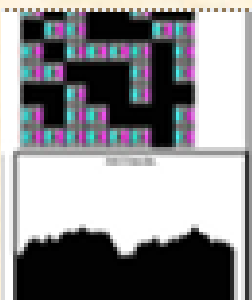
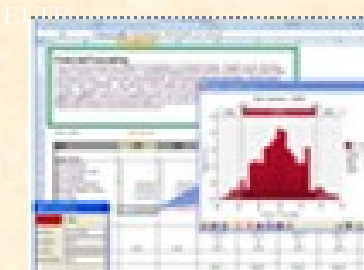
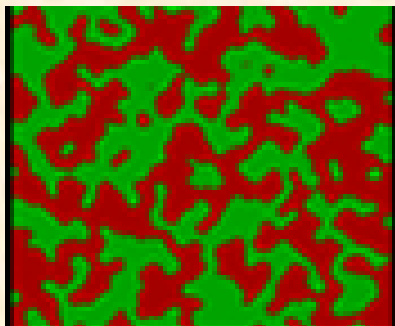
akkor Lefelé(i)

különben Felfelé(i)

Eljárás vége.

Megfigyelhető jelenségek:

- a darazsak (molekulák) száma a magassággal exponenciálisan csökken;
- itt is van egyensúlyi állapot, de az nem az egyenletes eloszlás.



Gázmodellek

Az egyensúly feltétele:

- Adott időtartam alatt minden dobozhatáron azonos a lefelé és a felfelé átlépők száma:

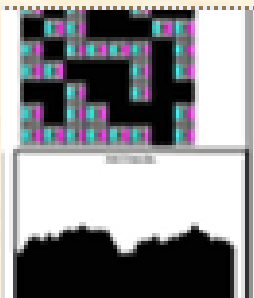
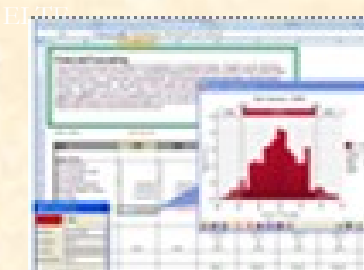
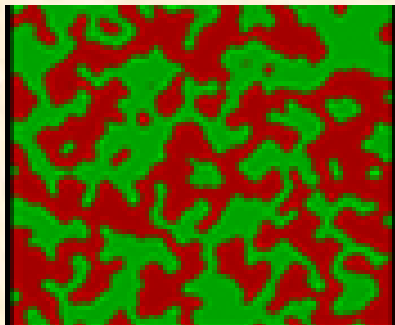
$$DB(i) * P = DB(i-1) * (1-P) \text{ , azaz}$$

$$DB(i) = DB(i-1) * \frac{(1-P)}{P} = \dots = DB(1) * \frac{(1-P)^{i-1}}{P^{i-1}}$$

- A fizikából tanult barometrikus magasságformula:

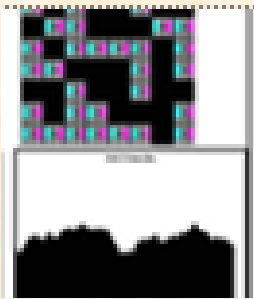
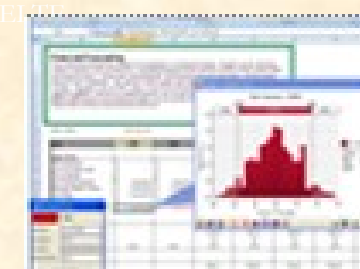
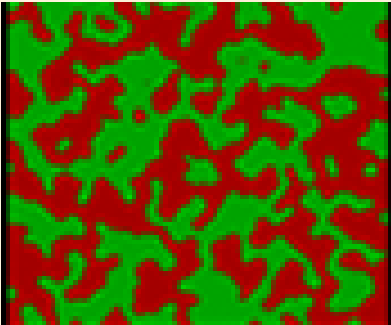
$$n(z) = n_0 e^{-\frac{mgz}{kT}}$$

- A két formula egymásnak megfeleltethető, azaz a fizikai paramétereiből számolható a P paraméter.

