

1. FELADAT

K: Határozzuk meg Monte Carlo szimuláció segítségével az origóhoz gumiszállal kötött, T hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban levő részecske egyensúlyi tulajdonságait. A részecske egydimenziós rácson ugrál, energiája az állapotát meghatározó koordinátán keresztül (a hosszúságú ugrásokat feltételezünk; $x = -\infty, \dots, -a, 0, a, \dots, na, \dots \infty$) a következőképpen fejezhető ki:

$$U(n) = \frac{1}{2}k(an)^2$$

ahol k a gumiszál rugóállandója. Válasszunk ugrási rátának olyan alakot, ami kielégíti a részletes egyensúly elvét. Ilyen lesz például a következő kifejezés:

$$w(n \rightarrow n \pm 1) = \begin{cases} 1 & \text{ha } \Delta E < 0 \\ e^{-\beta \Delta E} & \text{ha } \Delta E > 0 \end{cases}$$

ahol

$$\Delta E = \frac{1}{2}ka^2 \cdot [(n \pm 1)^2 - n^2]$$

Indítsuk a részecskét az origóból (az egyensúlyi átlagok nem függhetnek a kezdeti feltételtől, tehát eredményeink helyességét ellenőrizhetjük azzal, hogy az origótól távolabb indítjuk a részecskét, s megnézzük ugyanazt kapjuk-e). A szimulálás a következő lépésekből áll:

1. Véletlenszerűen kiválasztunk egy irányt.
2. Megnézzük, hogy ha az adott irányba lép a részecske, akkor mennyit változik a rendszer energiája, azaz kiszámítjuk ΔE -t.
3. Ha $\Delta E < 0$, akkor megtesszük a lépést.
4. Ha $\Delta E > 0$, akkor húzunk egy véletlen számot P -t a $[0, 1]$ intervallumból, s ha $P < e^{-\beta \Delta E}$, akkor megtesszük a lépést, egyébként pedig megyünk az (1)-es ponthoz.

Az (1)-(4) pontokat sokszor, N -szer elvégezve azt mondjuk, hogy $t = N \cdot \tau_0$ idő telt el. Egy rendszernek van általában egy relaxációs ideje, τ , s ha $t > \tau$, akkor a rendszer elérkezik az egyensúlyba, s attól kezdve a különböző mennyiségek, mint például a részecske koordinátájának átlagos értéke

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{\infty} an_k$$

vagy a koordináta fluktuációja, $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, az egyensúlyi értéke körül fluktuál. Az egyensúlyi átlagokat tehát kiszámíthatjuk, mint időátlagokat. Ez azt jelenti, hogy t_1 időnként kiszámítjuk (megmérjük) az x és az x^2 értékét, majd elég sok ilyen mérésből átlagokat számolunk, s ezek megadják a T hőmérsékleti termodinamikai átlagokat, $\langle x \rangle$ -t és $\langle x^2 \rangle$ -t.

Határozzuk meg az $\langle x \rangle = a \cdot \langle n \rangle$, $\langle x^2 \rangle = a^2 \cdot \langle n^2 \rangle$ átlagokat az alábbiakban megadott egyéni βka^2 értékeknek megfelelő hőmérsékleteken! Értelmezzük az eredményt! Határozzuk meg, hogy egyensúlyban hogy néz ki a $P_n^{(e)}$ eloszlásfüggvény! Ismerjük egzaktul a $P_n^{(e)}$ eloszlásfüggvényt?

MEGOLDÁS

A szimuláció kezdőfeltételei

A szimulációban mindenki számára adott volt négy darab kezdeti $A = \beta ka^2$ érték, melyeket a kezdőfeltételek megadásához kellett felhasználnunk. Ebben $\beta = \frac{1}{k_B T}$, tehát a rendszer hőmérséklete által meghatározott karakterisztikus mennyiség, míg k a gumiszalag rugóállandója, a pedig a rácsállandó volt. Mivel a számításokban több helyen is külön használtam β -t, így megadtam pár tetszőleges a és k értékek kezdetben, melyekből $\beta = \frac{A}{ka^2}$ már meghatározható volt.

Olyan értékeket választottam k és a számára, melyek a valódi anyagokkal (pl. egy kristályos anyag rácsállandójával) összemérhető nagyságrendű, valamint hogy $T = (k_B \beta)^{-1} = (k_B \frac{A}{ka^2})^{-1}$ is érdekes (és értelmes) mérettartományban legyen. Így a számomra megadott $\beta ka^2 = \{0.06, 0.24, 0.52, 1.35\}$ értékeket felhasználva a rácsállandót $a = 5 \cdot 10^{-10}$, míg a rugóállandót $k = 10^{-3}$ méretűnek választottam. Ekkor az általam vizsgált rendszerek a felsorolt βka^2 értékeinek megfelelően rendre $T = \{301.790 \text{ K}, 75.448 \text{ K}, 34.822 \text{ K}, 13.413 \text{ K}\}$ hőmérsékletűek voltak.

