Eötvös Loránd Tudományegyetem

Véletlen fizikai folyamatok

Előadás 2012/2013

Szerző:
Vida Ádám
Molnár Dávid

Oktató:
Rácz Zoltán

Tartalomjegyzék

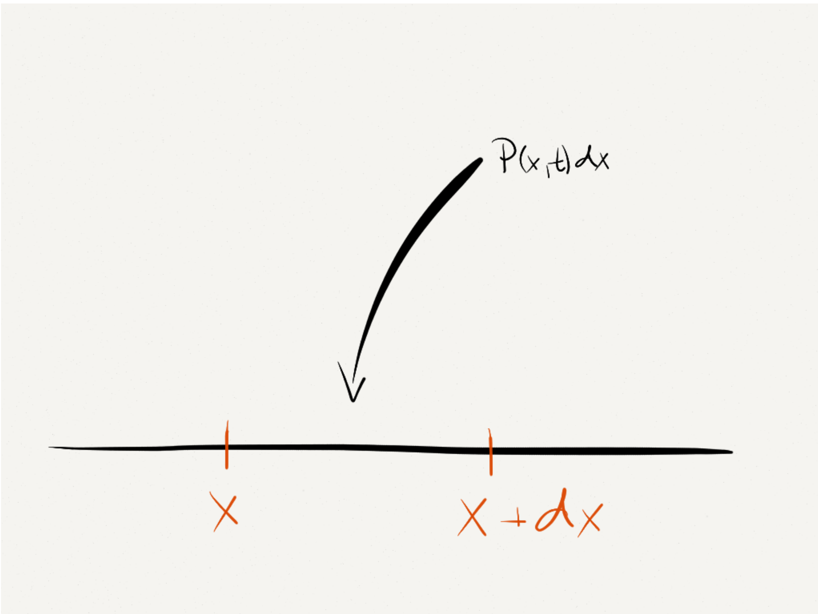
1. Brown mozgás: Einstein levezetése

Robert Brown 1827-ben felfigyelt arra, hogy a pollenszemek a vízben mozgást végeznek. Eleinte arra gyanakodott, hogy a virágpor élőlény, mely evez a vízben. Ezen ötletét azonban elvetette, miután a homokkal és más, élettelen porokkal is hasonlókat tapasztalt. Az elméleti magyarázatot elsőként Albert Einstein adta meg, miszerint a pollent (mint nagy golyót) a vízmolekulák (mint kis golyók) időnként megütik, különböző irányból, emiatt tapasztalható az ide-oda mozgás. Erre a fizika képre kellett ráhúzni a matematikát, így Einstein kijelentette a következőket:

1. A pollenek függetlenül mozognak egymástól.

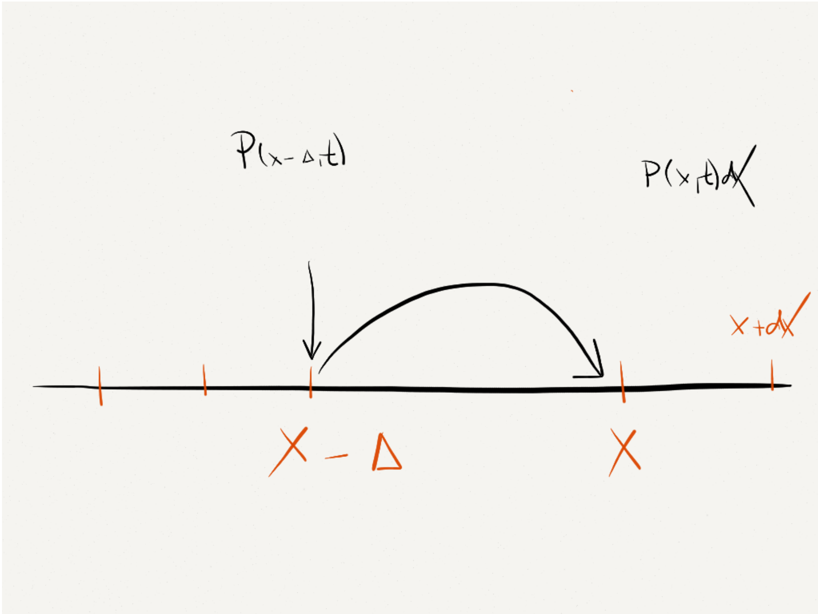
2. τ idő, ami jóval kisebb, mint a megfigyelési idő, ugyanakkor elég hosszú, hogy a golyó (pollen) csak 1 vízmolekulával lépjen kapcsolatba. A következő τ időben az előzőtől függetlenül mozog a pollen, ergo τ időszakokra osztom az időfejlődést, amiben a következő lépés független az előzőtől.

3. Einstein azt mondja, hogy a pollenek dinamikáját valószínűségi leírással fogjuk megérteni.



1. ábra. A részecske helyére csak valószínűségi állítások tehetők P(x) a valószínűségi eloszlásfüggvény.

Mit jelent az 1. ábra? Arról számol be, hogy a részecske az x és $x + dx$ közti részen található. Nekünk erre a P függvényre kell valami egyenletet összehozni. Hogy csináljuk? Tudjuk, hogy τ időnként a részecske Δ-t ugrik. Feltételezzük, hogy van egy $\Phi(\Delta)$, ami



2. ábra. Az $x - \Delta$-ból x-be történő ugrás.

megadja annak a valószínűségét, hogy az ugrás nagysága pont delta volt a tau időn belül.

Einstein azt mondja, hogy a részecske minden ütközéssel elveszíti az impulzusát és egy újjal megy tovább, ami random. Amit mi tudni akarunk, az a $\Phi(\Delta)d\Delta$. Einstein felteszi, hogy a $t+\tau$ állapotot teljesen meghatározza a t állapot. Ezt ma Markov-folyamatnak nevezzük. Azon valószínűségek összege, hogy a részecske $x-\Delta$-ban volt és pont Δ-t ugrik:

$$P(x,t+\tau)dx = \int_{-\infty}^{\infty} P(x-\Delta,t)dx \cdot \Phi(\Delta)d\Delta \tag{1}$$

Az (1) egyenlet a Kolmogorov-Chapman egyenlet (ami a valószínűségszámítás alapegyenlete). Mi nem szeretjük az integrálegyenleteket, ezért sorbafejtjük τ-ban és Δ-ban is, így egy differenciálegyenletet kapunk. A következő sorfejtés a Kramers-Moyal sorfejtés.

$$P(x,t) + \frac{\partial P(x,t)}{\partial t}\tau = P(x,t)\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(\Delta)d\Delta - \frac{\partial P(x,t)}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty}\Delta\Phi(\Delta)d\Delta$$

$$+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}\int_{-\infty}^{\infty}\Delta^2\Phi(\Delta)d\Delta$$

A jobb oldalon el kellett menni a második rendig, hiszen $\Phi(\Delta)$ várhatóan nulla, viszont a második rendben már Δ^2 jelenik meg, aminek az átlaga már $\neq 0$. Szedjük össze mi maradt!

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \tag{2}$$

A (2) típusú egyenletek a Fokker-Planck egyenletek. Később, a mérések fejlődésvel kimérték, hogy az $\overline{r^2} \sim t$, tehát a négyzetes távolság az idővel arányos, tehát a távolság az idő gyökével. Nézzük mi a helyzet, ha kezdeti feltételt is adunk!

$$P(x, t = 0) = \delta(x)$$

A Fokker-Planck egyenletet a fenti kezdeti értékkel kielégítő megoldás a következő:

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

Ezen látszik, hogy normalizált[1] és az is, hogy delta függvény a $t = 0$-ban[2]. Ha leellenőrizzük, látható, hogy kielégíti az integrált is, tehát megoldás. Remek, most már ki lehet számolni az x^2 átlagot is (azért x-szel dolgozunk csak, mert csak 1 dimenzióban vagyunk).

$$\overline{x^2} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x,t)dx = \frac{2Dt}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{\frac{y^2}{2}dy} = 2Dt \tag{3}$$

Ennek az egyenletnek a megoldásánál is ugyanazt helyettesítettük, mint az előbb ($y = x/\sqrt{2Dt}$), csak itt már szerepelt egy x^2 is az integrálban. Ezt mérte ki Perrin (Nobel-díj), lényegében ez volt az egyik bizonyíték arra, hogy atomok léteznek.

1.1. A beadandóhoz

Az utolsó feladatban szó volt arról, hogy alakul a Fokker-Planck egyenlet, ha mondjuk szél fúj a víz felett. Lapozzunk vissza ahhoz a levezetéshez és vegyük figyelembe a kezdei feltételt is (a részecske az origóból indul, azaz ott a $P(x, t = 0) = \delta(x)$. Nézzük most a házit, mi változik!

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\overline{\Delta}}{\tau}\frac{\partial P}{\partial x} + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

Vegyük észre, hogy $v = \frac{\overline{\Delta}}{\tau}$, és így

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v\frac{\partial P}{\partial x} + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \tag{4}$$

Ez szemléletesen azt jelenti, hogy a haraggörbe közepe vt sebességgel halad és közben folyik szét! Jó megoldás átmenni egy vt-vel haladó koordináta-rendszerbe, hiszen ott már csak egy álló haranggörbét kell figyelni. Legyen

$$P(x,t) = \Psi(x - vt, t)$$

[1] Ha kiintegráljuk a teljes tartományra, alkalmas helyettesítéssel egy Gauss integrállá alakítható, amiből már látszik, hogy az értéke 1

[2] Hiszen a Gauss-görbe félértékszélessége $\sim t$-vel, ami $t = 0$ ban egy ponttá megy át, viszont az még mindig normalizált, tehát Dirac-delta lesz.

Helyettesítsük $x - vt$-t z-vel[3]. Ezt behelyettesítjük (4)-be, amely így

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - v\frac{\partial \Psi}{\partial z} = -v\frac{\partial \Psi}{\partial z} + D\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \tag{5}$$

Ez remek, hiszen visszakaptuk a diffúziós egyenlet (hiszen a $-v$-s tag kiesik!). A kezdeti feltétel itt is $\Psi(z, t = 0) = \delta(z)$. Ezt a feltételt kielégítő megoldás

$$\Psi(z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{z^2}{4Dt}} \tag{6}$$

Ebbe még visszahelyettesítjük a z-t, amivel

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}} \tag{7}$$

[3] Azért $-vt$, mert ezzel mindig a haranggörbe közepén lesz az origó!

2. Brown mozgás: Langevin levezetése

Langevin felismerése a sztochasztikus differenciálegyenlet közelítés (1908-ban írta fel, Perrin híres kísérletével azonosan). Langevin azt mondja, hogy a mozgó részecskére ható erő két részből tevődik össze:

- A haladásból származó[4] hidrodinamikai fékezőerő
- A haladó gömbnek minden irányból nekimennek a részecskék, amiből a fenti hidrodinamikai erő származik, amin kívül marad még egy véletlen erő is.

Az a sugarú $\frac{dx}{dt}$ sebességű részecskére ható súrlódási erő:

$$F_s = -6\pi\eta a \frac{dx}{dt}$$

Itt η a dinamikai viszkozitás, melynek dimenziója $\frac{m}{l \cdot t}$ és a vízre mért értéke $10^{-3} \frac{kg}{m \cdot s}$. Langevin szerint

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -6\pi\eta a \frac{dx}{dt} + X \tag{8}$$

Ebben a képletben m a virágpor tömege, X pedig az egyelőre ismeretlen véletlen erő. Ez egy Sztochasztikus differenciálegyenlet, hiszen benne van a véletlen tag is. Próbáljuk meg ezt megoldani! Azt tudjuk, hogy ennek a véletlen tagnak az átlaga nulla. Legalább azt az eredményt szeretnénk kihozni, amit Einstein kihozott az ő elméletéből, ekkor meghatározott lenne a diffúziós együttható, méghozzá fizikai paraméterekkel.

Szorozzuk be az egyenletet x-szel[5].

$$\frac{1}{2} m \frac{d^2x^2}{dt^2} - m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = -6\pi\eta \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} + xX \tag{9}$$

Ismét felhasználtuk (a súrlódási erő kifejezésében), hogy $x\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2}\frac{dx^2}{dt}$. Most pedig nem maradt más, átlagoljunk!

$$\frac{1}{2} m \frac{d^2 < x^2 >}{dt^2} - m \left\langle \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right\rangle = -6\pi\eta \frac{1}{2} \frac{d < x^2 >}{dt} + < xX > \tag{10}$$

Vegyük észere, hogy $m\frac{d^2<x^2>}{dt^2}$ nem más, mint $m < v^2 >$, ami a mozgási energia átlaga, azaz $k_B T$. Nem marad más hátra, mint eliminálni a $< xX >$-et, hogy meg tudjuk oldani az egyenletet. Ez igazából munkavégzés, hiszen erő*elmozdulás. Tudjuk, hogy a részecske sebessége nem nő spontán, ha az xX szorzat pozitív lenne, akkor a folyadék felmelegítené magát, ha pedig negatív, akkor elveszítené minden energiáját. Tehát csak nulla lehet.

$$\frac{d^2 < x^2 >}{dt^2} - \frac{2k_B T}{m} = -\frac{6\pi\eta a}{m} \frac{d < x^2 >}{dt} \tag{11}$$

[4]Képzeljük el, ahogy a részecske, mint golyó halad, az előtte lévő térben található részecskékkel több interakciót szenved, mint a mögötte lévőkkel. Ebből ered a fékezőerő.

