

Véletlen fizikai folyamatok, ötödik házi feladat

Horváth Bendegúz

2018. március 19.

1. feladat

A feladat szövege

Vizsgáljuk az előadáson tárgyalt 2 Ising spinből álló rendszer relaxációjának problémáját! Az előadáson megkaptuk a rendszer dinamikai mátrixát, s meghatároztuk a sajátvektorokat és a megfelelő sajátértékeket (A számolás megtalálható a kurzus honlapján "Ising spinek dinamikája" cím alatt is).

(i) Ismerve az összes sajátvektort és sajátértékeket, határozzuk meg milyen valószínűséggel van a rendszer t időpontban az $s_1 = -1$, $s_2 = +1$ állapotban, ha a kezdeti állapot $s_1 = +1, s_2 = -1$ volt.

(ii) Számítsuk ki a rendszer átlagos mágnesezettségének $[M(t) = \langle (s_1 + s_2) \rangle]$ időfejlődését, ha a kezdeti állapotban az $s_1 = 1$, $s_2 = 1$ állapot és az $s_1 = -1$, $s_2 = +1$ állapot is $1/2$ valószínűséggel van jelen.

A feladat megoldása

(i) A sajátvektorokat és a sajátértékeket ismerjük, ezzel a tudással egy állapot valószínűségét így számolhatjuk ki:

$$\vec{P}(t) = P^{(e)}(t) + \sum_{i=2}^4 a_i e^{\lambda_i t} \vec{P}^{(i)}$$

az a_i együtthatókat a kezdeti feltételekből számolhatjuk, ami esetünkben ($\uparrow\downarrow$) állapot. A sajátvektorok a következők:

$$\vec{P}^{(e)} = \frac{1}{2(e^K + e^{-K})} \begin{pmatrix} e^K \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^K \end{pmatrix} \quad \vec{P}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{P}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{P}^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

A sajátértékek pedig $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = -2(1 + e^{-2K})$, $\lambda_3 = -2e^{-K}$ és $\lambda_4 = -2$. Itt a K értékek az előadáson használt jelölés, $K = \beta J$, $\beta = 1/k_b T$. A kezdeti feltétel:

$$\vec{P}(t=0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{P}^{(e)} + \sum_{i=2}^4 a_i \vec{P}^{(i)}.$$

Ezeből a kövekező egyenleteket kapjuk az a_i együtthatókra:

$$\frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})} + a_2 + a_3 = 0 \quad (1)$$

$$\frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} - a_2 + a_4 = 0 \quad (2)$$

$$\frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} - a_2 - a_4 = 1 \quad (3)$$

$$\frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})} + a_2 - a_3 = 0 \quad (4)$$

Kivonva az (1)-ből a (4)-est, $a_3 = 0$. Ezt behelyettesítve az (1)-esbe, $a_2 = -\frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})}$. A (2)-ből a (3)-ast kivonva $a_4 = -0.5$.

Most összegezzük fel a végeredményt, de mi a \vec{P} -nek csak a második komponensére vagyunk kíváncsiak:

$$\vec{P}(\downarrow\uparrow, t) = \frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} + \frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} \cdot e^{-2(1+e^{-2K})t} - \frac{1}{2}e^{-2t}$$

Így ez lett a keresett valószínűség.

(ii) Hasonló módon kell csinálni a mágnesezettséggel is:

$$M(t) = \langle (s_1 + s_2) \rangle = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} (s_1 + s_2) P(s_1, s_2, t)$$

A kezdeti feltétel most $\vec{P}(t=0) = (1/2, 0, 0, 1/2)$. Erre a következő egyenletek adódnak:

$$\frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})} + a_2 + a_3 = \frac{1}{2} \quad (5)$$

$$\frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} - a_2 + a_4 = 0 \quad (6)$$

$$\frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} - a_2 - a_4 = 0 \quad (7)$$

$$\frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})} + a_2 - a_3 = \frac{1}{2} \quad (8)$$