A számítások során a részecskével pontosan 10 000 (tízezer) lépést tettem meg, minden további eredmény erre a feltételre vonatkozik.

A részecske időbeli mozgása

Első lépésben azt vizsgáltam meg, hogy a megadott β különböző értékeire az $n(t)$ és $E(t)$ mennyiségek időfüggése hogyan viselkedik. Ezeket az (1)-es és (2)-es képeken ábrázoltam. Ezekről tisztán látszik, hogy a rendszer minden hőmérsékleten szinte maximális gyorsasággal az egyensúlyi állapot felé halad, majd miután elérte azt, a továbbiakban akörül oszcillál. Különböző kezdeti energiaszintek esetén a rendszer szintén ugyanígy működik. A (3)-as és (4)-es ábrákon adott hőmérsékleten, de 25 db különböző $x(t=0)$ kezdőpont esetében figyeltem a rendszer időfejlődését. Minden esetben pontosan ugyanazt a folyamatot figyelhettem meg, mint ami az előbb leírtakban is szerepel. A részecske erőteljesen törekszik az erőmentes állapot felé haladni, majd miután elérte azt, akörül oszcillál, melynek nagyságrendje független a kezdőpozíciótól.

Az várható értékek diszkussziója

A továbbiakban az $\langle n \rangle$, $\langle n^2 \rangle$ és a belőle konstans szorzással kapható $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, valamint az ezekről valamivel eltérő képű $\langle E \rangle$ és $\langle E^2 \rangle$ mennyiségeket vizsgáltam. Az ezeket bemutató grafikonokat a (5)-ös, (6)-os és (7)-es képeken ábrázoltam.

Hosszú idő után az összes várható érték az ábrákon is látható módon a 0-hoz konvergál. Ez érthető, hisz eleve azt várjuk, hogy a rendszer az egyensúly felé törekszik, majd akörül véletlenszerűen oszcillál. Ezen oszcillációk várható értéke mindig 0, melyek az idő előrehaladtával egyre nagyobb és nagyobb súllyal szólnak bele a $t = 0$ utáni értékek átlagának alakulásába. Utolsóként az $\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$ és $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ értékeket vizsgáltam, melyek jól leírják a rendszer relaxációs folyamatát, melyet a (8)-as képen ábrázoltam. Megfigyelve a görbét - miután elért egy bizonyos τ relaxációs időt - ránézésre is egy $e^{-f(z)}$ függvényhez hasonlít, ahol a várható értékek számításához felhasznált mennyiségek alapján $f(z) \equiv f(\beta, E_n, t)$. Ebben β és ΔE a görbe paramétereiként funkcionálnak, míg t függés egy folyamatos időfejlődést határoz meg. Ez a folyamat láthatóan $t = \infty$ időpontban eléri a nullát, ugyanis $e^{-f(z)} \rightarrow 0$ az idővel láthatóan is arányosan csökkenő értéke miatt.

A $P_n^{(e)}$ mennyiség alakja

Az előző házi feladat alapján[1] felírhatjuk a rendszer Master-egyenletét az egyensúlyi pozícióban a következő módon:

$$\frac{\partial P_n^{(e)}}{\partial t} = - \sum_{n'} w_{n'n} P_n^{(e)}(t) + \sum_{n'} w_{nn'} P_{n'}^{(e)}(t) = 0 \quad (1)$$

Tehát egyensúlyban a rendszer stacionárius. Itt $w_{n'n}$ és $w_{nn'}$ az energiaszintek közötti átmeneti rátákat jelöli. Keressük azt a $P_n^{(e)} = \frac{1}{z} e^{-\beta E_n}$ függvényt, ami ténylegesen a fenti Master-egyenlet stacionárius megoldásával egyenlő. Szintén az előző házi feladat megoldásában[1] megfogalmazottak alapján azt mondhatjuk, hogy a következő alak kielégíti az előbbieken megfogalmazott kritériumot:

$$w_{nn'} P_{n'}^{(e)} = w_{n'n} P_n^{(e)} \quad (2)$$

Amit *részletes egyensúly elvének* nevezünk. Ennek segítségével fel tudjuk írni a w és P értékek arányait, melyek közül a w értékek a feladat kiírásából ismertek:

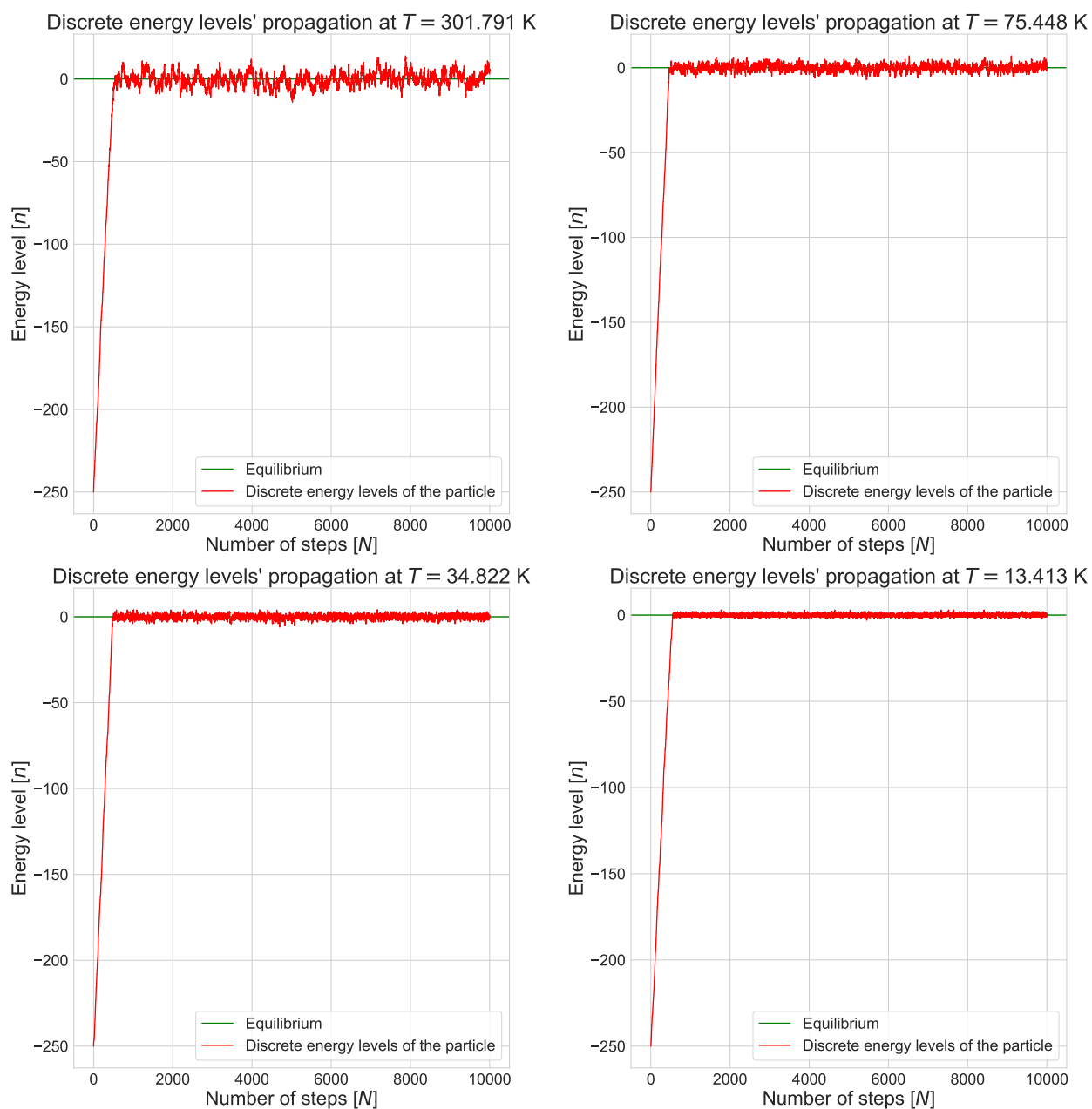
$$\frac{w_{nn'}}{w_{n'n}} = \frac{P_n^{(e)}}{P_{n'}^{(e)}} = \frac{\frac{1}{z} e^{-\beta E_n}}{\frac{1}{z} e^{-\beta E_{n'}}} = \frac{e^{-\beta E_n}}{e^{-\beta E_{n'}}} = \frac{e^{-\beta(E_n - E_{n'})}}{1} = \frac{e^{\beta(E_{n'} - E_n)}}{1} \quad (3)$$

Így azt mondhatjuk, hogy igen a $P_n^{(e)}$ eloszlás ismert, és a következő módon írható fel:

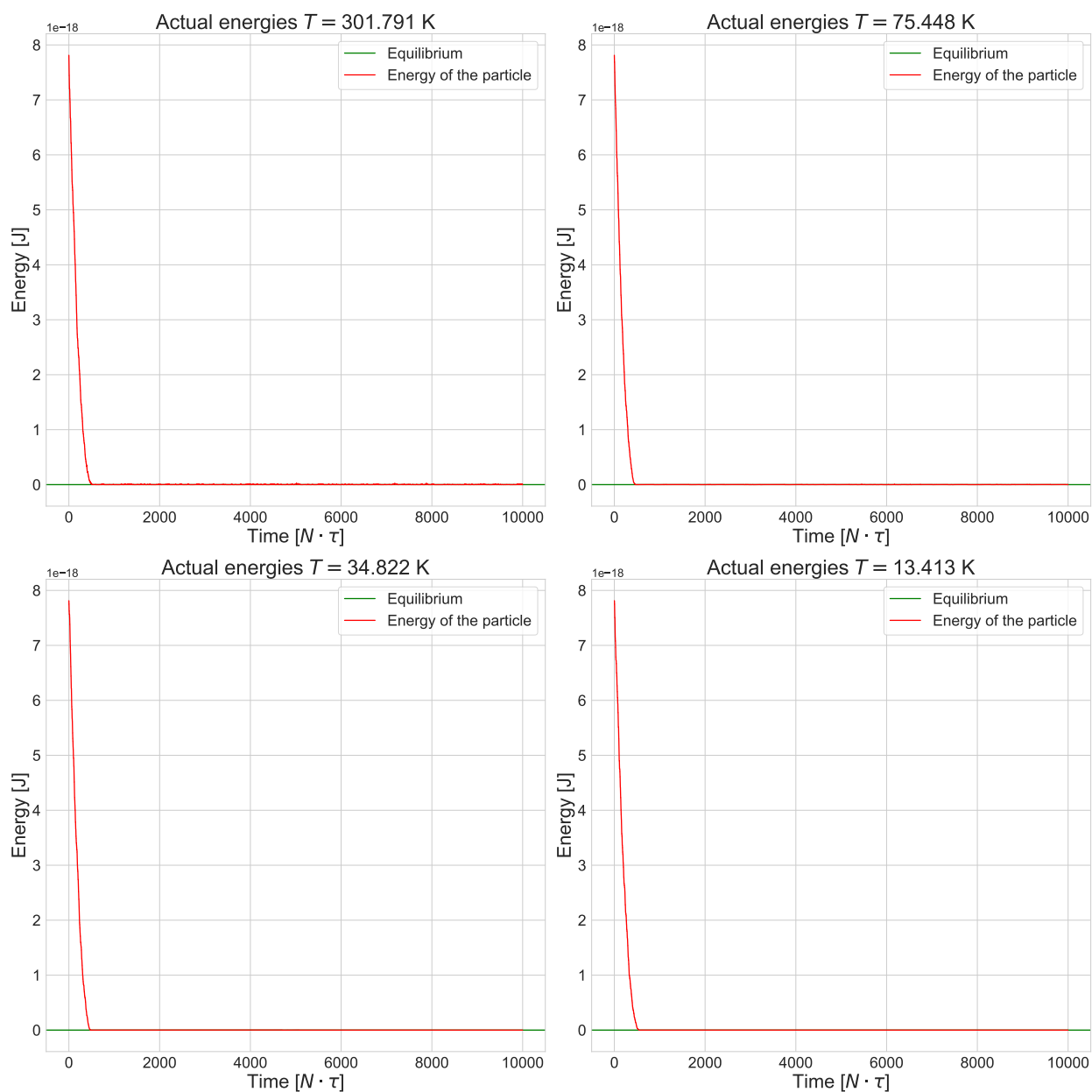
$$P_n^{(e)} = e^{\beta(E_{n'} - E_n)} \quad (4)$$