[5]Vegyük figyelembe a következő azonosságot: $x\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{2}\frac{d^2x^2}{dt^2} - \left(\frac{dx}{dt}\right)^2$

Ha mondjuk $y = \frac{d<x^2>}{dt}$ helyettesítést választjuk, a

$$\frac{dy}{dt} + \frac{6\pi\eta a}{m} y = \frac{2k_BT}{m} \tag{12}$$

egyenletet kell megoldani. Ez inhomogén, ezért megoldjuk a homogén részét és keresünk egy inhomogén partikulárist, amiből kikeverjük a megoldást.

$$y_h = C_0 e^{-\frac{6\pi\eta a}{m}t}$$

$$y_p = \frac{2k_BT}{6\pi\eta a}$$

A megoldás tehát a kettő összege. Ne feledkezzünk meg arról, hogy volt egy helyettesítés, ezt csináljuk vissza!

$$\frac{< x^2 >}{dt} = \frac{2k_BT}{6\pi\eta a} + C_0 e^{-\frac{6\pi\eta a}{m}t} \tag{13}$$

Az exponenciális kitevője nagyon nagy (ha behelyettesítjük a viszkozitás értékét és a pollenszem átmérőjét, akkor nagyjából 10^7 értéket kapunk), de ez negatív ,ezért nagyon pici idő alatt elhanyagolhatóvá válik (kb 1 sec, ami a méréshez képest elenyésző, ezért elhanyagolható). Az exponenciális elhanyagolása és integrálás után (ami csak egy t-vel való szorzást jelent

$$< x^2 >= \frac{2k_BT}{6\pi\eta a} t = 2Dt \tag{14}$$

amiből

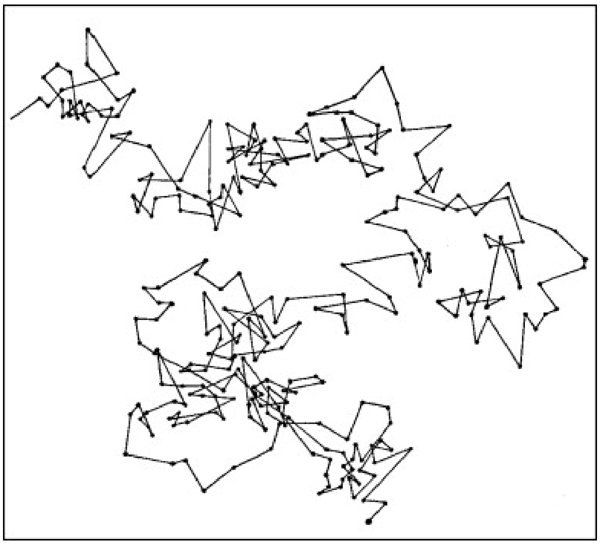
$$D = \frac{k_BT}{6\pi\eta a} \tag{15}$$

Azért nagy dolog ez, mert ebből az Avogadro-szám meghatározható! Elvileg, a $PV = N_a k_B T$-ből is meg lehetett volna határozni, azonban akkor még nem tudták a k_B értékét, így $N_a k_B$ helyett is csak az R értékét tudták mérni[6], az univerzális gázállandót. Ha a (15) egyenletet bővítjük N_a-val, akkor megkapjuk a következőt

$$D = \frac{RT}{6\pi\eta a N_a} \tag{16}$$

Innen már minden mérhető és csak ilyen mennyiségekkel van kifejezve az Avogadro-szám. Ezzel pedig k_B meghatározható. Kapott is érte Perrin egy Nobel-díjat.

[6] $R = N_a k_B$.



3. ábra. A Perrin által készített ábra a pollenszemek mozgásáról vízben. Ezen az ábrán mérte ki a diffúziós együttható mértékét

3. Master-egyenlet

Az eddigiekben átnéztük a Brown-mozgást Einstein és Langevin levezetésében. Mindkét megközelítés érvényes és ezek ekvivalensek egymással. Innentől kezdve diszkrét állapotterekkel és ezek sztochasztikus leírásával foglalkozunk. Felmerül néhány alapvetően új fogalom, melyeket a megértés érdekében tisztázni kell. Gondolunk itt a diszkrét állapottérre, valamint magára a Master-egyenletre is. Azért fontos ezen fogalmak ismerete, mert a bonyolultabb szimulációknál szinte csak ezekkel foglalkozunk. Ha le szeretnénk írni egy rendszert, ismerni kell az állapotösszegét.

$$z = \sum_{n}^{\infty} e^{-\beta E_n} \tag{17}$$

Itt persze n az állapotok számát jelenti, tehát egy nagyon nagy szám. Vegyük például az *Ising-spinláncot.* Ebben minden egyes mágnes (azaz minden pont) 2 állapotot jelent. Egy mol vasnál ez már $N = 2^{6 \cdot 10^{23}}$ állapot. Annak ellenére, hogy még csak 1 mol-nál tartunk, már most orbitális az adatmennyiség. A szimuláció jelentősége pont abban áll, hogy futtatjuk a rendszert, majd egy idő után átlagolunk. Ezért szép az egyensúlyi jelenségek statisztikus fizikája, mert hosszú időkre az időátlag egyenlő a statisztikai átlaggal. A lényeg abban áll, hogy a különböző állapotok Boltzmann súllyal legyenek jelen. Ez jó, hiszen csinálhatunk bármilyen szimulációt, a lényeg, hogy Boltzmann súllyal vegyük figyelembe az állapotokat. Nézzük pl. 1 spinre:

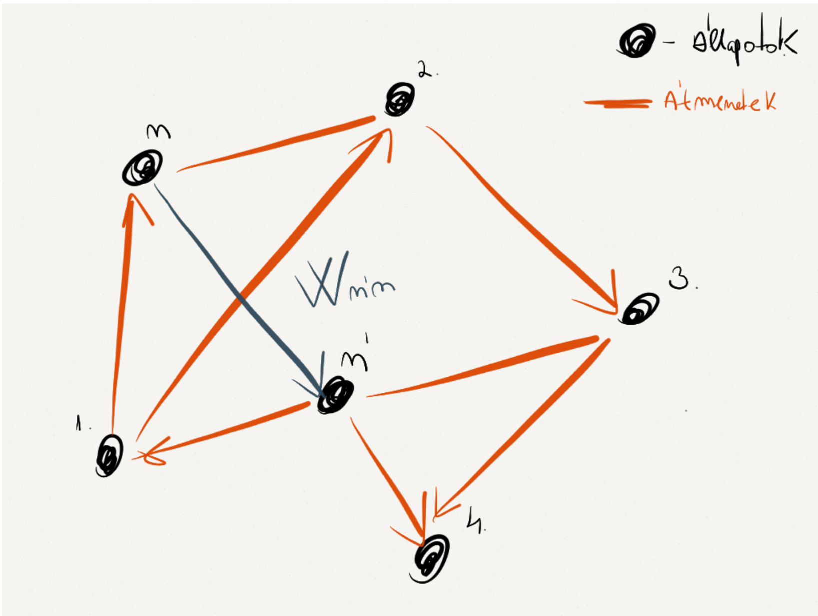
$$H = -J \sum_{<ij>} s_i s_j$$

A szumma alsó indexe azt jelenti, hogy szomszédos tagokra összegzünk. Ezek után meghatározzuk az egyensúlyi eloszlást!

$$P_l(s) = \frac{1}{z} e^{\beta J \sum_{<ij>} s_i s_j}$$

Úgy kell valami dinamikát kialakítani, hogy ezt kapjuk meg.
Egy másik példa, amit használni is fogunk, a két spin esete. Képzeljük el az állapotteret[7]. Az állapottér: ff, fl, lf, ll. Ez pontosan 2^2 állapot. Minden lehetőségnek van egy bizonyos valószínűsége, legyenek ezek rendre P_1, P_2, P_3, P_4 . Ide még később visszatérünk, menjünk tovább, hiszen valami matematikát akarunk csinálni.

Tegyük fel, hogy különböző állapotaink vannak.



4. ábra. A különböző állapotokból más-más átmeneti rátával tudunk átmenni más állapotokba (pl. az ábrán az n-ből n'-be történő átmenet $W_{n'n}$ rátával történik

[7]Rövidítsük f-el a fel irányt, l-el pedig a le irányt.

A $W_{n'n}$-el jelöljük azt, hogy n-ből n'-be mentünk át és fordítva, valamint a $W_{n'n}$ kifejezést nevezzük átmeneti rátának.

$$P_n(t+\Delta t) = P_n(t) - \sum_{n'} W_{n'n} \Delta t P_n(t) + \sum_{n'} W_{nn'} \Delta t P_{n'}(t) \tag{18}$$

Ez nem más, mint a Master-egyenlet. Az első szumma a Δt idő alatt n-ből n'-be történő átmenet, a második szumma pedig pont a fordítottja. A (18) egyenlet tehát nem más, mint a Chapman-Kolmogorov egyenlet[8] Alakítgassuk ezt egy kicsit és deriváljuk az idő szerint

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = -\sum_{n'} W_{n'n} P_n(t) + \sum_{n'} W_{nn'} P_{n'}(t) \tag{19}$$

Innentől kezdve már csak az átmeneti rátákra lenne szükség, ezeket viszont a kvantummechanikából ki lehet számolni, a Fermi-féle aranyszabály segítségével. Nekünk azonban erre nincs szükségünk, hiszen nem a dinamika érdekel minket, hanem az egyensúly. Ehhez szeretnénk megtalálni az átmeneti rátákat. A rendszer egyensúlyi eloszlását tudjuk

$$P_n^{(e)} = \frac{1}{z} e^{-\beta E_n} \tag{20}$$

Nézzük meg a spines példán. Tudjuk az energiát is. Két spin van, tehát

$$H = -J s_1 s_2$$

$$P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{z} e^{\beta J s_1 s_2}$$

Tehát adott konfigurációkra

$$P_1^{(e)} = \frac{1}{z} e^{k}$$

$$P_2^{(e)} = \frac{1}{z} e^{-k}$$

Valamint

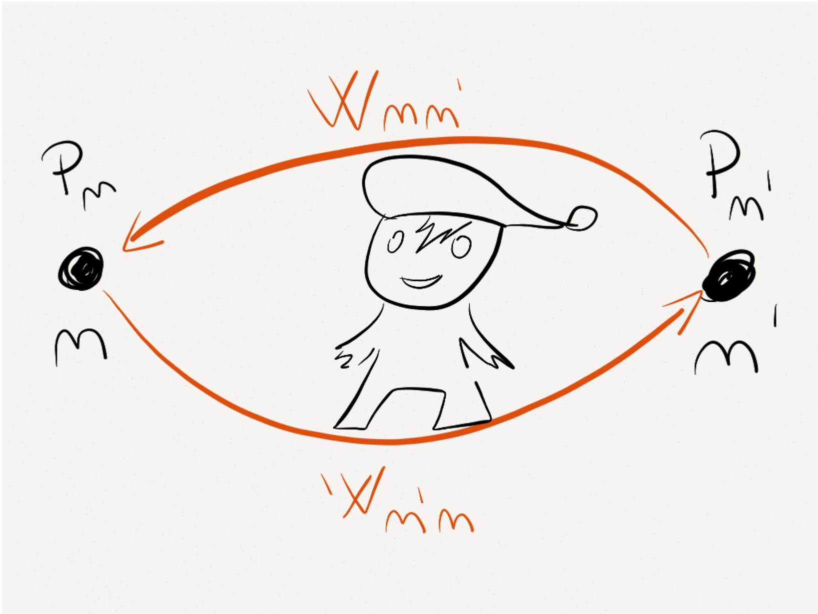
$$z = 2e^{k} + 2e^{-k}$$

hiszen ez az összes állapot! Térjünk vissza a Master-egyenlethez egy kicsit

$$0 = \frac{\partial P_n^{(e)}(t)}{\partial t} = -\sum_{n'} W_{n'n} P_n^{(e)}(t) + \sum_{n'} W_{nn'} P_{n'}^{(e)}(t) \tag{21}$$

Az egyensúly pedig stacionárius állapot! A nulla a jobb oldalon nem úgy jön ki, hogy a tagok össze-vissza kiejtik egymást, ezt csak az egymással szomszédos tagok teszik meg. Az egyensúlyban időtükrözési invariancia van. Egyensúlyi rendszert megfigyeléssel nem lehet megkérdezni arról, merre folyik az idő! Ennek fontos következménye van.

[8] Azaz a valószínűség megmaradása.



5. ábra. Az átmeneteket számoló manó.

Addig, amíg a rendszer nincs egyensúlyban, nem tudunk sokat mondani az átmeneti rátákról. Ha tennénk egy manót a n és n' állapotok közé, aki számolja, hányszor megy a rendszer n-ből n'-be és fordítva. Mit tapasztalna ez a manó hosszú idő után? Azt látná, hogy valamennyi megy itt is, ott is, ám az időtükrözési invariancia miatt ez egyenlő. A $W_{n'n}$ azt jelenti, hogy egy ugrás volt és a manó ezt számolgatja. Ha nem ezt tapasztalná, akkor nem teljesülne az időtükrözési invariancia, hiszen, ha az egyik irányba több menne, akkor időtükrözéssel előjelet váltana és így meg lehetne határozni az idő folyásának irányát. Viszont ez nem lehetséges, ezért felírhatjuk a

$$W_{n'n}P_n^{(e)} = W_{nn'}P_{n'}^{(e)} \tag{22}$$

Ez nem más, mint a részletes egyensúly elve. Azt jelenti, hogy a (21) egyenletben az egymás melletti tagok kiejtik egymást. Így már teljesen mindegy mit adunk meg W-re, ha a részletes egyensúly teljesül (és az állapottér irreducibilis), a rendszer relaxálni fog az egyensúly felé.

$$\frac{W_{n'n}}{W_{nn'}} = \frac{P_{n'}^{(e)}}{P_n^{(e)}} = \frac{e^{-\beta E_{n'}}}{e^{-\beta E_n}} = \frac{e^{-\beta(E_{n'}-E_n)}}{1} = \frac{1}{e^{-\beta(E_n-E_{n'})}} \tag{23}$$

Örülünk, hiszen a (23) egyenletben már kiesett a z. A következő választás kielégíti a fenti összefüggést

$$W_{n'n} = e^{-\beta(E_{n'}-E_n)}$$

ha az $E_{n'} > E_n$, valamint, fordított esetben pedig $W_{n'n}$ értéke 1.

