# Neravnovesni pojavi – enakost Jarzynskega

Miha Čančula

19. januar 2013

## 1 Enakost Jarzynskega

Vzemimo sistem z vsaj enim zunanjim parametrom. V primeru Isingovega modela, ki se mu bomo posvetili v drugem poglavju, je ta parameter zunanje magnetno polje $h$. Če je sistem na začetku v ravnovesju pri vrednosti parametra $A$, nato pa v končnem času spremenimo zunanji parameter na vrednost $B$, s to spremembo opravimo delo $W$. To delo je odvisno od mikrostanja sistema. Če pa poskus ponovimo mnogokrat in vsakič zapišemo količino opravljenega dela, enakost Jarzynskega trdi

$$\langle e^{-\beta W} \rangle \equiv \int \mathrm{d}W \rho(W) e^{-\beta W} = e^{-\beta \Delta F} \tag{1}$$

kjer je $\rho(W)$ verjetnostna porazdelitev dela, $\Delta F = F_B - F_A$ pa razlika prostih energij med ravnovesnima stanjema pri temperaturi $\beta$ in vrednosti zunanjega parametra $A$ oz. $B$.

Na levi strani enakosti nastopa delo, ki ga opravimo, ko sistem spravimo iz ravnovesja. Če je sprememba zunanjega parametra velika in hitra, je lahko sistem daleč od ravnovesja. Na desni strani enakosti pa nastopajo le ravnovesne vrednosti proste energije. Enakost Jarzynskega torej povezuje neravnovesno obnašanje sistema z ravnovesnimi količinami.

Pomembna lastnost zgornje enakosti je, da ni odvisna od načina, kako se zunanji parameter spreminja s časom. Sprememba je lahko poljubno hitra ali pa zelo počasna.

## 2 Izpeljava

Hamiltonian sistema s faznim prostorom $\Gamma$ in zunanjim parametrom $\lambda$ lahko zapišemo kot

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\Gamma; \lambda) \tag{2}$$

Na začetku je sistem pri $\lambda = A$ v stanju mikrostanju $\Gamma_0$. Ko pa parameter v času $\tau$ spremenimo na vrednosti $B$, sistem preide v mikrostanje $\Gamma_\tau$. V hamiltonskem sistemu je opravljeno delo $W$ enako razliki energij na koncu in na začetku.

$$W = \mathcal{H}(\Gamma_\tau; B) - \mathcal{H}(\Gamma_0; A) \tag{3}$$

Če zapišemo izraz za povprečje $\langle e^{-\beta W}\rangle$ po začetnem stanju kot

$$\langle e^{-\beta W}\rangle = \int \mathrm{d}\Gamma_0 p(\Gamma_0) e^{\beta[\mathcal{H}(\Gamma_\tau;B)-\mathcal{H}(\Gamma_0;A)]} \tag{4}$$

in uporabimo verjetnostno porazdelitev začetnega stanja

$$p(\Gamma) = \frac{1}{Z(A)} \exp\left[-\beta\mathcal{H}(\Gamma;A)\right] \tag{5}$$

dobimo povezavo

$$\langle e^{-\beta W}\rangle = \frac{1}{Z(A)} \int \mathrm{d}\Gamma_0 e^{-\beta\mathcal{H}(\Gamma_\tau;B)} \tag{6}$$

Sedaj lahko uvedemo kanonično substitucijo spremenljivk $\Gamma_0 \to \Gamma_\tau$ in upoštevamo Liouvillov izrek o invariantnosti mere pri kanoničnih transformacijah. Pridemo do enakosti

$$\langle e^{-\beta W}\rangle = \frac{1}{Z(A)} \int \mathrm{d}\Gamma_\tau e^{-\beta\mathcal{H}(\Gamma_\tau;B)} = \frac{Z(B)}{Z(A)} = e^{-\beta\Delta F} \tag{7}$$

# 3 Simulacija

Enakosti sem preveril tudi numerično, in sicer na dvodimenzionalnem Isingovem modelu. Zunanje magnetno polje $h$ sem linearno povečeval od vrednosti 0 do končne vrednosti $H$ po času $\tau$. Pri takšni spremembi sistem prejme delo

$$W = -\int_0^H M \, \mathrm{d}H = -\frac{H}{\tau}\int_0^\tau M(t)\, \mathrm{d}t \tag{8}$$

kjer je $M(t) = \sum_i S_i(t)$ magnetizacija sistema.

Za simulacijo sem uporabil Metropolisov algoritem, za vsako kombinacijo parametrov ($\beta$, $H$ in $\tau$) pa sem simulacijo ponovil 100000-krat.

TODO: Tukaj pride rezultat za majhno beto $\Rightarrow$ paramagnetno stanje

V vseh primerih je porazdelitev približno Gaussova. Za takšno porazdelitev je sprememba proste energije enaka

$$\Delta F = \langle W\rangle - \frac{\beta}{2}\theta \tag{9}$$

kjer sta $\langle W\rangle$ in $\theta$ povprečna vrednost in širina porazdelitve. Rezultati kažejo, da $\Delta F$ ni odvisna od izbire časa $\tau$, ampak le od končne vrednosti $H$.