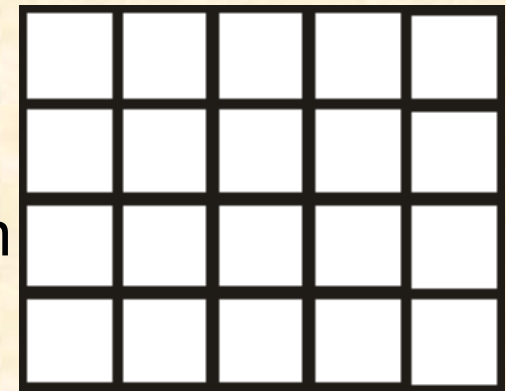


Gázmodellek

Gázmodellek a síkban:



- Az egyenes menti eloszlás helyett vizsgáljuk a síkbeli eloszlást!
- Minden cellában vagy 1, vagy 0 molekula legyen!
- A molekula választásról térjünk át a hely választásra!
- Minden molekula egy szomszédos helyre léphet.
- A tér zár, ki- és belépni nem lehetséges.



Gázmodellek

Síkbeli gázmodell

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

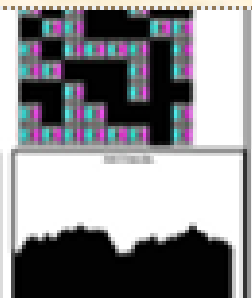
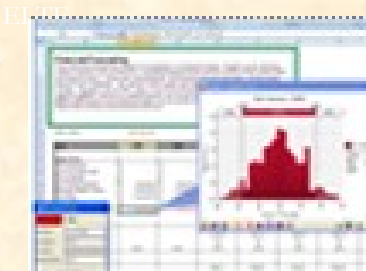
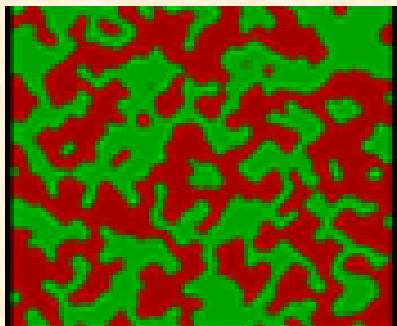
$(k, l) := \text{Véletlen_szomszéd_belül}(i, j)$

$\text{Csere}((k, l), (i, j))$

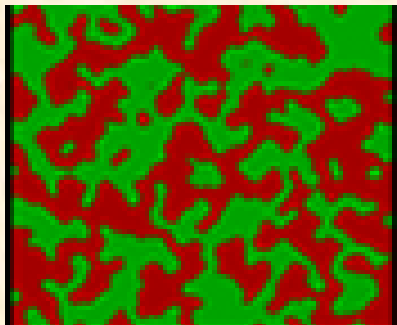
Eljárás vége.

Megfigyelhető jelenségek:

- a molekulák a teret egyenletesen töltik ki;
- egy tetszőlegesen kijelölt térrészre itt is teljesülnek a stabilitást okozó 2. elemi modell (S_-, S_+) feltételei.



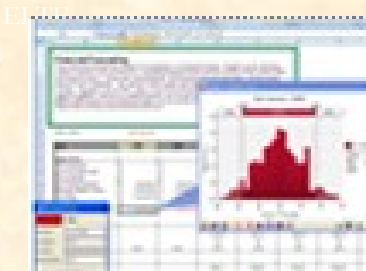
Gázmodellek



Síkbeli gázmodell

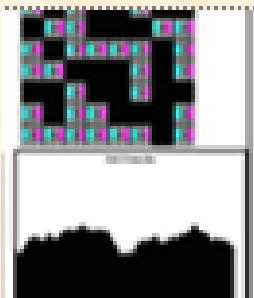
Gravitáció figyelembevétele:

- A véletlen szomszédot ne azonos eséllyel válasszuk lefelé, illetve felfelé!



Szél figyelembevétele:

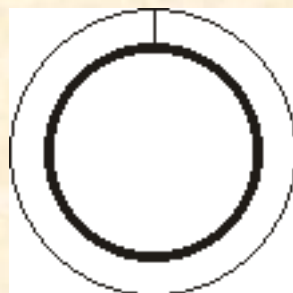
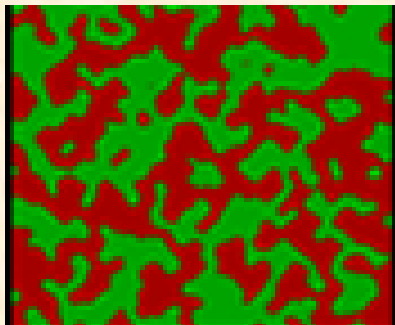
- A véletlen szomszédot ne azonos eséllyel válasszuk balra, illetve jobbra!
- Itt a gravitációval szemben a tér szélén nem gyűlhetnek fel a molekulák, azaz kell be-, illetve kilépés jelenséggel foglalkozni!