4. Master egyenlet - folytatás

Az előadást a múlt heti anyag ismétlésével kezdtük, melyből megemlítek néhány mozzanatot, az soha nem árt. Sztochasztikus rendszerekkel foglalkozunk, melyekre felírtuk a Master-egyenletet. Ehhez mindenképpen ismernünk kell az átmeneti rátákat (melyek arról számolnak be, hogy egyes állapotokból milyen valószínűséggel kerül más állapotokba a részecske). Mi arra szeretnénk használni ezt a formalizmust, hogy a nagy szabadsági fokú egyensúlyi rendszert szimulálni tudjuk. Tudjuk, hogy az egyensúlyi eloszlás (20)-al egyenlő, ám ebből túl sok az összetevő, ezért mi inkább szerkesztünk egy dinamikát, amivel már a számítógép dolgozik. Kérdés, hogy mi kell ahhoz, hogy a rendszer az egyensúlyhoz relaxáljon? Olyan átmeneti valószínűségek, amelyek teljesítik a részletes egyensúly elvét. Ha a részletes egyensúly teljesül, akkor a rendszer egyensúlya független lesz a dinamikától. A részletes egyensúly elve a (22).

Az óra további részében a házi feladattal kapcsolatos információkat beszéltük meg. Ezt kérésre nem írom a jegyzetbe, folytassuk az új anyaggal. Tudjuk, hogy ha a részletes egyensúly elve teljesül, akkor a megoldás stacionárius. Nézzük meg milyen körülmények között teljesül az, hogy csak egy stacionárius megoldás van?

$$\partial_t P = \mathbf{A} P$$

Ezzel azt szeretnénk kifejezni, hogy P egy oszlopvektor, amiben benne vannak a különböző $P_1, P_2, ..., P_n$ értékek.

$$\partial_t P_n = \sum_{n'} A_{nn'} P_{n'} \tag{24}$$

Alakítsuk át a Master-egyenletet, hogy lássuk, valóban ilyen alakban írható!

$$-\sum_{n''} W_{n''n} P_n = -\sum_{n''}\sum_{n'} W_{n''n'}\delta_{nn'} P_{n'} = \sum_{n'} \left(-\sum_{n''} W_{n''n'}\delta_{nn'} + W_{nn'} \right) P_{n'} \tag{25}$$

A zárójelben álló kifejezés pedig nem más, mint $A_{nn'}$! Tehát látható, hogy a Master-egyenlet lineáris és meghatároztuk az A mátrixot is. Ennek a mátrixnak vannak speciális tulajdonságai! Ha az első indexe szerint összegezzük, nullát fog adni! Az olyan mátrixokat, melyek ezt tudják, sztochasztikus mátrixoknak nevezzük. Ezek a mátrixok biztosítják a valószínűség megmaradását. Tehát, összegezzük miről van szó! A mátrixaink sztochasztikusak kell legyenek, valamint az állapottérnek irreducibilisnek kell lennie, ami azt jelenti, hogy az állapotok között át lehet menni, szabad az átjárás mindenkiről mindenkire, méghozzá véges valószínűséggel. Ha ez a két feltétel teljesül, a Perron–Frobenius tétel azt mondja, hogy az A mátrix sok sajátértéke közül a legkisebb és legnagyobb nem degenerált.

Természetesen vannak olyan helyzetek is, ahol a rendszer felrobban, nem egyensúlyi. Ilyenkor a lambdák pozitívak.

Ha megtaláljuk az összes sajátértéket és sajátvektort, akkor a megoldás

$$P(t) = \sum_i a_i e^{\lambda_i t} \Psi_i(0)$$

A λ_i-nek csak nullánál kisebb valós része lehet minden esetben, hiszen más esetben elszállna a valószínűség. Van pontosan egy lambda, ami nulla, a többi negatív. Nekünk pont ez a nulla kell, ez tartozik az egyensúlyhoz.

Innentől kezdve van egy módszerünk arra, hogy az egyensúlyi rendszereket szimulálhassuk annak ellenére, hogy nem ismerjük a rendszert.

5. Ötödik előadás

Ezen az előadáson az Ising-spinlácról tanultunk, ám a Tanár Úr jelezte, hogy ez az anyag nagy gondossággal ki lett dolgozva és megtalálható a weblapján, angolul. Én csatolom a jegyzethez, majd egyszer, ha lesz időm beírom a sajátom is.

Interacting spins in a heat bath

(Dated: October 16, 2011)

The master equation for two ferromagnetically coupled Ising spins is considered. The system is assumed to be in contact with a heat bath at temperature T. Accordingly, the transition rates in master-equation are chosen so that the system relaxes to equilibrium at temperature T. The solution of the master equation is derived and the relaxation of the magnetization of the system is obtained.

SYSTEM DESCRIPTION

The system consists of two Ising spins s_1 and s_2. In approriate units, these variables can take two values: $s_i = \pm 1$. The interaction between the spins are ferromagnetic (prefering aligned spins), described by the following interaction energy

$$E(s_1, s_2) = -J s_1 s_2 \,, \tag{1}$$

where J is a positive constant setting the energy scale.

The spins are in contact with a heat bath of temperature T, and so, after a long time, the spins will be in equilibrium at T which means that the probability of a state (s_1, s_2) is given by

$$P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(s_1 s_2)} = \frac{1}{Z} e^{\beta J s_1 s_2} \,, \tag{2}$$

where β is the inverse temperature $\beta = 1/(k_B T)$ and Z is the partition function obtained from the condition

$$\sum_{s_1=\pm1} \sum_{s_2=\pm1} P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{Z} \sum_{s_1=\pm1} \sum_{s_2=\pm1} e^{\beta J s_1 s_2} = 1 \,. \tag{3}$$

Introducing $K \equiv \beta J$, one finds from the above equation

$$Z = 2(e^{2K} + e^{-2K}) \,, \tag{4}$$

and substituting this expression into eq.(2), one obtains the equilibrium distribution

$$P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{e^{K s_1 s_2}}{2(e^{2K} + e^{-2K})} \,. \tag{5}$$

There are two low-energy states with energy $E(\uparrow\uparrow) = E(\downarrow\downarrow) = -J$ and two high-energy states with $E(\downarrow\uparrow) = E(\uparrow\downarrow) = J$, and the corresponding equilibrium probabilities are as follows

$$P^{(e)}(\uparrow\uparrow) = P^{(e)}(\downarrow\downarrow) = \frac{e^K}{Z} \,, \tag{6}$$

$$P^{(e)}(\downarrow\uparrow) = P^{(e)}(\uparrow\downarrow) = \frac{e^{-K}}{Z} \,. \tag{7}$$

KINETIC ISING MODEL FOR 2 SPINS

We introduce dynamics by allowing the 1st or 2nd spin to flip by some rate $w_1(s_1, s_2)$ and $w_2(s_1, s_2)$. Then the master equation for the time-dependent, nonequilibrium distribution $P(s_1, s_2; t)$ is written as

$$\frac{\partial P(s_1, s_2; t)}{\partial t} = -[w_1(s_1, s_2) + w_2(s_1, s_2)]P(s_1, s_2; t) + \\ w_1(-s_1, s_2)P(-s_1, s_2; t) + w_2(s_1, -s_2)]P(s_1, -s_2; t) \,. \tag{8}$$

The first two terms on the right-hand side describe the going out of the state (s_1, s_2) while the last two terms are related to the going into the state (s_1, s_2) by flipping the first or second spin in the $(-s_1, s_2)$ and $(s_1, -s_2)$ states, respectively.

We would like to have a system which relaxes to equilibrium. Since the detailed balance should be satisfied in equilibrium, we have the following conditions for the flip rates:

$$\begin{aligned} w_1(s_1, s_2)P^{(e)}(s_1, s_2) &= w_1(-s_1, s_2)P^{(e)}(-s_1, s_2) \\ w_2(s_1, s_2)P^{(e)}(s_1, s_2) &= w_2(s_1, -s_2)P^{(e)}(s_1, -s_2) \,. \end{aligned} \tag{9}$$

Using eq.(5), the above conditions can be rewritten as

$$\frac{w_1(s_1, s_2)}{w_1(-s_1, s_2)} = \frac{e^{-2K s_1 s_2}}{1} = \frac{1}{e^{2K s_1 s_2}} \tag{10}$$

$$\frac{w_2(s_1, s_2)}{w_2(s_1, -s_2)} = \frac{e^{-2K s_1 s_2}}{1} = \frac{1}{e^{2K s_1 s_2}} \tag{11}$$

One can easily see that the above equations are satisfied with the following choice of flip rates

$$w_1(\uparrow\uparrow) = w_2(\uparrow\uparrow) = w_1(\downarrow\downarrow) = w_2(\downarrow\downarrow) = e^{-2K} \tag{12}$$

$$w_1(\uparrow\downarrow) = w_2(\uparrow\downarrow) = w_1(\downarrow\uparrow) = w_2(\downarrow\uparrow) = 1 \,. \tag{13}$$

The above flip rates are frequently used. They correspond to the choice of rates of $w = 1$ if the flip decreases the energy while $w = e^{-\beta \delta E}$ if the flip increases the energy ($\delta E > 0$).

Note that the dimension of the flip rate w is 1/time, so one should multiply the rates in eqs.(12,13) by $1/\tau$ where τ is a characteristic time of the spin-flip process. It is treated as a parameter of the model, and setting $\tau = 1$ means that the time is measured in units of τ.

MASTER EQUATION IN MATRIX FORM

Using the spin-flip rates (12,13), the master equation (8) can be written as

$$
\begin{aligned}
\partial_t P(\uparrow\uparrow,t) &= -2e^{-2K}P(\uparrow\uparrow,t) + P(\downarrow\uparrow,t) + P(\downarrow\uparrow,t) + 0 & (14)\\
\partial_t P(\downarrow\uparrow,t) &= e^{-2K}P(\uparrow\uparrow,t) - 2\,P(\downarrow\uparrow,t) + 0 + e^{-2K}P(\downarrow\downarrow,t) & (15)\\
\partial_t P(\uparrow\downarrow;t) &= e^{-2K}P(\uparrow\uparrow,t) + 0 - 2\,P(\uparrow\downarrow,t) + e^{-2K}P(\downarrow\downarrow,t) & (16)\\
\partial_t P(\downarrow\downarrow;t) &= 0 + P(\uparrow\downarrow,t) + P(\downarrow\uparrow,t) - 2e^{-2K}P(\downarrow\downarrow,t)\,. & (17)
\end{aligned}
$$

Introducing the notation

$$\vec{P}(t) = \begin{pmatrix} P(\uparrow\uparrow,t) \\ P(\downarrow\uparrow,t) \\ P(\downarrow\uparrow,t) \\ P(\downarrow\downarrow,t) \end{pmatrix}, \tag{18}$$

we can write the master equation (14-17) in a matrix form

$$\partial_t \vec{P}(t) = \mathbb{A}\vec{P}(t) \tag{19}$$

where the matrix $\mathbb{A}$ is called the evolution matrix, and is obtained from the comparison of eqs.(14-17) with eqs. (18) and (19)

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} -2e^{-2K} & 1 & 1 & 0 \\ e^{-2K} & -2 & 0 & e^{-2K} \\ e^{-2K} & 0 & -2 & e^{-2K} \\ 0 & 1 & 1 & -2e^{-2K} \end{pmatrix}. \tag{20}$$

The equilibrium distribution is a stationary solution of the master equation which means that the vector

$$\vec{P}^{(e)} = \frac{1}{2(e^K + e^{-K})} \begin{pmatrix} e^K \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^K \end{pmatrix}, \tag{21}$$

is an eigenvector of the matrix $\mathbb{A}$ with eigenvalue $\lambda_1 = 0$. This can be easily verified by just calculating $\mathbb{A}\vec{P}^{(e)}$.

In order to describe the time evolution starting from any initial state $\vec{P}(0)$, we must find the remaining three eigenvalues λ_i $(i = 2,3,4)$ and the corresponding eigenvectors $\vec{P}^{(i)}$. Indeed, once we have accomplished this task, we know that the time evolution of the i-th eigenvector is given by

$$\vec{P}^{(i)}(t) = a_i e^{\lambda_i t}\vec{P}^{(i)} \tag{22}$$

where $\vec{P}^{(i)}(0) = a_i\vec{P}^{(i)}$. Then we can write a general solution in the form

$$\vec{P}(t) = \vec{P}^{(e)} + \sum_{i=2}^{4} a_i e^{\lambda_i t}\vec{P}^{(i)}\,, \tag{23}$$

and the coefficients a_i are determined from the initial condition

$$\vec{P}(0) = \vec{P}^{(e)} + \sum_{i=2}^{4} a_i\vec{P}^{(i)}\,. \tag{24}$$

Note that, written out for the components of the vectors, we have here 4 equations for 3 coefficients a_i $(i = 2,3,4)$. There is, however, the normalization condition

$$\sum_{i=1}^{4}\vec{P}(t) = \sum_{i=1}^{4}\vec{P}(0) = 1 \tag{25}$$

and so we really have only three coefficients to determine.