Felhasznált irodalom

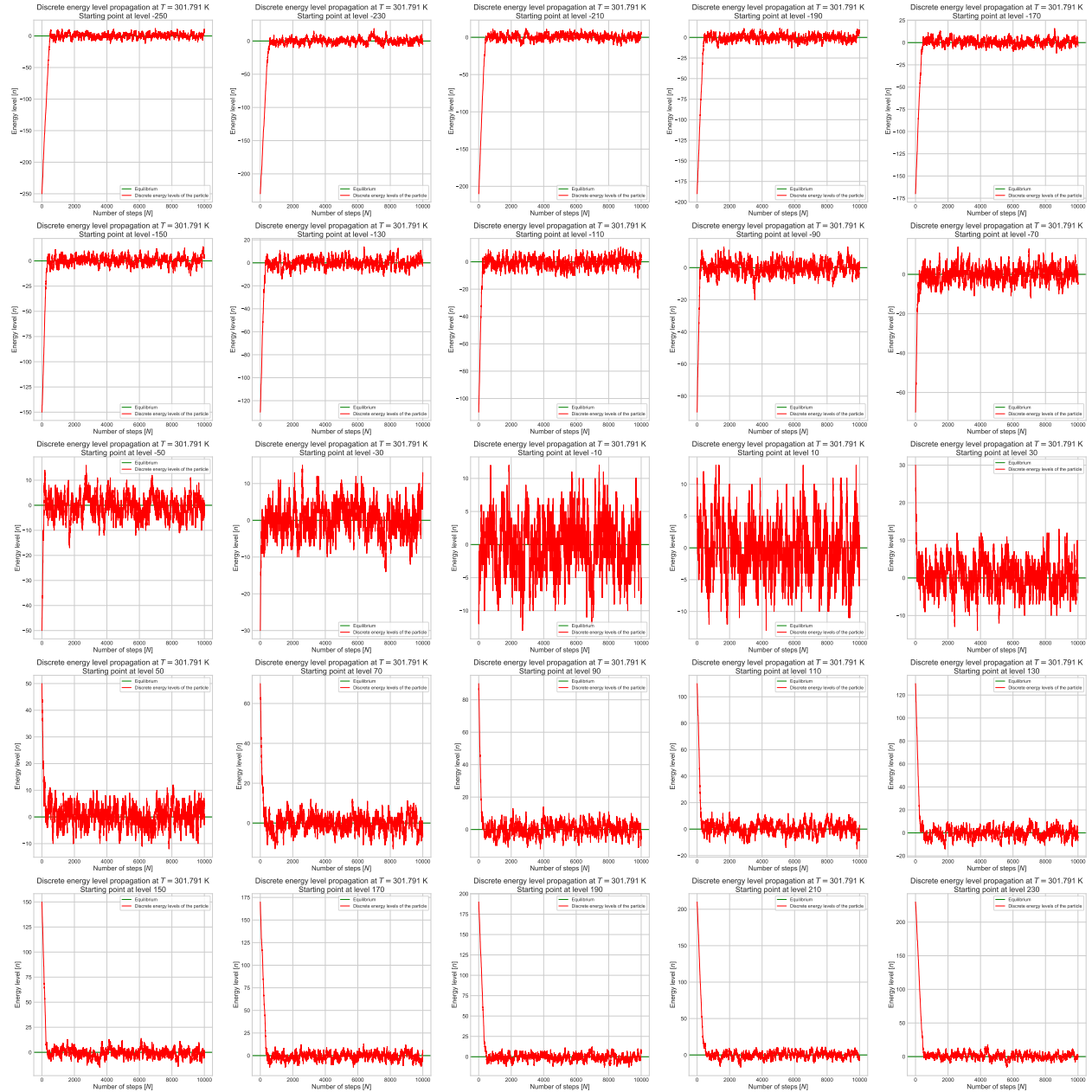
- [1] Pál Balázs. *ELTE Stochastic Processes 2019 — GitHub*. [Online; accessed March 13, 2019]. 2019. URL: https://github.com/masterdesky/ELTE_Stochastic_processes_2019/.