Gázmodellek

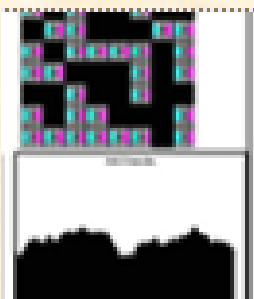
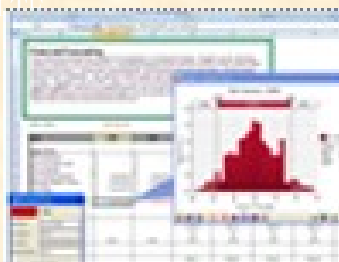
Síkbeli gázmodell

A szimulációs tér lehetséges esetei:



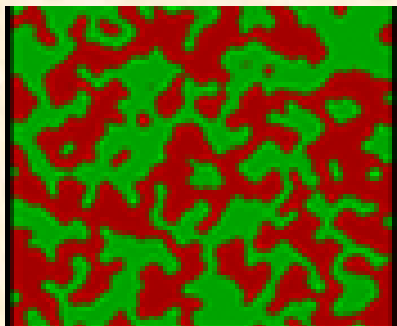
Mindkét esetben a megoldás:

- Az első és az utolsó oszlop legyenek egymás szomszédjai!

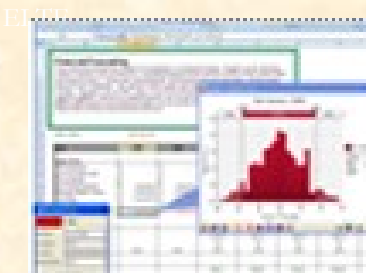


Gázmodellek

Síkbeli gázmodell hőmérséklettel

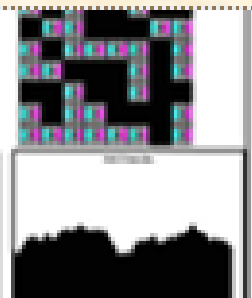


Megoldandó: a molekulák a sebességükkel arányosan mozognak!



Lehetőségek:

- az elmozdulás távolságának megadása;
- az elmozdulás valószínűségének megadása;
- a kiválasztás gyakoriságának megadása.



Gázmodellek

Az elmozdulás távolságának megadása

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$(k, l) := \text{Véletlen_szomszéd_belül}(i, j)$

$T(i, j)$ távolságra

$\text{Csere}((k, l), (i, j))$

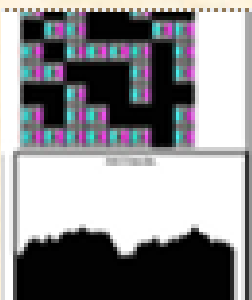
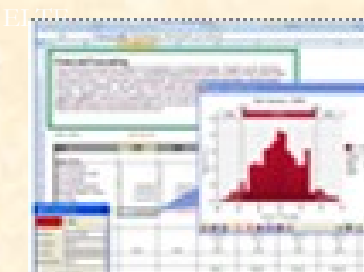
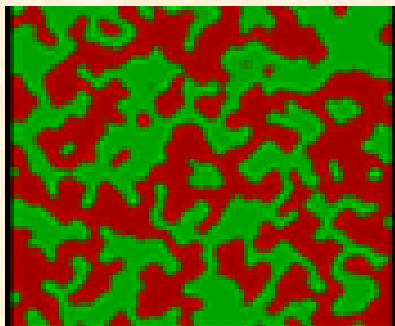
Eljárás vége.