DIAGONALIZING THE EVOLUTION MATRIX

Looking at the equilibrium distribution vector $\vec{P}^{(e)}$ [see eq.(21)], one can notice that the vector has the following symmetry: $\vec{P}^{(e)}(s_1,s_2) = \vec{P}^{(e)}(-s_1,-s_2)$, i.e. the probability of a state remains the same when both spins are flipped. This is understandable since the sytem has a symmetry: The expression of the energy is invariant under the flipping of both spins, $E(s_1,s_2) = -Js_1s_2 = E(-s_1,-s_2)$ and, consequently, the Boltzmann factors $\sim e^{-\beta E}$ have the same symmetry.

There is, however, something more general here. For systems of such up-down symmetry one has the following results from group theory: All the eigenvectors of the matrix $\mathbb{A}$ are either symmetric or antisymmetric under the simultaneous flipping of all the spins. It follows then that we can search for the eigenvectors of $\mathbb{A}$ by assuming the following forms (of course, we may also just try to find such eigenvectors without any reference to group theory)

$$\vec{P}^{(i)}_{\text{sym}} \sim \begin{pmatrix} a \\ b \\ b \\ a \end{pmatrix} \quad \text{or} \quad \vec{P}^{(i)}_{\text{antisym}} \sim \begin{pmatrix} c \\ d \\ -d \\ -c \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Let us begin by finding the symmetric eigenvectors. The four algebraic equations obtained from the components of the eigenvalue equation

$$\mathbb{A}\vec{P}^{(i)}_{\text{sym}} = \lambda_i\vec{P}^{(i)}_{\text{sym}} \tag{27}$$

are not independent. They yield only two equations

$$-2e^{-2K}a + 2b = \lambda_i a \quad , \quad 2e^{-2K}a - 2b = \lambda_i b \,. \tag{28}$$

Adding up the above equations, we obtain

$$\lambda_1(a+b) = 0\,, \tag{29}$$

and the two solutions of the above equation are $\lambda_1 = 0$ and $b = -a$.

For the case of $\lambda_1 = 0$, we should get the equilibrium distribution and, indeed, setting $\lambda_1 = 0$ in the equations (28), we find $b = e^{-2K}a$, and normalizing the distribution leads to eq.(21), and thus

$$\lambda_1 = 0 \quad , \quad \vec{P}^{(1)} = \vec{P}^{(e)}\,. \tag{30}$$

For the second case of $b = -a$ we obtain from eqs.(28)

$$\lambda_2 = -2(1+e^{-2K}) \quad , \quad \vec{P}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{31}$$

Let us turn now to the antisymmetric eigenvectors. The eigenvalue equation

$$\mathbb{A}\vec{P}^{(i)}_{\text{antisym}} = \lambda_i \vec{P}^{(i)}_{\text{antisym}} \tag{32}$$

yields again two equations for the parameters c and d

$$-2e^{-2K}c = \lambda_i c \quad , \quad -2d = \lambda_i d\,. \tag{33}$$

The two soulutions of the above equations are $\lambda_3 = -2e^{-2K}$ with $d = 0$ and $\lambda_4 = -2$ with $c = 0$. Thus the remaining eigenvalues and eigenvevtors are as follows:

$$\lambda_3 = -2e^{-2K} \quad , \quad \vec{P}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{34}$$

and

$$\lambda_4 = -2 \quad , \quad \vec{P}^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{35}$$

All the eigenvalues and eigenvectors of the dynamical matrix (eqs.30,31,34,35) have been found, and we can see that apart from the zero eigenvalue ($\lambda_1 = 0$) related to the equilibrium state, all other eigenvalues are negative ($\lambda_i < 0$ for $i = 2,3,4$). Thus any initial perturbation described by the eigenvectors $\vec{P}^{(i)}$ with $i = 2,3,4$ die out in the $t \to \infty$ limit and the system relaxes to the equilibrium state. Note that this is not surprising. We have here a discrete, irreducible state space and so the Perron-Frobenius theorem applies.

Having the eigenvalues and eigenvectors of the dynamical matrix, we can turn now to the calculation of the relaxation of the total magnetization $m(t) = \langle s_1 + s_2\rangle_t$ of the system.

RELAXATION OF THE TOTAL MAGNETIZATION

The time evolution of the average of a physical quantity $\langle Q(s_1,s_2)\rangle$ is obtained by averaging over the time-dependent distribution $P(s_1,s_2;t)$

$$Q(t) \equiv \langle Q\rangle_t \equiv \sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1} Q(s_1,s_2)P(s_1,s_2;t)\,. \tag{36}$$

Since we would like to calculate the time-evolution of the magnetization of the system, $Q = s_1 + s_2$ in our case, and we have

$$m(t) = \sum_{s_1=\pm1}\sum_{s_2=\pm1}(s_1+s_2)P(s_1,s_2;t)\,. \tag{37}$$

In order to evaluate the above expression we should find $P(s_1,s_2;t)$. To do this, we need some initial condition. For concreteness, let us assume that initially, the system is completely aligned in the + direction ($m(t=0)=2$), i.e. $P(\uparrow\uparrow, t=0) = 1$ and all the other probabilities are zero

$$\vec{P}(t=0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{38}$$

Then the coefficient a_i in the general solution of the master equation (23) can be determined using the initial condition (24) which, written out for the components take the form

$$1 = \frac{e^K}{Z}a_1 + a_2 + a_3 \tag{39}$$

$$0 = \frac{e^{-K}}{Z}a_1 - a_2 + a_4 \tag{40}$$

$$0 = \frac{e^{-K}}{Z}a_1 - a_2 - a_4 \tag{41}$$

$$0 = \frac{e^K}{Z}a_1 + a_2 - a_3\,. \tag{42}$$

Subtracting (41) from (40), we find $a_4 = 0$ while subtracting (42) from (39) resluts in $a_3 = 1/2$. Using these values, eqs.(39) and (40) yield $a_1 = 1$ and $a_2 = e^{-K}/Z$ [note that we did not assume that the coefficient in front of $\vec{P}^{(e)}$ would be unity, it emerged from the equations as it should since the equilibrium distribution (21) is already normalized].

Using the coefficints a_i as well as the eigenvalues related to the ith eigenvector, the solution of the master equation satisfying the initial condition (38) can be written as

$$\vec{P}(t) = \frac{1}{Z}\begin{pmatrix} e^{K} \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^{K} \end{pmatrix} \; + \; e^{-2(1+e^{-2K})t}\,\frac{e^{-K}}{Z}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \; + \; e^{-2e^{-2K}t}\,\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} . \tag{43}$$

Collecting the components, we have

$$\vec{P}(t) = \begin{pmatrix} \frac{e^{K}}{Z} + e^{-2(1+e^{-2K})t}\,\frac{e^{-K}}{Z} + e^{-2e^{-2K}t}\,\frac{1}{2} \\ \frac{e^{-K}}{Z} - e^{-2(1+e^{-2K})t}\,\frac{e^{-K}}{Z} \\ \frac{e^{-K}}{Z} - e^{-2(1+e^{-2K})t}\,\frac{e^{-K}}{Z} \\ \frac{e^{K}}{Z} + e^{-2(1+e^{-2K})t}\,\frac{e^{-K}}{Z} - e^{-2e^{-2K}t}\,\frac{1}{2} \end{pmatrix} . \tag{44}$$

We have now all $P(s_1, s_2, t)$ and can evaluate $m(t)$ as given by (37). Looking at the sum (37), we can notice that $s_1+s+2 = 0$ for the $\downarrow\uparrow$ and $\uparrow\downarrow$ states, while $s_1+s_2 = 2$ for the $\uparrow\uparrow$ and $s_1+s_2 = -2$ for the $\downarrow\downarrow$ states. Thus the sum reduces to the following expression

$$m(t) = 2\,\left[\, P(\uparrow\uparrow, t) - P(\downarrow\downarrow, t) \,\right] . \tag{45}$$

Using now the $\vec{P}(t)$ components from (44), we find

$$m(t) = 2\, e^{-2e^{-2K}t} . \tag{46}$$

Thus the magnetization of the system relaxes exponentially with a relaxation time given as the inverse of one of the eigenvalues of the dynamical matrix

$$\tau_{relax} = \frac{1}{2}e^{2K} = \frac{1}{2}e^{2J/k_B T} . \tag{47}$$

As can be seen, the relaxation time diverges as the temperature goes to zero. It is understandable, the characteristic thermal energy coming from the heat bath is $k_B T$, and it is not enough to overturn the spins since the energy of overturning is J and $J \gg k_B T$ at low temperatures.

6. Hatodik előadás

Ezen az előadáson sorbanállási problémákkal foglalkozunk (egy új technika sorbanállási problémák megoldására.)! A célkitűzésünk legyen a következő: fiktív szereplőnk a Tescoban próbál szerencsét, nyári munka alkalmával. Az áruházvezető megkéri, hogy számolja ki, mi kell ahhoz, hogy egy sorban maximum mindig csak két ember várakozzon. Hogy számoljon a diák? Nézzük a problémát egyelőre egy sorra (tehát egy kiszolgáló egység = kassza van). A sorban $1, 2, ...n$ várakozó van, a beérkező emberek rátája w_b, a kimenőké pedig w_k. Meg kell válaszolnunk néhány dolgot, nevezetesen: *mi lesz a sor átlagos hossza és az ekörüli fluktuáció?* Hogy ezekre válaszolhassunk, írjuk fel a Master-egyenletet.

$$n \geq 1$$

$$\partial_t P_n = -(w_k + w_b)P_n + w_b P_{n-1} + w_k P_{n+1} \tag{26}$$

Az első tag, hogy n-ben vagyunk, valaki jön vagy elmegy, a második tagban $n-1$-ből w_b rátával átmegyün n-be, az utolsóban pedig $n+1$ ember volt, de valaki kiszolgálódott.

$$n = 0$$

$$\partial_t P_0 = -w_b P_0 + w_k P_1 \tag{27}$$

Rendelkezésünkre áll tehát a két egyenlet, ebből lehet meghatározni a keresett mennyiségeket. Külön-külön az egyenletek $1/s$ dimenziójúak, ám, ha leosztjuk őket egymással, dimenziótlanok lesznek. Vezessük be a

$$q = \frac{w_b}{w_k} \tag{28}$$

mennyiséget. Fontos, hogy ez mindig kisebb mint egy, különben a rendszer felrobbanna (hiszen többen jönnének be, mint ahányan távoznak). A következő lépés, hogy (26) és (27) egyenleteket leosszuk w_k-val, valamint használjuk a bevezetett (28) jelölést is.

$$\partial_t P_n = -(1 + q)P_n + qP_{n-1} + P_{n+1} \tag{29}$$

$$\partial_t P_0 = -qP_0 + P_1 \tag{30}$$

Következő lépésünkben **vezessük be a generátorfüggvényt.**[9]

$$G(s,t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn} P_n(t) \tag{31}$$

Tulajdonságai:

- $$G(0,t) = 1$$

[9] Azért kapott kiemelést, mert a mai óra tanulsága az, hogy megtanuljuk felírni, kezelni és használni ezt a függvényt, valamint szeretnénk bemutatni, hogy néhány helyzetben milyen egyszerűen használható.

- $$-\frac{\partial G}{\partial s}\bigg|_{s=0} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn} P_n(t)\bigg|_{s=0} =< n >_t$$

- $$-\frac{\partial^2 G}{\partial s^2}\bigg|_{s=0} = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P_n(t) =< n^2 >_t$$

- $$(-1)^k \frac{\partial^k G}{\partial s^k}\bigg|_{s=0} = \sum_{n=0}^{\infty} n^k P_n(t) =< n^k >_t$$

Tehát azért jó, mert az eloszlásfüggvény összes momentuma ilyen egyszerűen kiszámolható. Szeretnénk rájönni hogy kell generátorfüggvényt csinálni. Ennek érdekében nézzük meg a következőt.

$$\partial_t G(s,t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn} \partial_t P_n(t) = \tag{32}$$

Most írjuk be a Master-egyenletet az időderivált helyébe úgy, hogy már különválaszottuk az $n = 0$ és $n = 1...$ esetet.

$$-qP_0 + P_1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[-(1+q)P_n + qP_{n-1} + P_{n+1}\right] e^{-sk} = \tag{33}$$

Hogyan lehetne elérni, hogy itt megint a G jelenjen meg? Nézzük meg külön a tagokat. A [] zárójelben három különálló tag van. Menjünk végig ezeken.

- $$-(1+q)\sum_{n=1}^{\infty} e^{-sn} P_n = (1+q)P_0 - (1+q)G(s,t)$$

  Ugye az van, hogy a szummában egytől megyünk e végtelenig. Ez már majdnem jó, de nekünk nullától kellene, ezért átalakítjuk kicsit, hogy nullától menjen, amit meg pluszba kellett számolni emiatt, azt levonjuk. Ha már nullától megy, akkor igazából $G(s,t)$-t jelenti. A második és harmadik tagnál pont ugyanezt csináljuk végig.

- $$q\sum_{n=1}^{\infty} e^{-sn} P_{n-1} = q\sum_{m=0}^{\infty} e^{-s(m+1)} P_m = qe^{-s}\sum_{m=0}^{\infty} e^{-sm} P_m = qe^{-s} G(s,t)$$

  Semmi nem változott, csak itt használtunk egy $m = n - 1$ helyettesítést.