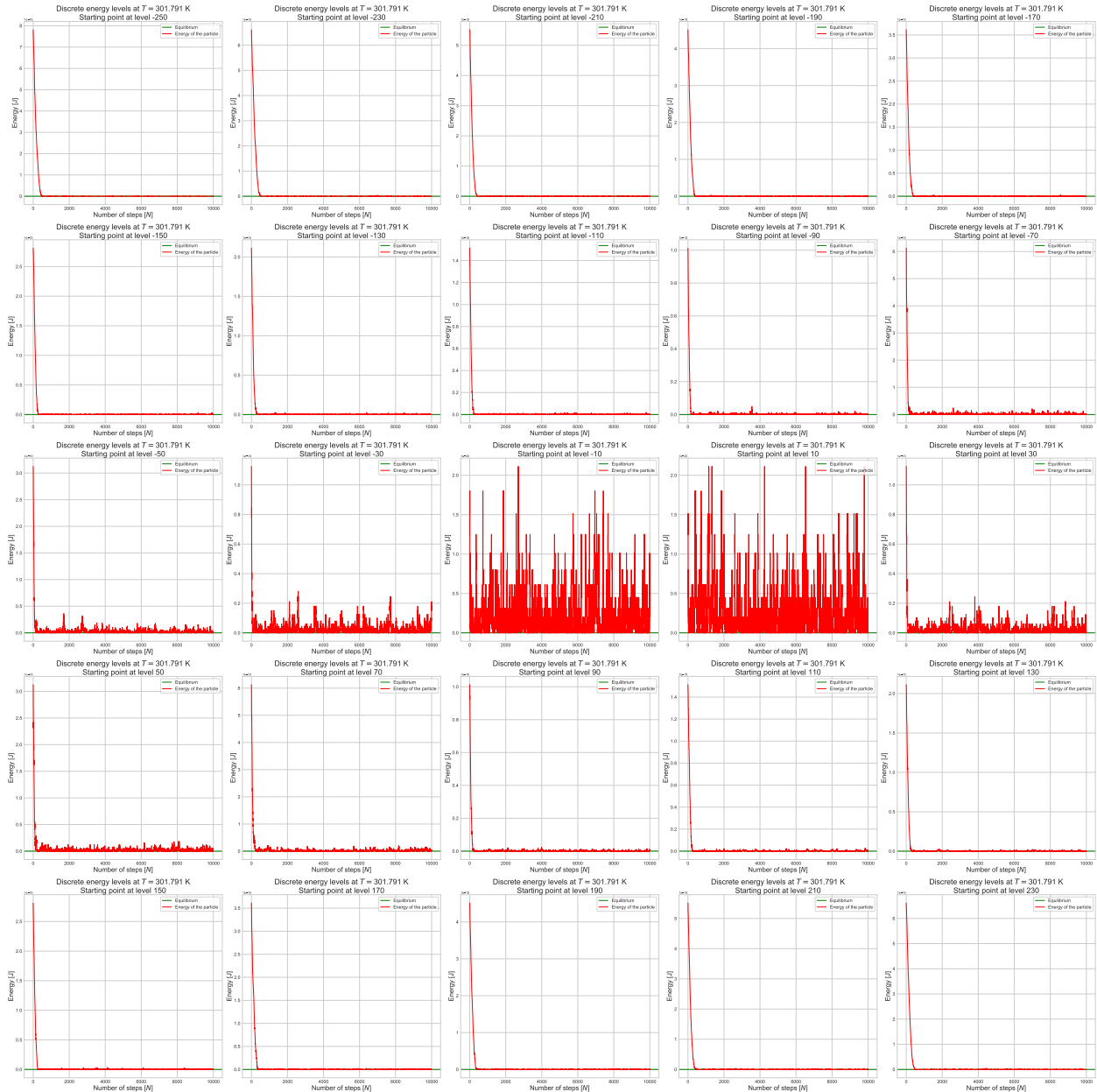
1. ábra. The particle's jumps between discrete energy levels respect to time



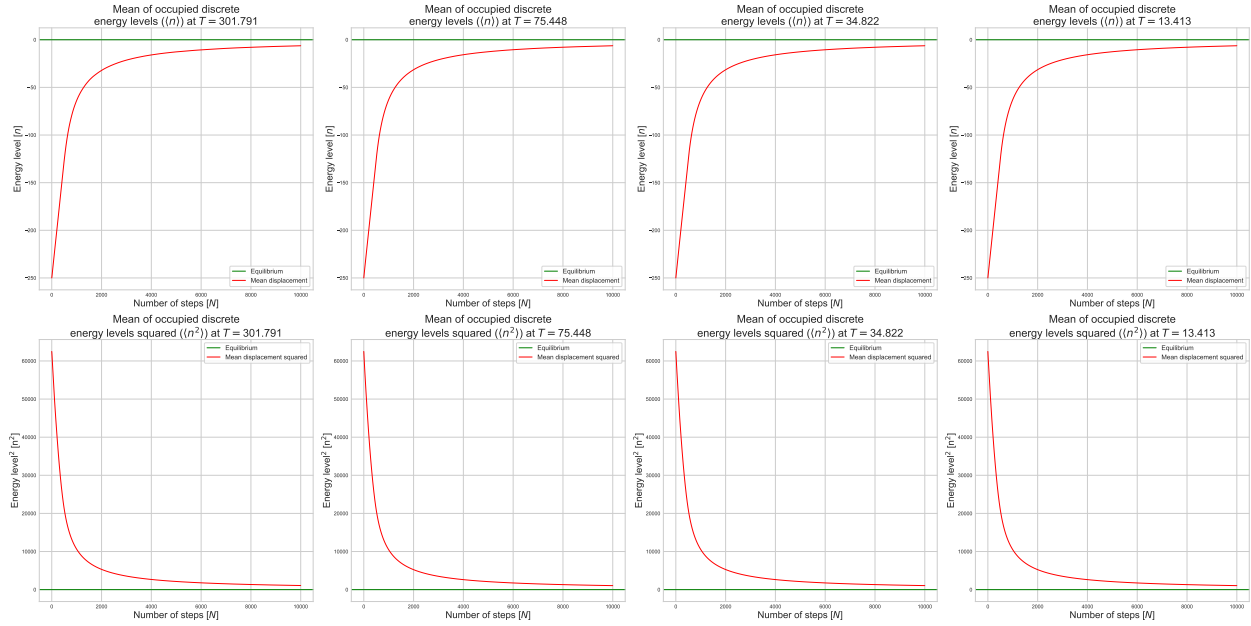
2. ábra. Changes in the actual energies during the particle's propagation