Problémák:

- $T(k, l)$ más sebességű;

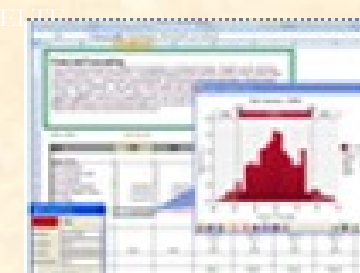
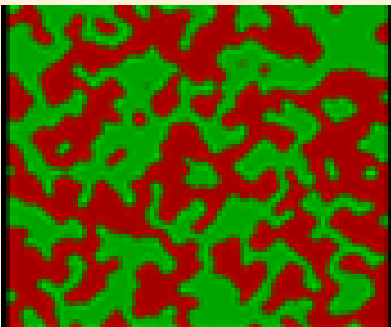
Ha $T(k, l) = 0$ akkor $\text{Csere}((k, l), (i, j))$?

- útközben is vannak molekulák, őket kikerüljük?



Gázmodellek

Az elmozdulás valószínűségének megadása



Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$(k, l) := \text{Véletlen_szomszéd_belül}(I, J)$

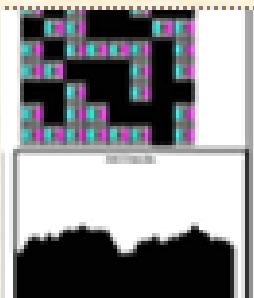
Ha véletlenszám $< T(i, j)$

akkor $\text{Csere}((k, l), (i, j))$

Eljárás vége.

Problémák:

- sok kis sebességű molekula esetén lassú;
- $T(k, l)$ más sebességű is lehet.

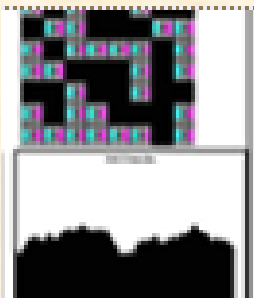
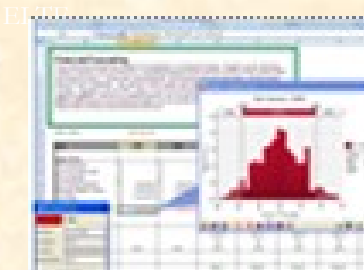
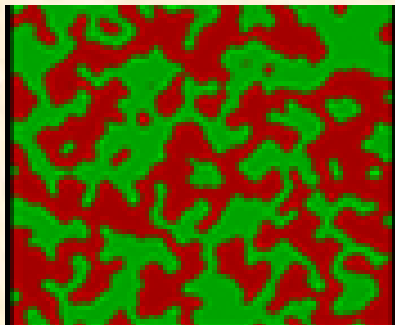


Gázmodellek

A kiválasztás gyakoriságának megadása

Ábrázolás:

- Mol(db) tömb a molekulák leírására.
 - A tömb elemei rekordok: a molekula sor- és oszlopindexét, valamint sebességét tartalmazza.
 - S jeleneti a sebességek összegét.
 - Mol(x).sebesség/S jelöli az x. molekula kiválasztásának valószínűségét.
 - T(i,j) az (i,j) helyen levő molekula sorszáma.
- Akkor is gyorsít, ha a sebességek egyformák!



Gázmodellek

A kiválasztás gyakoriságának megadása

Szimulációs lépés:

```
x := véletlen(DB)
```

```
i := Mol(x).sor; j := Mol(x).oszlop
```

```
(k, l) := Véletlen_szomszéd_belül(i, j)
```

```
y := T(k, l)
```

```
Csere((k, l), (i, j))
```

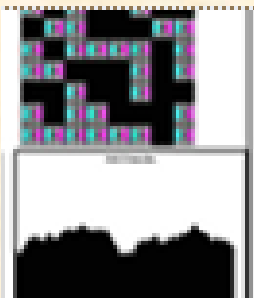
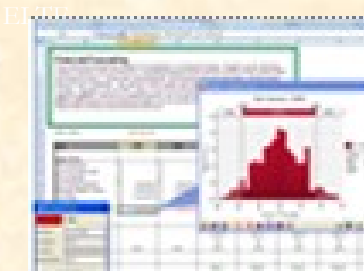
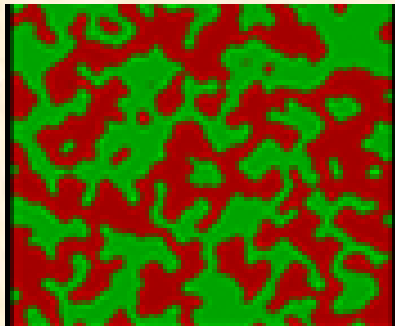
```
Mol(x).sor := k; Mol(x).oszlop := l
```

```
Ha y > 0 akkor
```