- Ugyanaz a tészta, mint előbb, csak itt $m = n + 1$-et használunk. A végeredményt közlöm

  $$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-sn} P_{n+1} = -e^s \left(P_0 + e^{-s} P_1\right) + e^s G(s,t)$$

Rendben, végeztünk! Szedjük össze mi maradt!

$$\partial_t G(s,t) = P_0\left(1-e^s\right) - \left[1+q-qe^{-s}-e^s\right]G(s,t) \tag{34}$$

Tegyük fel, hogy stacionárius állapot van, azaz (34) = 0. Ilyenkor

$$G^{st}(s) = \frac{P_0\left(1-e^s\right)}{1-e^s+q\left(1-e^{-s}\right)} = \frac{P_0}{1-qe^{-s}} \tag{35}$$

$$G(s=0) = \frac{P_0}{1-q} = 1 \tag{36}$$

ebből pedig az következik, hogy

$$P_0 = 1-q \tag{37}$$

Ha ezt a P_0-t behelyettesítjük a (35) egyenletbe, már tudunk is számolgatni! Mennyi lesz n várható értéke? A tulajdonságokból leírtuk hogy kell ezt kiszámolni!

$$< n >= -\left.\frac{\partial G}{\partial s}\right|_{s=0} = (1+q)\left.\frac{qe^{-s}}{\left(1-qe^{-s}\right)^2}\right|_{s=0} = \frac{q}{1-q} \tag{38}$$

Azt mondhatjuk, hogy ha $q = 2/3$, akkor az n várhatóan kettő, azaz a pénztárosnak másfélszer gyorsabban kell dolgzni, hogy a várakozók száma kettő legyen. Ahogy kiszámoljuk az n^2 várható értékét, ki tudjuk majd számolni a szórást is. Szóval

$$< n^2 >= \frac{q(1+q)}{(1-q)^3} \tag{39}$$

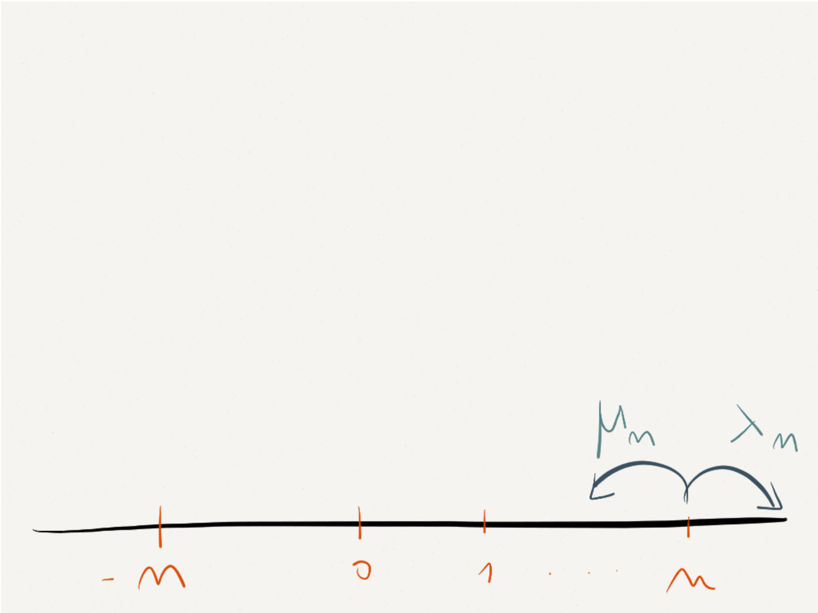
Ebből a szórásnégyzetet a $< n^2 > - < n >^2$ képletből, majd ebből gyökvonással a szórásra

$$\sigma = \sqrt{< n^2 > - < n >^2} = \frac{\sqrt{q}}{1-q} \approx \sqrt{6} \approx 2,4 \tag{40}$$

Ebből már látszik a probléma. Nagyobb lett a szórás, mint maga a várható érték. Ezen úgy lehet segíteni, hogy nem egy, hanem sokkal több kasszát kell alkalmazni. Persze így az egész számításunk mehet a kukába. Konklúzió: a generátor függvényt nagyon jól lehet használni, tegyük is meg, mert ez egy hasznos találmány. A problémát megoldhattuk volna úgy is, hogy nem használjuk a generátor függvényt (persze csak stacionárius állapotban). A Master-egyenletből megkapható P_1 és P_2, amelyekből következtethetünk P_n-re. Leellenőrizve ezt a következtetést, rájövünk, hogy ezen az egyszerű modellen jó volt, de ha kicsit mélyebbre szeretnénk menni, sokkal bonyolultabb számolás és megfontolások állnak az utunkba.

7. Hetedik előadás

Belenézünk a születési-kihalási folyamatokba, de nem szeretnénk bővebben foglalkozni velük. Megmutatjuk hogy kell felírni az itt használatos mennyiségeket. Azt mondhatjuk, hogy ha azt szeretnénk tudni hova van koncentrálva az eloszlásfüggvény, elég az n-re és n^2-re felírni a mennyiségeket (átlag, szórás, stb...).



6. ábra. Egy adott állapotból lambda valószínűséggel lehet fel lépni, és művel le.

Próbáljunk meg egy kicsit máshogy belegondolni a sorbanállási problémákba. Gondoljuk meg hogyan kellene felírni a Master-egyenletet arra, hogy évente mennyi változik a hőmérséklet? Amikor az átmeneti rátákat szeretnénk meghatározni, ott nagyon sok tényezőt figyelembe kell venni (pl.: albedó, Napból a Földre beeső energia, vízgőztartalom, CO_2 szint). Írjuk fel a Master-egyenletet

$$n \equiv T$$

$$\partial_t P_n(t) = -\left(\mu_n + \lambda_n\right) P_n + \lambda_{n-1} P_{n-1} + \mu_{n+1} P_{n+1} \tag{41}$$

Ilyenkor a momentum generátor függvény az eloszlásfüggvény diszkrét Fourier-transzformációja

$$G(s,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-isn} P_n(t) \tag{42}$$

Deriváljuk le!

$$\partial_t G = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-isn} \partial_t P = \tag{43}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[-(\mu_n + \lambda_n) e^{-isn} P_n + e^{-is} P_n \lambda_{n-1} e^{-is(n-1)} P_{n-1} + e^{is} \mu_{n+1} e^{-is(n+1)} P_{n+1} \right]$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-is(n-1)} \lambda_{n-1} P_{n-1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[-(\mu_n + \lambda_n) + e^{-is} \lambda_n + e^{is} \mu_n \right] e^{-isn} P_n \tag{44}$$

$$e^{-is} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-is(n-1)} \lambda_{n-1} P_{n-1} = e^{-is} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ism} \lambda_m P_m = e^{-is} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{isn} \lambda_n P_n$$

Ide úgy jutottunk el, hogy az első egyenlőségnél csináltunk egy $n-1=m$, a másodiknál meg egy $m=n$ helyettesítést. Ezt persze el lehet játszani a többi résszel is.
Szeretnénk sorba fejteni a (44) egyenletet. Nézzük mi lesz belőle (közben összeszedjük az n-nel arányos tagokat).

$$\alpha \sum_n n \cdot e^{-isn} P_n = \alpha i \frac{\partial}{\partial s} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-isn} P_n = i\alpha \frac{\partial G}{\partial s}$$

A második tag már a $\frac{\partial^2 G}{\partial s^2}$-el lenne arányos. Tehát $\partial_t G = a_0(s) G + a_1(s) \frac{\partial G}{\partial s} + a_2(s) \frac{\partial^2 G}{\partial s^2} + ...$
Szóval ha valaki ad nekünk pár egyszerű kifejezést lambdára és műre, akkor elvileg fel lehet írni egy differenciálegyenletet. Ez azonban a legegyszerűbb esetekben is nehéz. Nézzünk egy egyszerűbbet.
Vegyük észre, hogy itt is működik a részletes egyensúly elve, hiszen ha nincs semmi áramlat a rendszerben, akkor

$$x_n P_n^{st} = \mu_{n+1} P_{n+1}^{st},$$

azaz a valószínűségi áram az n helyen nulla.

$$P_1^{st} = \frac{\lambda_0}{\mu_1} P_0^{st}$$

$$P_2^{st} = \frac{\lambda_1}{\mu_2} P_1^{st} = \frac{\lambda_0 \lambda_1}{\mu_1 \mu_2} P_0^{st}$$

$$P_n^{st} = \frac{\lambda_0 \lambda_1 ... \lambda_{n-1}}{\mu_1 \mu_2 ... \mu_n} P_0^{st}$$

Remek! Felfelé haladva ez teljesül, nézzük meg azonban lefelé is, hiszen ott is lehet értéke a függvénynek.

$$P_{-1}^{st} = \mu_{-1} P_0^{st}$$

$$P_{-2}^{st} = \frac{\mu_{-1}}{\lambda_{-2}} P_{-1}^{st} = \frac{\mu_0 \mu_{-1}}{\lambda_{-1} \lambda_{-2}} P_0^{st}$$

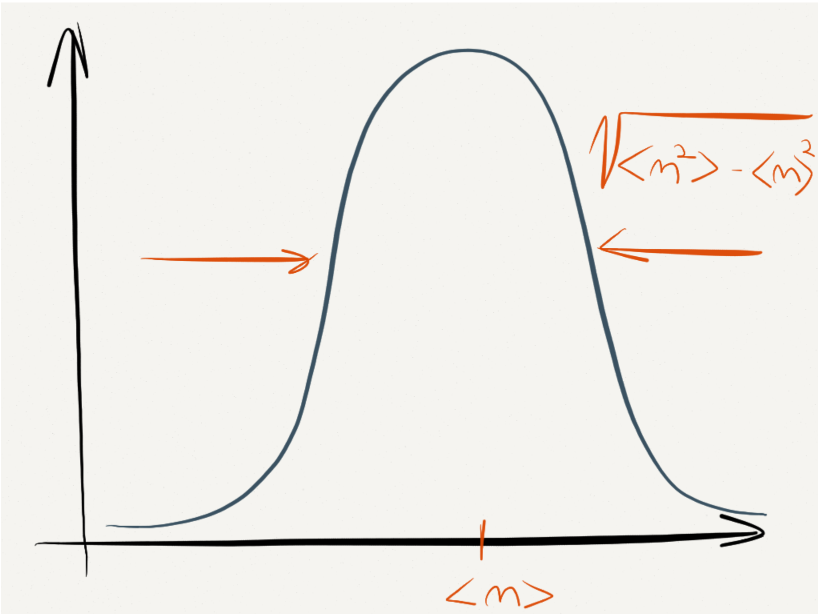
$$P_{-n}^{st} = \frac{\mu_0 \mu_{-1} ... \mu_{-n+1}}{\lambda_{-1} \lambda_{-2} ... \lambda_{-n}} P_0^{st}$$

$$P_0^{st} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \prod_{l=1}^{n} \frac{\lambda_{l-1}}{\mu_l} + \sum_{n=-1}^{\infty} \prod_{l=-1}^{n} \frac{\mu_{l+1}}{\lambda_l} \right] = 1$$

A momentumokra való deriválás

$$\langle n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} nP_n(t)$$

Az érdekel minket, hogy hol van ez az érték egy függvénynél.



7. ábra. Az eloszlásfüggvény átlaga és szórása.

Sajnos, ha a függvény nem szimmetrikus, ez a várható érték egyáltalán nem a maximumnál található. Ehhez már kell a második momentum, ami a szórásról tájékoztat. A harmadik momentummal meghatározhatjuk azt is, mennyire szimmetrikus a függvény, a negyedik pedig a Gauss-görbétől való eltérésnek a mértéke. Azt tudjuk, hogy a Gaussnál

$$\frac{\langle n^4\rangle}{\langle n^2\rangle^2} = 3$$

Tehát nem marad hátra más, mint kiszámolni az első négy momentumot, azokból majd minden számunkra hasznos információt kinyerhetünk.

$$\partial_t\langle n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n\partial_t P_n = \sum_n \left[-\left(\mu_n + \lambda_n\right) P_n + \lambda_{n-1}P_{n-1}\cdot n + \mu_{n+1}P_{n+1}\cdot n\right] =$$

$$= \langle \lambda n\rangle - \langle \mu n\rangle = \varepsilon_-\sigma_+(\varepsilon_-\sigma_{)}\langle n\rangle \Rightarrow \langle n\rangle^{st} = \frac{\sigma_0 - \varepsilon_0}{\varepsilon_1 - \sigma_1}$$

Akkor lenne baj, ha most a lambda és a mű az n valami bonyolult függvénye lenne, azonban mi tegyük fel, hogy $\lambda_n = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 n$ és $\mu_n = \mu_0 + \mu_1 n$, azaz lineáris függvények. Így pedig

$$\langle n \rangle - \langle n \rangle^{st} = \delta n(t) = \delta n(0) \cdot e^{(\varepsilon_1 - \sigma_1)t}$$

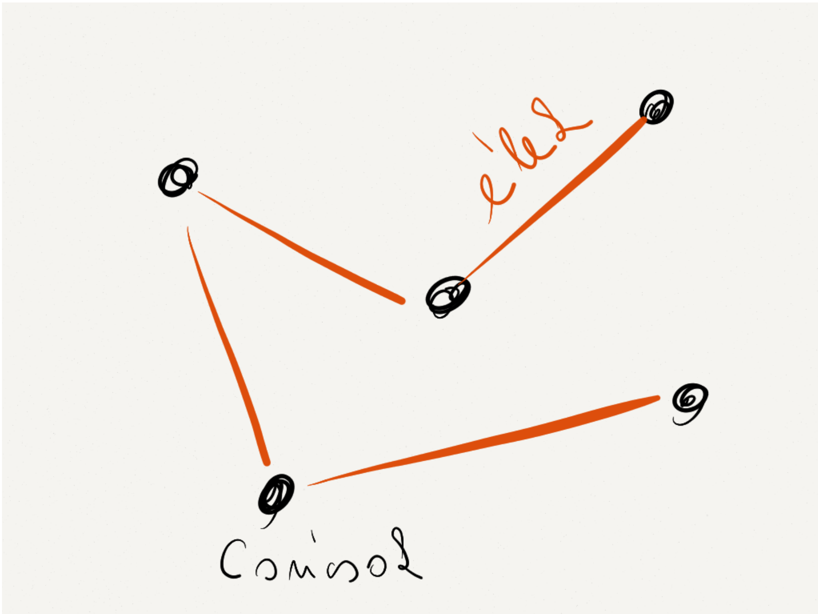
Persze legyen $\varepsilon_1 < \sigma_2$, hogy ne szaladjon a végtelenbe a rendszer. Végezetül írjuk fel a másodikat is (amit ugyanúgy kell, mint az elsőt).

$$\partial_t \langle n^2 \rangle = ... = 2\langle \lambda_n n \rangle + \langle \lambda n \rangle - 2\langle \mu n \rangle + \langle \mu_n n \rangle = c_0 + c_1 \langle n \rangle + c_2 \langle n^2 \rangle$$

Az egész számolás egyszerű lambdára és műre vonatkozik. Ha bonyolultabb mennyiségekkel dolgozunk, akkor az egyenletrendszer elmegy a végtelenbe, nem tudjuk megadni zárt alakban, hiszen minden deriválással egy magasabb hatvány jelenik meg.