Hasonlóan az előzőekhez, (5)-ből kivonva (6)-ost kapjuk, hogy $a_3 = \frac{1}{2}$. visszahelyettesítve az (5)-be, $a_2 = -\frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})}$, a (6)-osból kivonva a (7)-est $a_4 = 0$ -t kapunk. Így megkaphatjuk a $\vec{P}(t)$ -t:

$$\vec{P}(t) = \frac{1}{2(e^K + e^{-K})} \begin{pmatrix} e^K \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^K \end{pmatrix} + \frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} \cdot e^{-2(1+e^{-2K})t} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}e^{-2e^{-K}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Az $M(t)$ -re felírt egyenletben az $s_1 + s_2 = 0$ résznél kiesnek az $\uparrow\downarrow$ és $\downarrow\uparrow$ állapotok, megmaradnak viszont az $\uparrow\uparrow$ és $\downarrow\downarrow$ állapotok. Így a mágnesezettség:

$$M(t) = 2 \cdot \left(\frac{1}{2(e^K + e^{-K})} e^K + \frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})} \cdot e^{-2(1+e^{-2K})t} + \frac{1}{2} e^{-2e^{-K}t} \right) - \dots$$

a $\vec{P}(t)$ -re kapott összegből az első kettő tagnak a vektorainak az első és negyedik komponens ugyanaz, így azok kiejtik egymást, marad az utolsó tag:

$$M(t) = 2 \cdot \frac{1}{2} e^{-2e^{-K}t} - (-2) \cdot \frac{1}{2} e^{-2e^{-K}t} = 2 \cdot e^{-2e^{-K}t}$$

2. feladat

A feladat szövege

Egy háromszögön egy részecske ugrál a szomszédos csúcsok között. Az ugrás rátája w_1 az óramutatójárásával egy irányban és w_2 az ellenkezőirányban. Feladatok:

Írjuk fel a master egyenletet az i -edik csúcsban tartózkodás valószínűségére!

Határozzuk meg a stacionáris megoldást!

Határozzuk meg a rendszer relaxációs idejét (először próbáljuk megbecsülni az értékét)!

A feladat megoldása

$i \in \{1, 2, 3\}$, így az egyenletrendszerünk a következő:

$$\partial_t P_1 = -(w_1 + w_2)P_1 + w_2 P_2 + w_1 P_3$$

$$\partial_t P_2 = -(w_1 + w_2)P_2 + w_2 P_3 + w_1 P_1$$

$$\partial_t P_3 = -(w_1 + w_2)P_3 + w_2 P_1 + w_1 P_2$$

A következő átmeneti mátrixot használom majd:

$$\underline{\underline{\alpha}} = \begin{pmatrix} -(w_1 + w_2) & w_2 & w_1 \\ w_1 & -(w_1 + w_2) & w_2 \\ w_2 & w_1 & -(w_1 + w_2) \end{pmatrix}$$

Így a következő sajátértékegyenletet írhatjuk fel:

$$\partial_t \vec{P} = \underline{\underline{\alpha}} \vec{P},$$

$\vec{P} = (P_1, P_2, P_3)$ jelöléssel. Stacionárius állapotban az egyenlet baloldala nulla, a 0-ás sajátértékhez tartozó sajátvektor a megoldásunk.

$$0 \vec{P} = \underline{\underline{\alpha}}_0 \vec{P}.$$

A homogén, lineáris egyenletrendszer túlhatározott, így kell mellékfeltételként: $\sum_{i=1}^3 P_i = 1$ és $P_i > 0$. A következő vektor kielégíti az egyenleteket:

$$\vec{P} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3(w_1 + w_2)} \\ \frac{1}{3(w_1 + w_2)} \\ \frac{1}{3(w_1 + w_2)} \end{pmatrix}$$

A rendszer szimmetrikussága miatt nem meglepő a stacionárius állapotra kapott eredmény. ($\vec{P} = 1/3(1, 1, 1)$), mert $w_1 + w_2 = 1$. Relaxációs idő számolásához ismét felírhatjuk a sajátérték egyenletet, de most általános esetben oldjuk meg:

$$\partial_t \vec{P}_\alpha = \lambda_\alpha \vec{P}_\alpha,$$

ahol λ_α az α -adik sajátértéke. A megoldást kereshetjük a következő alakban:

$$\vec{P}_\alpha(t) = a_\alpha e^{-\lambda_\alpha \frac{t}{\tau}} \vec{P}_\alpha$$

A relaxációs idő pedig $\tau_{relax} = \frac{\tau}{|\lambda_{min}|}$, ha τ időközönként van átmenet. Megoldva a sajátértékegyenletet, a következő egyenletet kapjuk λ -ra:

$$\lambda_{1,2} = \frac{-3(w_1 + w_2) \pm \sqrt{12 \cdot w_1 w_2 - 3(w_1 + w_2)^2}}{2}$$

$$\lambda_{min} = \frac{-3(w_1 + w_2) - \sqrt{12 w_1 w_2 - 3(w_1 + w_2)^2}}{2}$$

És így:

$$\tau_{relax} = \frac{2\tau}{3(w_1 + w_2) + \sqrt{12 w_1 w_2 - 3(w_1 + w_2)^2}}$$