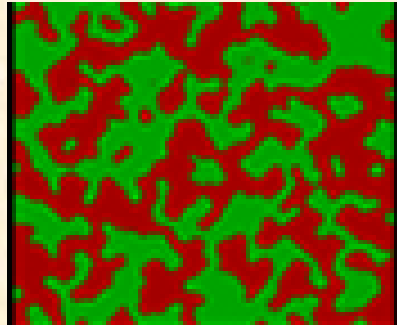
```
    Mol(y).sor := i; Mol(y).oszlop := j
```

Eljárás vége.

Kérdés: ütközés – sebességváltozás?



Folyadékmodellek



Bernoulli modell

Két dobozt teletöltünk A és B molekulákkal. A molekulák a két doboz között szabadon mozognak.

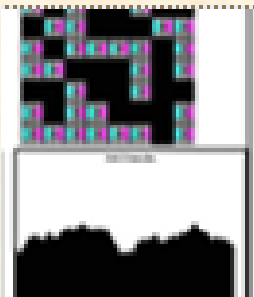
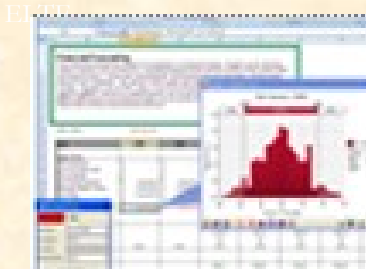
Hogyan töltik ki a teret?

Ábrázolás

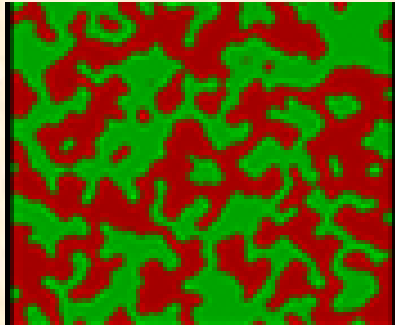
N – a helyek száma

$T(i,j)$ – az i -edik doboz j -edik helyén levő molekula

AD_b – az első dobozban levő A-k száma



Folyadékmodellek



Bernoulli modell

Szimulációs lépés:

$i := \text{Véletlen_hely}(N)$

$j := \text{Véletlen_hely}(N)$

Ha $T(1, i) = "A"$ akkor $ADb := ADb - 1$

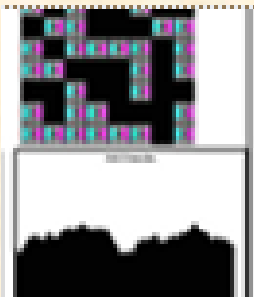
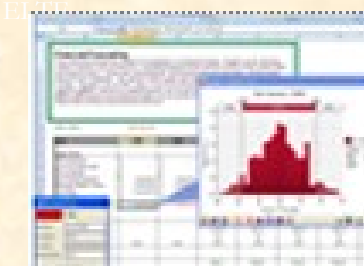
Ha $T(2, j) = "A"$ akkor $ADb := ADb + 1$

Csere(i, j)

Eljárás vége.

Megfigyelhető:

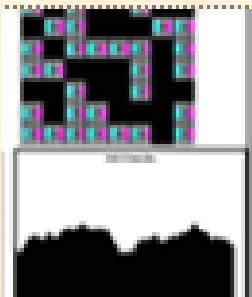
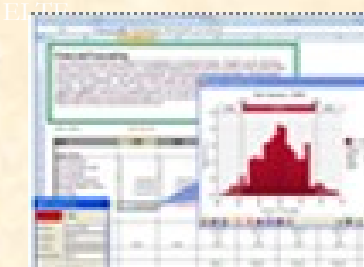
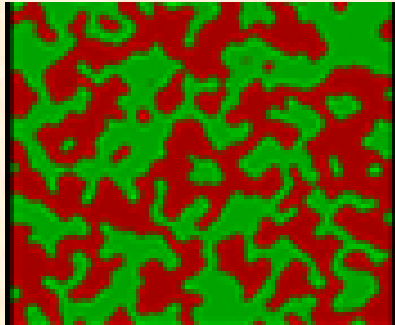
- Az eredmény megegyezik a Darázs-modell eredményével.
- Itt is a 2. elemi modell használható.