8. Nyolcadik előadás

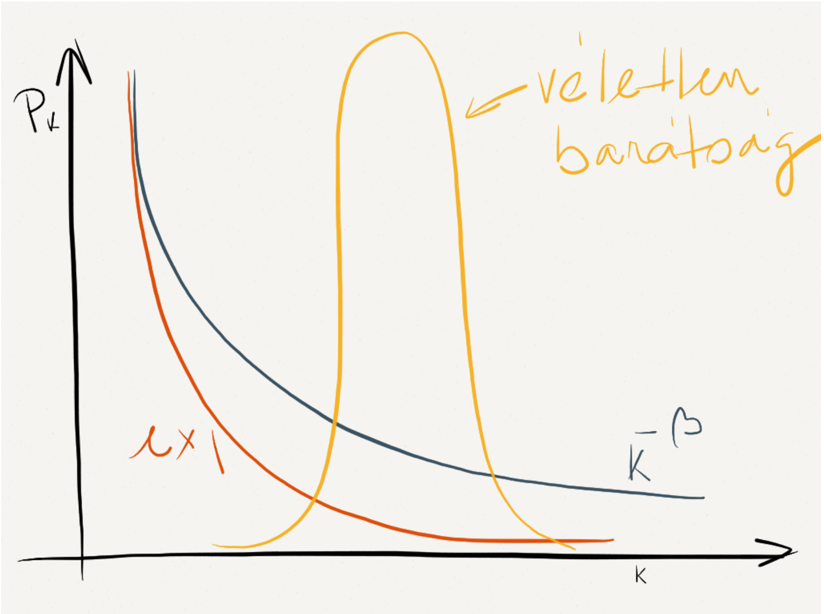
8.1. Hálózatok és tulajdonságaik



8. ábra. Egy egyszerű gráf

A gráfok sok fajtája közül két alapvetőt vizsgálunk meg, mégpedig az Erdős-Rényi gráfot és a Barabási-Albert-féle gráfot. Tegyük fel, hogy N csúcs van a rendszerben. Adott csúcsnál hány él jön be a rendszerbe?

$N_k \to$ adott csúcsok száma, melyekbe pontosan k él megy be. A fokszámeloszlás pedig $P_k = \frac{N_k}{N}$. Az előadás során három fajta fokszámeloszlást fogunk megkülönböztetni.



9. ábra.

Az exponenciális eloszlás a két határeloszlás között található.

8.1.1. Erdős-Rényi gráf

Ebben a gráfban N nagy szám és az élek véletlenszerűek (számuk pedig $\frac{(N-(N-1))}{2}$). Az éleket $\frac{N}{2}\Delta t$ rátával rakjuk le, azaz minden csúcshoz húzhatunk egyet. Az élek száma

$$L = \frac{N}{2}t$$

Mi az átlagos fokszám?

$$\langle k \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} kP_k = \sum_{k=0}^{\infty} k\frac{N_k}{N} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{\infty} kN_k = \frac{2L}{N} = t,$$

azaz az idővel arányosan nő az élszám! Ne feledjük, hogy véletlenszerűen húzunk be egy élet egy csúcsba. Annak a valószínűsége, hogy az N_k csúcs élszáma nő, arányos az N_{k-1} csúcsok számával.

$$N_k(t+\Delta t) = N_k(t) + N_{k-1}\Delta t - N_k\Delta t$$

Tehát felírható a két Master-egyenlet

$$\dot{N}_k = N_{k-1} - N_k \tag{45}$$

$$\dot{N}_0 = -N_0 \tag{46}$$

Valamint

$$\dot{P}_k = P_{k-1} - P_k \tag{47}$$

$$\dot{P}_0 = -P_0 \tag{48}$$

Ezeket megoldani majd a generátor függvénnyel tudjuk.

$$G(s,t) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-sk} P_k(t)$$

$$\partial_t G(s,t) = -P_0 + \sum_{k=1}^{\infty} e^{-sk}(P_{k-1} - P_k) = -G(s,t) + \sum_{k=1}^{\infty} e^{-s(k-1)} P_{k-1} e^{-s} =$$

itt az utolsó szummás tag nem más, mint maga a $G(s,t)$, szóval

$$= \left(-1 + e^{-s}\right) G(s,t)$$

A végeredmény tehát

$$G(s,t) = C \cdot e^{\left(-1+e^{-s}\right)t}$$

Mi a C? A normalizációból megmutatható, hogy ennek egynek kell lenni!

$$G(s,t) = e^{\left(-1+e^{-s}\right)t} = e^{-t} e^{e^{-s}t} = e^{-t} \sum_{k=0}^{\infty} \left(e^{-s} t\right)^k \frac{1}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-sk} \frac{e^{-t} t^k}{k!}$$

Ez remek, hiszen így megvan a keresett valószínűség!

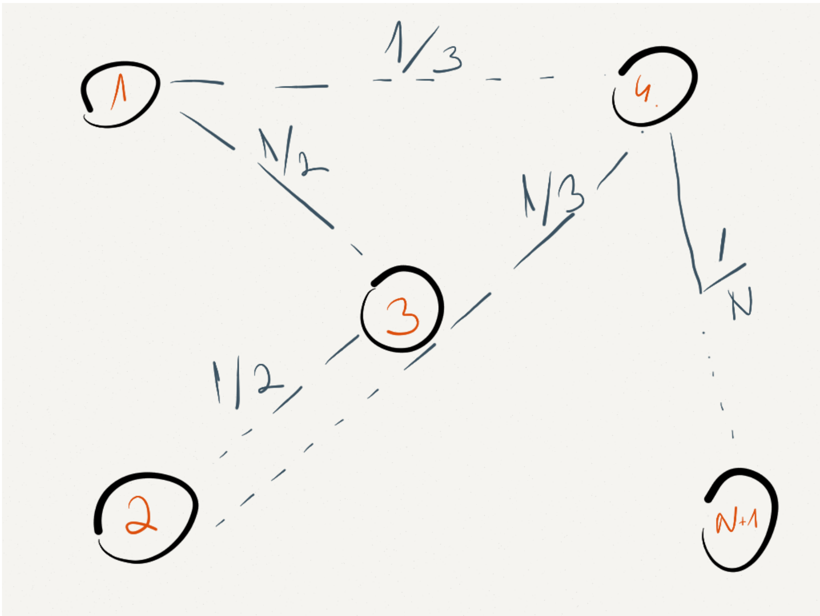
$$P_k = \frac{e^{-t} t^k}{k!} = \frac{e^{-\langle k \rangle} \langle k \rangle^k}{k!}$$

Ez Poisson-eloszlás. Ez az eloszlás nagy k-ra Gaussba megy át. Az eloszlás szórása pedig

$$\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 = \langle k \rangle$$

A Poisson eloszlás szórás négyzete arányos az eloszlás paraméterével. A szórás tehát az átlag gyöke!

8.1.2. Egyszerű dinamikus gráf



10. ábra. A növekvő gráf az ER és BA gráfok között található.

Ilyenkor a Master-egyenlet

$$N_k(N+1) = N_k(N) + \frac{N_{k-1}}{N} - \frac{N_k}{N}$$

$$\frac{\mathrm{d}N_k}{\mathrm{d}N} = \frac{N_{k-1}}{N} - \frac{N_k}{N} \tag{49}$$

$$\frac{\mathrm{d}N_1}{\mathrm{d}N} = -\frac{N_1}{N} + 1 \tag{50}$$

Nagyon nagy N-re érvényes a feltételezés, hogy $N_k = P_k \cdot N$.

$$P_k = P_{k-1} - P_k \to P_k = \frac{1}{2} P_{k-1}$$

$$P_1 = -P_1 + 1 \to P_1 = \frac{1}{2}$$

Ezekből pedig:

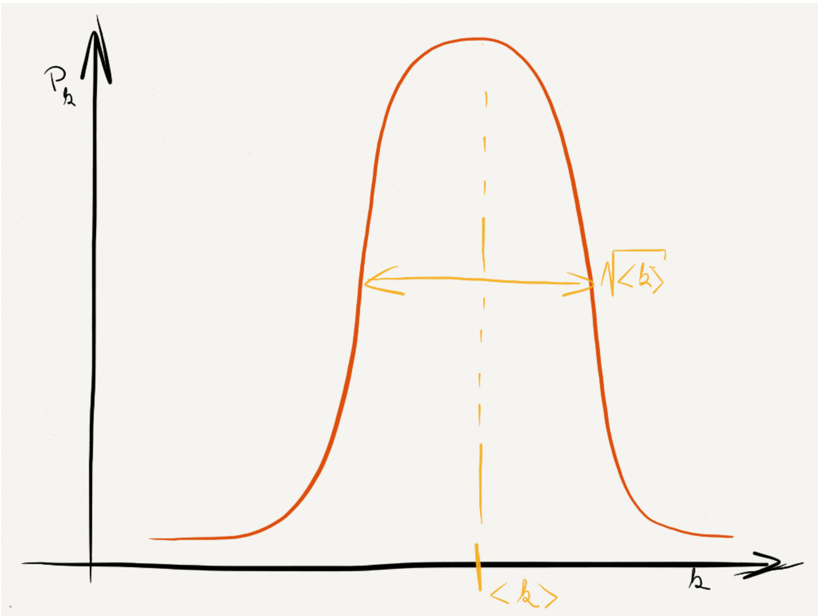
$$P_k = \frac{1}{2^k} = e^{-k \ln 2}$$

Az egyenletekre úgy kell tekinteni, hogy minden lépésben eggyet üt az óra, tehát eggyet adunk hozzá. Ezért van leosztva $1/N$-el az összes mennyiség, hiszen ez a ráta, hogy odakerül valami adott ütésben.

9. Kilencedik előadás - Dinamikai hálózatok - 2013.április 15.

Egy dinamikai hálózatnál érdekelhet minket a fokszámeloszlás, amit a következő képlet ad meg:

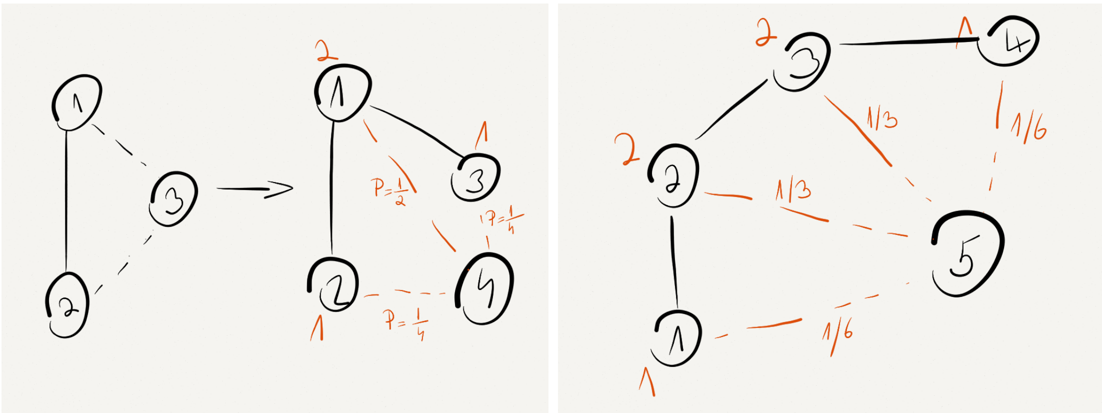
$$P_k = \frac{N_k}{N}$$



11. ábra. Az eloszlás átlaga és szórása

Ez azt jelenti, hogy a csúcsok hányad részének van k éle.

Lineáris preferenciális hálózatok:
– mi a preferenciális csatolódás?



12. ábra. A preferenciális csatolásnál a magasabb fokszámú csúcsok nagyobb valószínűséggel létesítenek új élet.

A preferenciális csatolódás, hogy a ráta arányos az élek számával.

$$\frac{k}{\sum_l kNl} \to \text{ráta}$$

$$\frac{dN_k}{dN} = -\frac{k}{\sum_l lN_l} N_k + \frac{(k-1)}{\sum_l lN_l} N_{k-1}$$

$k = 1$ eset:

$$\frac{dN_1}{dN} = -\frac{1}{\sum_l lN_l} N_1 + 1$$

Mivel egyenlő $\sum_l lN_l$?

$$\sum_l lN_l = (\text{összes él száma}) \cdot 2 = 2N$$

Emiatt az egyenletek egyszerűbben leírhatók!