. Esetünkben két felé léphet a részecske, $w_1 + w_2 = 1$, így kicsit szebben is lehet írni:

$$\tau_{relax} \frac{2\tau}{3 + \sqrt{12 w_1 w_2 - 3}}$$

3. feladat

A feladat szövege

Meredek hegyoldalban függőleges l távolságra vannak a kapaszkodók. A hegymászó w rátával lép felfelé, s w_0 annak a rátája, hogy lecsúszik egy szintet, s onnan folytatja a mászást. Feladatok:

- (i) Irjuk fel az egyenletet, amely meghatározza, hogy a hegymászó milyen P_n valószínűséggel van nl magasságban!
- (ii) Használjuk a generátorfüggvény formalizmust a stacionárius eloszlás kiszámítására!
- (iii) Határozzuk meg, hogy átlagosan milyen magasra jut a hegymászó!

A feladat megoldása

A master egyenlet az nl magasságban tartózkodás valószínűsége a következőképpen néz ki:

$$\partial_t P_n = -(w + w_0)P_n + w_0 P_{n+1} + w P_{n-1},$$

$n = 0$ esetben viszont:

$$\partial_t P_0 = -w P_0 + w_0 P_1$$

Legyen

$$q = \frac{w}{w_0} \text{ és } \tau = \frac{1}{w_0}.$$

Így az egyenletek:

$$\begin{aligned}\tau \partial_t P_n &= -(q + 1)P_n + P_{n+1} + q P_{n-1} \\ \tau \partial_t P_0 &= -q P_0 + P_1.\end{aligned}$$

Alkalmazva a generátorfüggvény formalizmusát:

$$\tau \partial_t G(s, t) = \sum_{n=0} e^{-sn} P_n = -q P_0 + P_1 + \sum_{n=1} \left[-(1 + q) e^{-sn} P_n + q e^{-sn} P_{n-1} + e^{-sn} P_{n+1} \right]$$

A jobboldali tagban a szummában lévő utolsó tagot a következő alakra lehet hozni:

$$\sum_{n=1} e^{-sn} P_{n+1} = e^s \sum_{n=1} e^{-s(n+1)} P_{n+1} = e^s \sum_{m=2} e^{-sm} P_m.$$

Az utolsó előtti tagot:

$$q \sum_{n=1} e^{-sn} P_{n-1} = q e^{-s} \sum_{n=1} e^{-s(n-1)} P_{n-1} = q e^{-s} \sum_{m=0} P_m.$$

Kiegészítve a P_0 -s tagokkal a szummás részt átírva generátorfüggvényekre:

$$\tau \partial_t G(s, t) = (1 - e^{-s}) P_0 + [-1 - q + q e^{-s} + e^s] G(s, t)$$

A stacionárius megoldás kiszámításánál az időszerinti parciális derivált 0, így

$$G_e(s) = \frac{(1 - e^{-s}) P_0}{1 - e^s + q - q e^{-s}} = \frac{P_0}{1 - q e^{-s}}$$

$G(s = 0) = 1$ feltétel miatt $P_0 = 1 - q$. Milyen magasra jut a hegymászó átlagosan? A várhatóértéket a generátor függvényekkel a következő módon számolhatjuk:

$$\langle n \rangle = -\partial_s G_e|_{s=0}$$

Így a deriválás után:

$$\langle n \rangle = -\frac{(1-q)qe^{-s}}{(1-qe^{-s})^2}\bigg|_{s=0} = \frac{q}{1-q} = \frac{\frac{w}{w_0}}{1-\frac{w}{w_0}} = \frac{w}{w_0 - w}.$$

ebből az látszik, hogy ahhoz, hogy $\langle n \rangle$ pozitív legyen w -nek kisebbnek kell lennie mint w_0 , ami nem egyezik a fizikai képpel, felfelé jutási rátának nagyobbnak kéne lennie. Ez valószínűleg abból fakad, hogy egyenúlyi állapotra vonatkozik, a hegymászonak pedig az egyensúlyi állapot a hegy tetején lenne, oda igyekszik. mászását pedig úgy képzelhetjük el, mint ahogy az előző házfeladatban a részecske beért a nullapontba. Ha a magasságot, amit átlagosan elér n lépés után a következő módon számoljuk:

$$\langle n \cdot l \rangle = l \cdot n(w - w_0),$$

fizikaibb képet kapunk.