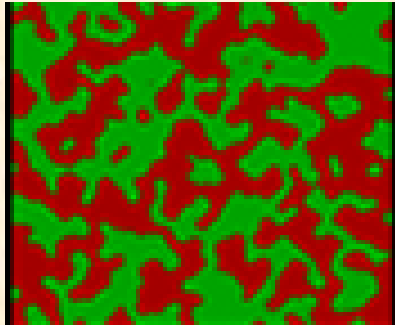
Folyadékmodellek

Síkbeli folyadékmmodell

- A síkbeli gázmodellel szemben itt nem elhanyagolható a molekulák vonzása.
- A vonzóerő a távolság négyzetével arányosan csökken, a modellben a közvetlen szomszédok 1, a távolabbiak 0 erővel vonzzák a molekulákat.
- Egy molekula ekkor abban az esetben mozdulhat el egy szomszéd helyre, ha ott a molekulaszomszédtszáma nem csökken.



Folyadékmodellek



Síkbeli folyadékmmodell

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, N)$

$(k, l) := \text{Véletlen_szomszéd}(i, j)$

Ha $T(i, j) = 1$ és $T(k, l) = 0$ és

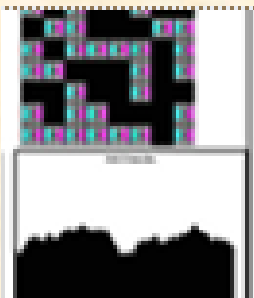
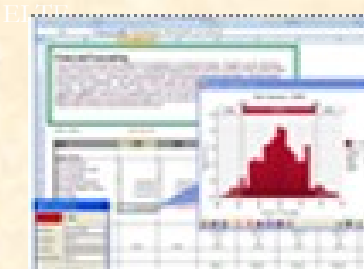
$\text{Szomszédyszám}(k, l) \geq \text{Szomszédyszám}(i, j)$

akkor $\text{Csere}((i, j), (k, l))$

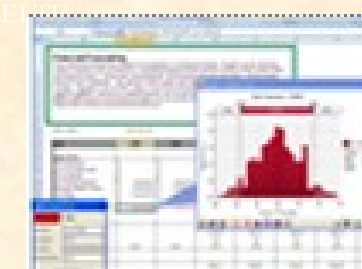
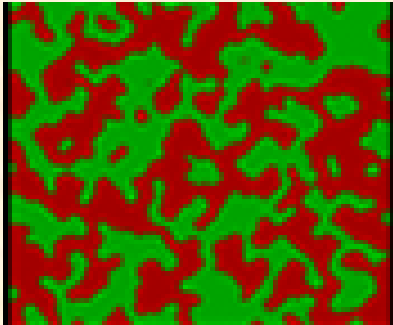
Eljárás vége.

Megfigyelhető:

- A molekulák véletlenszerű helyeken cseppekké állnak össze.
- Itt a 3. elemi modell (\mathbf{S}_+ , \mathbf{S}_-) használható.



Folyadékmódellek



Síkbeli gravitációs folyadékmódell

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, N)$

$(k, l) := \text{Véletlen_szomszéd}(i, j)$

Ha $T(i, j) = 1$ és $T(k, l) = 0$ és

$\text{Szomszédyszám}(k, l) + (k - i) * G \geq$

$\text{Szomszédyszám}(i, j)$

akkor $\text{Csere}((i, j), (k, l))$

Eljárás vége.

Megfigyelhető:

- A molekulák véletlenszerű helyeken cseppekké állnak össze.
- Itt a 3. elemi modell (\mathbf{S}_+ , \mathbf{S}_-) használható.

A high-angle, wide shot of a modern building's courtyard. The building's facade is a vibrant red, composed of a grid of square panels. Many of these panels are replaced by windows of various sizes, some with white frames and others with dark frames. The courtyard floor is a light, neutral color, and the overall scene is brightly lit, suggesting a sunny day. The perspective is from an elevated position, looking down into the courtyard.

Vége