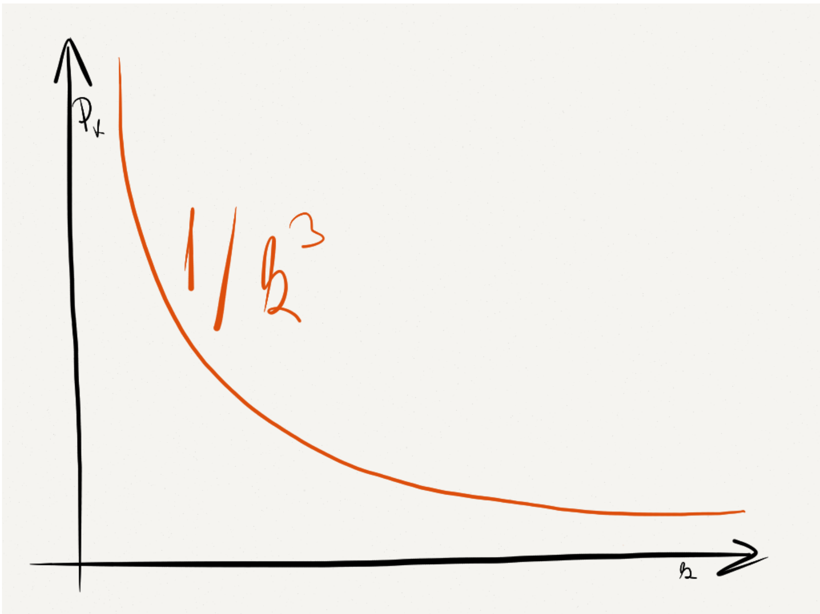
$$\frac{dN_k}{dN} = -\frac{k}{2}\frac{N_k}{N} + \frac{k-1}{2}\frac{N_{k-1}}{N}; \qquad \frac{dN_1}{dN} = -\frac{N_1}{2N} + 1$$

Triviális feltételezés (hiszen minden él két csúcshoz kapcsolódik):

$$\sum_l l\frac{N_l}{N} = 2$$

Feltételezzük továbbá, hogy $N_k = P_k \cdot N$.

$$P_k = -\frac{k}{2}P_k + \frac{k-1}{2}P_{k-1} \to P_k = \frac{k-1}{k+2}P_{k-1} = \frac{(k-1)(k-2)}{(k+2)(k+1)}P_{k-2} =$$
$$= \frac{(k-1)(k-2)...2\cdot 1}{(k+2)(k+1)...\cdot 4}P_1 = \frac{(k-1)!}{(k+2)!}\cdot 3\cdot 2P_1 =$$
$$= \frac{(k-1)!}{(k+2)!}\cdot 4 = \frac{4}{(k+2)(k+1)k} \to P_k\text{nagy k-ra } \sim \frac{1}{k^3}$$



13. ábra. •

$$< k >= \sum_k kP_k \sim \sum \frac{1}{k^2}$$
$$< k^2 >\sim \sum k^2 P_k \sim \sum \frac{1}{k}$$

Rendszerrel kapcsolatos kérdések:

– Mi van akkor, ha a preferencia erősebb, mint lineáris?

$$\frac{k^\alpha}{\sum_l l^\alpha N_l}$$
$$P_k = \frac{\mu}{k^\alpha} e^{-\mu \frac{k^{\alpha-1}-1}{\alpha-1}}$$

Lineáris preferencia csatolódás eltolódással:

$$\frac{k+\lambda}{\sum\limits_l (l+\lambda)N_l}; \qquad P_k \sim \frac{1}{k^3}+\lambda$$

$$\frac{fN_k}{dN} = -\frac{k+\lambda}{\sum\limits_l (l+\lambda)N_l}N_k + \frac{(k-1)+\lambda}{\sum\limits_l (l+\lambda)N_l}N_{k-1}$$

$$\frac{dN_1}{dN} = -\frac{1+\lambda}{\sum\limits_l (l+\lambda)N_l}N_1 + 1$$

$$\frac{dN_k}{dN} = -\frac{k+\lambda}{2+\lambda}\frac{N_k}{N} + \frac{(k-1)+\lambda}{2+\lambda}\frac{N_{k-1}}{N}; \qquad \frac{dN_1}{dN} = -\frac{1+\lambda}{2+\lambda}\frac{N_1}{N}+1$$

$$P_k = -\frac{k+\lambda}{2+\lambda}P_k + \frac{(k-1)+\lambda}{2+\lambda}P_{k-1}; \qquad P_1 = -\frac{1+\lambda}{2+\lambda}P_1 + 1 \to P_1 = \frac{2+\lambda}{3+2\lambda}$$

Használjuk a rekurziót!

$$P_k = \frac{(k-1)+\lambda}{k+2+2\lambda}P_{k-1} = \frac{(k-1+\lambda)(k-2+\lambda)}{(k+2+2\lambda)(k+1+2\lambda)}Pk-2 =$$
$$= \frac{(k-1+\lambda)(k-2+\lambda)...(1+\lambda)}{(k+2+2\lambda)(k+1+2\lambda)...(4+2\lambda)}P_1$$

$\lambda = 1$

$$P_k = \frac{k(k-1)..\cdot 2}{(k+4)(k+3)...\cdot 6}\frac{3}{5} = \frac{k!}{(k+4)!}\cdot a = \frac{a}{(k+4)(k+3)(k+2)(k+1)} \sim \frac{1}{k^4} \sim \frac{1}{k^3+\lambda}$$

10. Tizedik előadás

10.1. Langevin-egyenlet

A második előadáson felírtunk egy egyenletet a Brown-mozgást végző, a-sugarú részecskére, mégpedig

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -6\pi\eta a\frac{dx}{dt} + X$$
$$\langle x^2\rangle = 2Dt$$
$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}$$

Most azonban mást fogunk csinálni! Ugyanazt az esetet vizsgáljuk, csak olyan határesetben, mikor a csillapítás nagyon erős.

$$m\ddot{x} = -6\pi\eta a\dot{x} - \frac{\partial U}{\partial x} + X$$

A kérdés az, hogy mit kell megértenünk erről az véletlen erőről (zajról), hogy szimulálni tudjuk a rendszert (ugyanazt az eredményt szeretnénk kapni)? A $\frac{\partial U}{\partial x}$ mennyiséget felfoghatjuk úgy, mint egy origóba szögezett negatív részecske és egy szabadon engedett pozitív részecske helyzetét. Lényeges dolog, hogy olyan időszakban vizsgálom a rendszert, ahol az túlcsillapított, azaz nincs inerciája. $\ddot{x}$ elhanyagolódik, leosztunk $\mu \equiv \frac{1}{6\pi\tilde{\eta}a}$-val, a zaj $\mu X = \eta$, a

viszkozitás pedig $\tilde{\eta}$ lett.

$$\dot{x} = -\mu kx + \eta$$

Milyen feltételeket kell teljesítenie a zajnak, hogy megkapjuk az egyensúlyi eloszlást?

$$\dot{x} = \eta \tag{51}$$

Azaz nézzük azt a helyzetet, hogy egyelőre nincs is csillapítás?

$$x(t) = x_0 + \int_0^t \eta(t')dt' \to \langle x(t)\rangle = \int_0^t \langle\eta(t')\rangle dt = 0$$

$$\langle\eta(t)\rangle = 0 \tag{52}$$

$$\langle x^2(t)\rangle = \left\langle \int_0^t \eta(t')dt' \int_0^t \eta(t'')dt'' \right\rangle = \int_0^t\int_0^t dt'dt''\,\langle\eta(t')\eta(t'')\rangle = 2Dt$$

Ha ezt a korrelációt tételezzük fel (hogy különböző időpillanatban függetlenek a zajok), akkor megkapjuk a véletlen bolyongást.

$$\langle\eta(t')\eta(t'')\rangle = 2D\delta(t'-t'') \tag{53}$$

Ez a választás a zajnak azt az eredményt adja, melyet tudunk, hogy kapnunk kell. Most pedig vizsgáljuk meg azt a helyzetet, hogy megvan a rugó. Mit kell most teljesíteni a zajnak, hogy egyensúlyi eloszlást kapjunk. Azért hasznos megérteni az ilyen tárgyalásmódot, mert az ember nagyon gyakran túlcsillapított egyenletként kapja azt a problémát, melyet meg kell oldania (kiszámolandó dolgok + zaj). Ahhoz, hogy ezeket a rendszereket szimulálni tudjuk és ebből valami egyensúlyi eloszlást kapjunk, a zajról kell tudni mondani valamit.

$$\dot{x} = -\mu k x \to x(t) = x_0 e^{-\mu k t} + \int\limits_0^t e^{-\mu k(t-t')} \eta(t') dt'$$

$$\langle x(t) \rangle = x_0 e^{-\mu k t}$$

$$\langle x^2 \rangle = \left\langle \left(x_0 e^{-\mu k t} + \int\limits_0^t e^{-\mu k(t-t')} \eta(t') dt' \right) \cdot \left(x_0 e^{-\mu k t} + \int\limits_0^t e^{-\mu k(t'-t'')} \eta(t'') dt'' \right) \right\rangle =$$

a következő lépésben éta átlaga ki fog esni, hiszen az nulla, tehát ami megmarad

$$= x_0 e^{-2\mu k t} + \int\limits_0^t \int\limits_0^t e^{-\mu k(2t-t'-t'')} \langle \eta(t') \eta(t'') \rangle =$$

A $\langle \eta(t') \eta(t'') \rangle$ mennyiség nem más, mint $2D\delta(t'-t'')$. tudjuk továbbá azt is, hogy $U = \frac{1}{2}kx^2$, valamint $P(x) = \frac{1}{z} e^{-\beta \frac{1}{2} k x^2}$.

$$= \langle x^2 \rangle = \frac{1}{z} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta \frac{1}{2} k x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} \ln \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-} - \alpha x^2 dx =$$

Legyen $\alpha = \frac{\beta k}{2}$ és $z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta k x^2/2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx$. Ezzel pedig a végeredmény

$$= -\frac{d}{d\alpha} \ln \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = -\frac{d}{d\alpha} \left(-\frac{1}{2} \ln \alpha + \text{const} \right) = \frac{1}{2\alpha}$$

Korábbról tudjuk, hogy

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{k}$$

$$\frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{D}{\mu k} = \frac{k_B T}{k}$$

Azaz, hogy egy bármilyen zaj jó egyensúlyhoz vigye a rendszert

$$D = \mu k_B T = \frac{k_B T}{6\pi \tilde{\eta} a}$$

A lényeg tehát, hogy a hőmérséklettel arányos legyen a zaj amplitúdója.

11. Tizenegyedik előadás

Legyen $U = \frac{1}{2}kx^2$ potenciálunk!

$$P_{\text{eq}}(x) = \frac{1}{z}e^{-\beta\frac{1}{2}kx^2} \to \frac{1}{2}k < x^2 >= \frac{1}{2}k_bT$$

A fenti egyenlet az ekvipartíció.

$$D = \mu k_b T \to \frac{k_b T}{6\pi\tilde{\eta}a}$$

$$\tilde{P}(\eta(t)) = \frac{1}{z_\eta}e^{-\frac{\eta^2}{2\sigma^2}}$$

$$\frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = -\mu x(t)$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) - \mu x(t)\Delta t + F_{\text{random}}\eta(t, \Delta t)$$

Az η-ra feltettük, hogy az átlaga nulla és korrelációi nullák. Egy adott pillanatban a korrelációja Gauss eloszlású. Ha ebben az 1 korrelációban az amplitúdót jól megválasztom, akkor a rendszer az egyensúlyhoz relaxál. A D a korreláció amplitúdója, t a szórás négyzettel arányos!

$$\tilde{P}_t(\eta(t)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}}e^{-\frac{\eta^2(t)}{4D\Delta t}}$$

$$\tilde{P}(\eta(t_1), ..., \eta(t_n)) = \prod_{t_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}}e^{-\frac{\eta^2(t)}{4D\Delta t}} = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}}\right)^2 \cdot e^{-\frac{1}{4D\Delta t}\sum\limits_i \eta^2(t_i)} =$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}}\right)^n e^{-\frac{1}{4D\Delta t}\int\limits_{t_1}^{t_2}\eta^2(t')} dt'$$

Legyen $P_{\text{stac}}(x) \sim e^{-U/kT}$

$$\dot{x} = -\mu\frac{\partial U}{\partial x} + \eta$$

Mostantól kezdve a fenti állítások bizonyítása következik. A fenti egyeletben megjelenő η a zaj!

$$x(t+\Delta t) = x(t) - \mu\frac{\partial U}{\partial x}\Delta t + \eta(t, \Delta t)$$

Ha nincs U (külső potenciál), akkor a rendszer véletlen bolyongást végez. hogy ez tényleg véletlen bolyongás legyen, ahhoz az kell, hogy a zaj eloszlásfüggvényében az amplitúdó négyzet a Δt-vel legyen leosztva.

$$< \eta(t) >= 0$$

$$< \eta(t)\eta(t') >= 2D\delta(t-t')$$

$$\tilde{P}(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}} e^{-\frac{\eta^2}{4D\Delta t}}$$

$$(x(t_1) = x(t_0) + \eta(t_0))$$

$$x(t_2) = x(t_1) + \eta(t_1) = x(t_0) + \eta(t_0) + \eta(t_1)$$

$$x(t_n) = x(t_0) + x(t_1) + ... + x(t_{n-1}) + \eta(t_{n-1}) + ... + \eta(t_0) = x(t_0) + \sum_{i=0}^{n-1} \eta(t_i)$$

$$< [x(t_n) - x(t_0)]^2 >= \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} < \eta(t_i)\eta(t_j) >= \sum_{i=0}^{n-1} < \eta^2(t_i) >= n2D\Delta t = 2Dt$$

Chapman-Kolmogorov egyenlet:

$$\hat{P}(x, t+\Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, x'; \Delta t)\hat{P}(x', t)dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}} e^{-\frac{(x-x'-v(x')\Delta t)^2}{4D\Delta t}} \hat{P}(x', t)dx'$$

Az átmeneti rátákat jól kell meghatározni. Van egy determinisztikus rész, ami egy jól definiált dolog és a zaj, ami véletlenszerű. Azt a determinisztikus részt (és zajt) kell betenni, ami az x-ből az x'-be visz el. A Chapman-Kolmogorov egyenletet sorba fejtjük:

Változócserét alkalmazunk:

$y = x' + v(x')\Delta t - x$

$dy = dx' \frac{\partial v(x')}{dx'} dx' \Delta t = \left(1 + \frac{\partial v(x')}{\partial x'} \Delta t\right) dx'$

$dx' = \frac{dy}{1 + \frac{\partial v(x)}{\partial x \Delta t}} = \left(1 - \frac{\partial v}{\partial x} \Delta t\right) dy$

Folytassuk a megkezdett integrált!