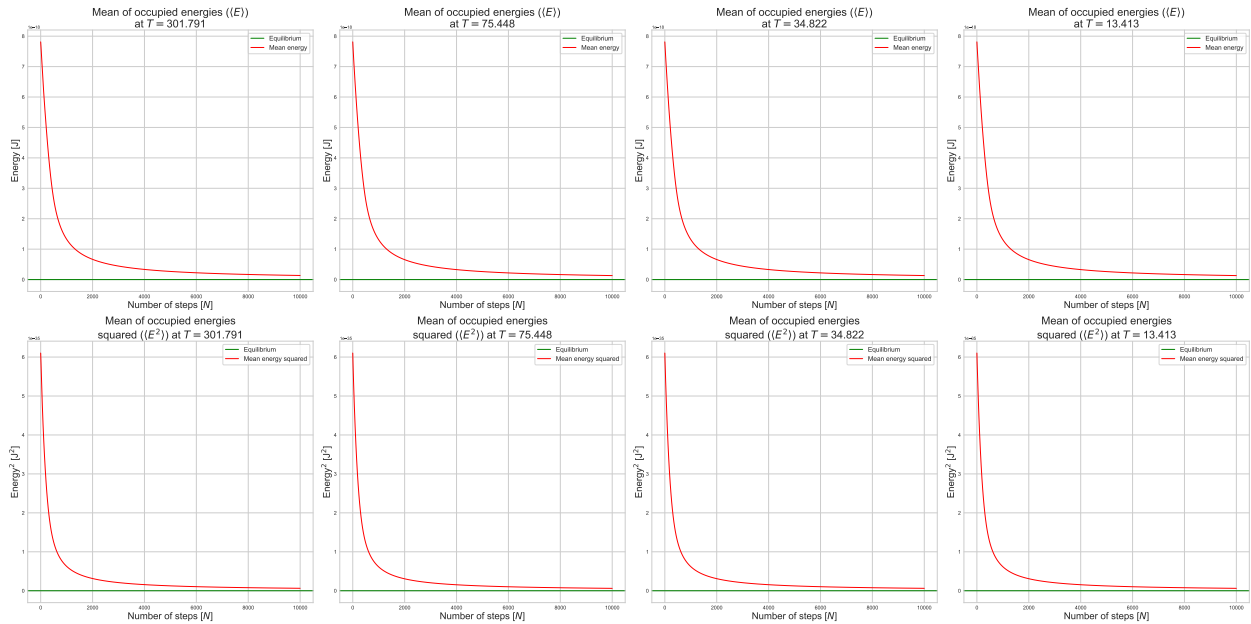
3. ábra. The particle's jumps between discrete energy levels respect to time for 25 different $x(t=0)$ starting points



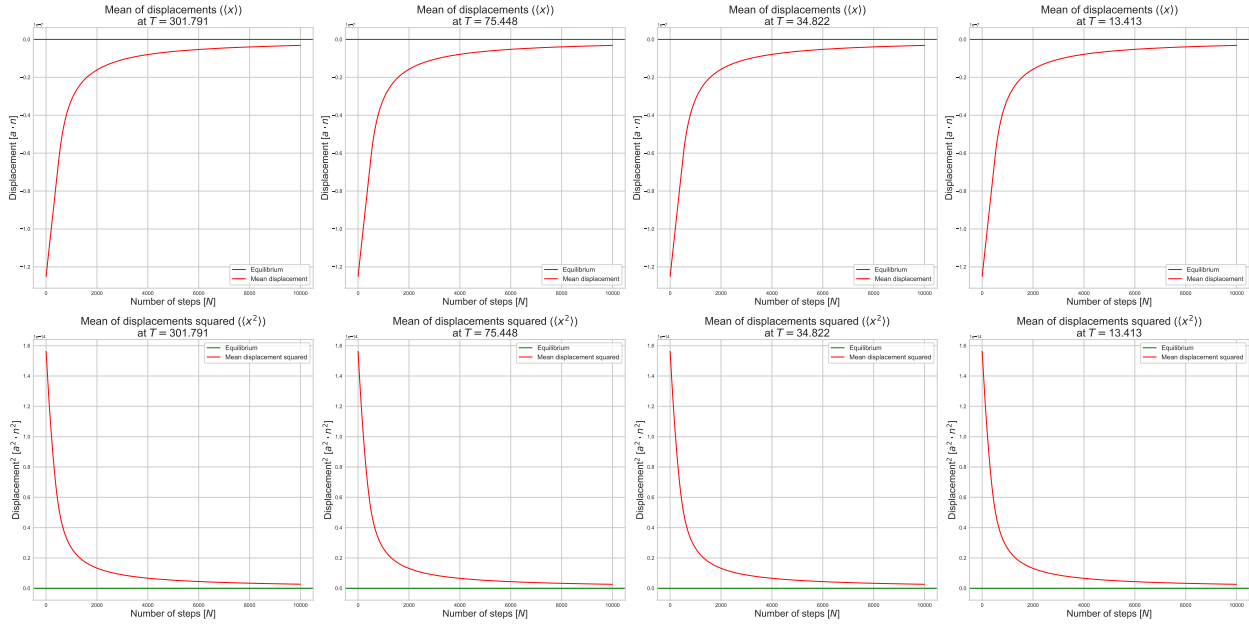
4. ábra. Changes in the actual energies during the particle's propagation for 25 different $x(t=0)$ starting points



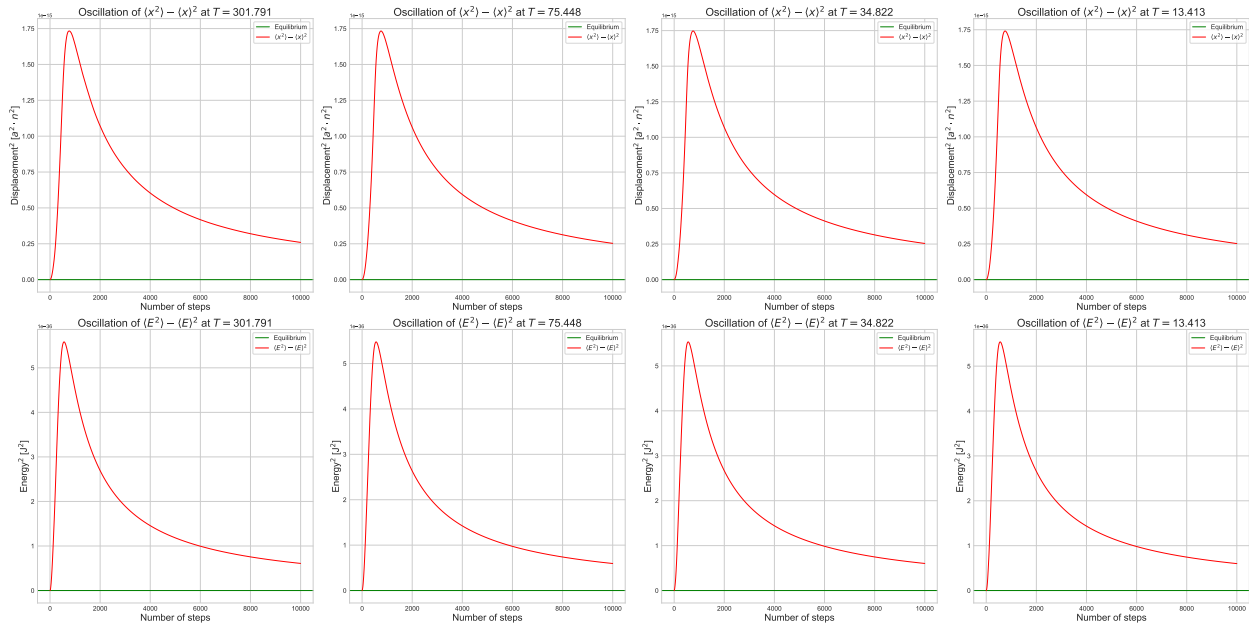
5. ábra. Mean of the indeces of the occupied energy levels, when the particle starts its propagation from the $x = -250$ point



6. ábra. Mean of the occupied energies, when the particle starts its propagation from the $x(t = 0) = -250$ point



7. ábra. Mean of the distances of the particle from the $x = 0$ grid point, when the particle starts its propagation from the $x(t = 0) = -250$ point



8. ábra. Oscillation of $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ and $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$, when the particle starts its propagation from the $x(t = 0) = -250$ point