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{4D\Delta t}} \left(1 - \frac{\partial v}{\partial x} \Delta t\right) \hat{P}(x + y - v(x)\Delta t, t) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi D\Delta t}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{4D\Delta t}} \left(1 - \frac{\partial v}{\partial x}\Delta t\right) \left[\hat{P}(x,t) + (y - v(x)\Delta t)\frac{\partial \hat{P}}{\partial x} + \frac{1}{2}(y - v(x)\Delta t)^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + ...\right] =$$

$$= \hat{P}(x,t) - \frac{\partial v}{\partial x}\hat{P}(x,t)\Delta t - v(x)\frac{\partial \hat{P}}{\partial x}\Delta t + \frac{1}{2}\overline{y^2}\frac{\partial^2 \hat{P}}{\partial x^2}\Delta t$$

Felírható a Fokker-Plack egyenlet:

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(v(x)\hat{P}(x,t)) + D\frac{\partial^2 \hat{P}}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = \mu\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\hat{P}\right) + D\frac{\partial^2 \hat{P}}{\partial x^2}$$

A fenti egyenlet a stacionárius megoldás. (egyensúlyi eloszlás)

$$P_{\text{stac}} = \frac{1}{z}e^{-\frac{U}{k_b T}}$$

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}, \text{ ahol J a valószínűségi áram}$$

Egyensúly, áram nélkül:

$$\mu\frac{\partial U}{\partial x}\hat{P}_{\text{stac}} + D\frac{\partial \hat{P}_{\text{stac}}}{\partial x} = 0$$

$$-\frac{\mu}{D}\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial ln\hat{P}_{\text{stac}}}{\partial x}$$

$$-\frac{\mu}{D}U = ln\hat{P}_{\text{stac}} + C$$

$$\hat{P}_{\text{stac}} = Ce^{-\frac{\mu U}{D}}$$

$$D = \mu k_b T \to \hat{P}_{\text{stac}} = \frac{1}{z}e^{-\frac{U}{k_b T}}$$

12. Tizenkettedik előadás

Múlt órán a Langevin közelítést vizsgáltuk, most pedig erre nézünk analógiákat!

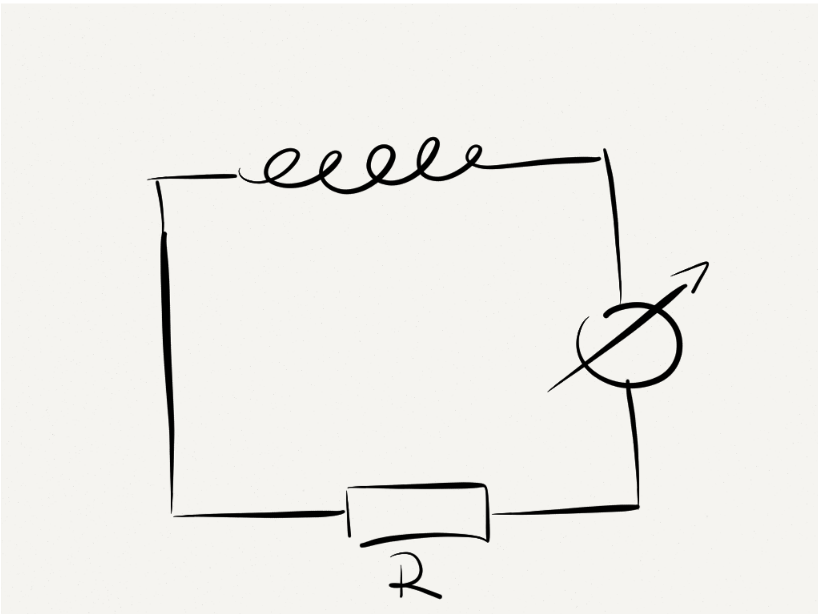
$$\dot{x} = -\mu \frac{\partial U}{\partial x} + \eta$$

Azt néztük, hogy az étának milyennek kell lenni, hogy az átlagok ugyanolyanok legyenek, mintha a $P_{eq} = \frac{1}{z} e^{-\frac{U(x)}{k_B T}}$-vel számolnánk.

Ha az η Gauss zaj és nem korrelál, akkor az azt jelent, hogy a Δt távolsággal arányos a zaj szórása.

$$\langle \eta(t) \rangle = 0$$
$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2D\delta(t - t')$$
$$D = \mu k_B T$$

Ahhoz, hogy az egyensúlyhoz relaxáljon a rendszer az kell, hogy a zaj amplitúdója μ-vel is arányos legyen. Vegyük a következő példát:

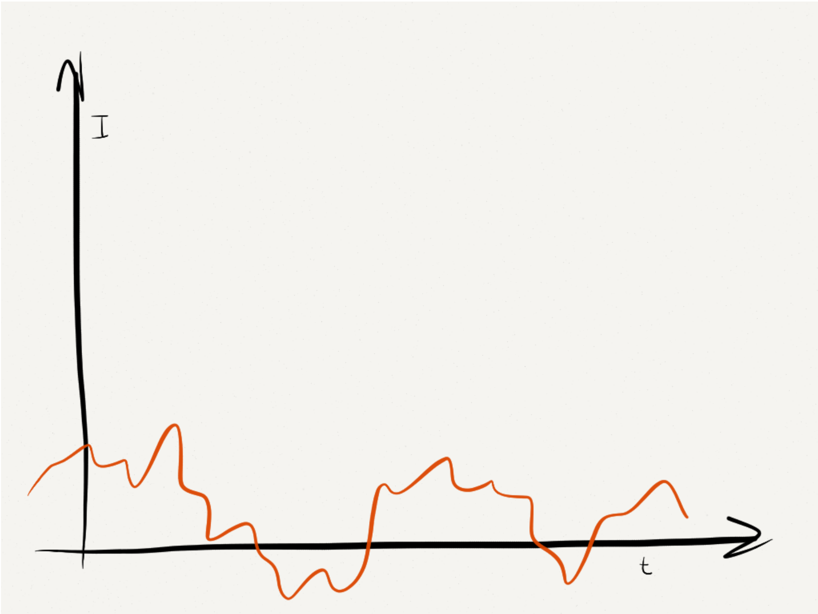


14. ábra.

Bár az áramkörben nincs áram (hiszen $< I >= 0$), de finom árammérővel az áram fluktuációi kimérhetők.

Az áramfluktuáció a hőmérséklet következménye, a fonon-elektron fluktuációval magyarázható.

$$L\frac{dI}{dt} + RI = V_T$$



15. ábra.

A V_T valami termális erő. Még nem tudunk róla semmit sem. Ha a helyére nullát írnánk, igaz lenne az is, csak akkor nem tudnánk kiszámolni a fluktuációt.

$$\dot{x} = -\mu k x + \eta$$

$$\dot{I} = -\frac{R}{L} I + \eta_T(t)$$

Látjuk, hogy teljesen hasonlóak, ezért maga az $\eta_T(t) = V_T$. Szóval

$$x \leftrightarrow I$$

$$\mu k \leftrightarrow \frac{R}{L}$$

Mi a valószínűsége annak, hogy a rendszerben I áram folyik? Azt tudjuk már régebbről, hogy $\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{k}$.

$$P(I) = \frac{1}{z_I} e^{-\frac{E(I)}{k_B T}}$$

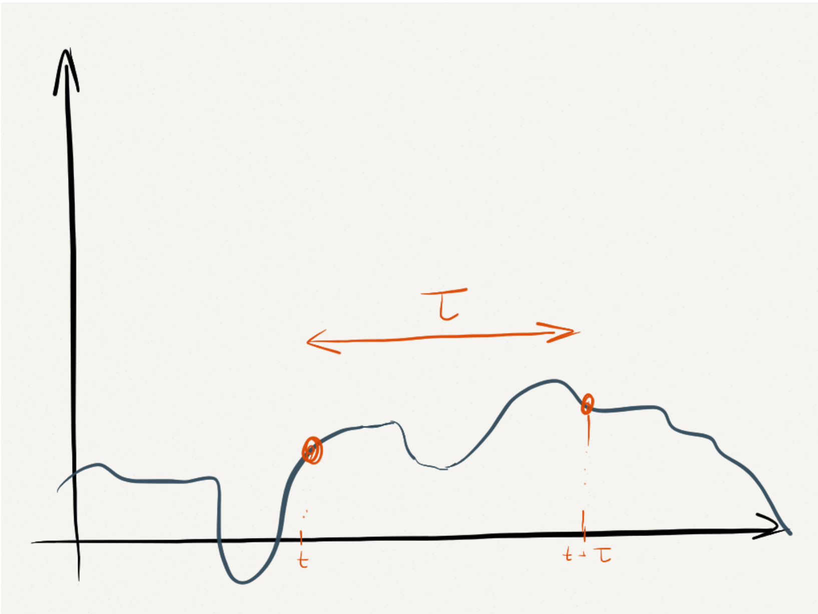
Legyen $k \leftrightarrow R$ és $\mu \leftrightarrow \frac{1}{L}$. Így pedig $P(I) = \frac{1}{z_I} e^{-\frac{RI^2}{2k_B T}}$, amivel

$$dE = IdU = RIdI$$

$$E(I) = R \int_0^I I' dI' = \frac{1}{2} R I^2$$

Tehát
$$\langle I^2 \rangle = \frac{k_B T}{R}$$
Szóval ha hőmérséklet fluktuációkat vizsgálunk, akkor mindent le tudunk írni, hiszen az egyenletek analógak.

Vizsgáljuk most az időkorrelációkat $\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = c(\tau)$.



16. ábra.

$$x(t) = x(0)e^{-\mu k t} + \int_0^t e^{-\mu k(t-t')}\eta(t')dt'$$
Legyen $\mu k = \Gamma$.
$$x(t) = x(0)e^{-\Gamma t} + \int_0^t e^{-\Gamma(t-t')}\eta(t')dt'$$
$$x(t+\tau) = x(0)e^{-\Gamma(t+\tau)} + \int_0^{t+\tau} e^{-\Gamma(t+\tau-t'')}\eta(t'')dt''$$
A következő mennyiség, amit fel kell írnunk, az az $x(t)x(t+\tau)$ lesz, amit én most nem írok fel, mert egy csomó olyan tag van benne, amelyeket el fogunk veszíteni, hiszen arra

pályázunk, hogy a $\langle x(t)x(t+\tau)\rangle$ mennyiséget kiszámoljunk, ebben pedig az összes olyan tag, ahol η szerepel, nullát ad, hiszen annak a várható értéke zérus.

$$\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = x^2(0)e^{-\Gamma(2t+\tau)} + 2D\int\limits_0^t e^{-\gamma(t-t')}e^{-\gamma(t+\tau-t')}dt' =$$

$$= x^2(0)e^{-\Gamma(2t+\tau)} + 2D\int\limits_0^t e^{-2\gamma(t-t')}dt'e^{-\gamma\tau} = x^2(0)e^{-\Gamma(2t+\tau)} + \frac{D}{\Gamma}e^{-2\Gamma(t-t')}\Big|_0^t \cdot e^{-\Gamma\tau} =$$

$$= x^2(0)e^{-\Gamma(2t+\tau)} + \frac{D}{\Gamma}e^{-\Gamma\tau}\left(1-e^{-2\Gamma t}\right)$$

Összegezzük a dolgokat!

$$D = \mu k_B T$$

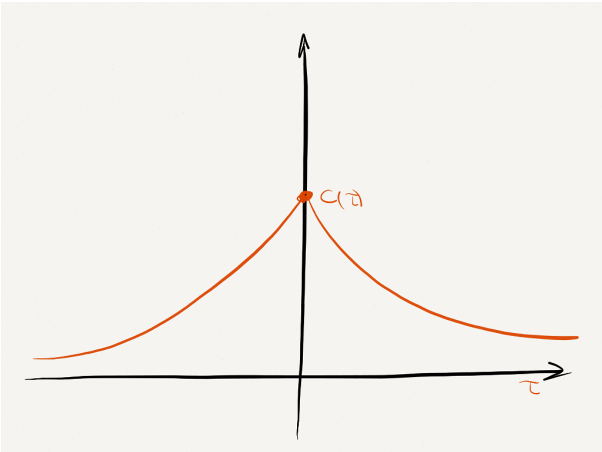
$$\langle x^2\rangle = \frac{k_B T}{k}$$

$$\frac{D}{\Gamma} = \frac{\mu k_B T}{\mu k} = \frac{k_B T}{k}$$

$$\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = c(\tau) = \frac{k_B T}{k}e^{-\mu k|\tau|}$$

Az utolsó kifejezés tehát tetszőleges taura igaz, mert feljebb tettünk egy feltételt, hogy nullánál nagyobb taukra értékeljük ki a dolgokat. Ha megvizsgálnánk a fordított helyzetet is, azaz, hogy tau kisebb, mint nulla, azt tapasztalnánk, hogy $c(\tau) = c(-\tau)$.

$$\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = c(\tau) = \frac{k_B T}{k}e^{-\mu k|\tau|} = Ae^{-\Gamma(t)}$$



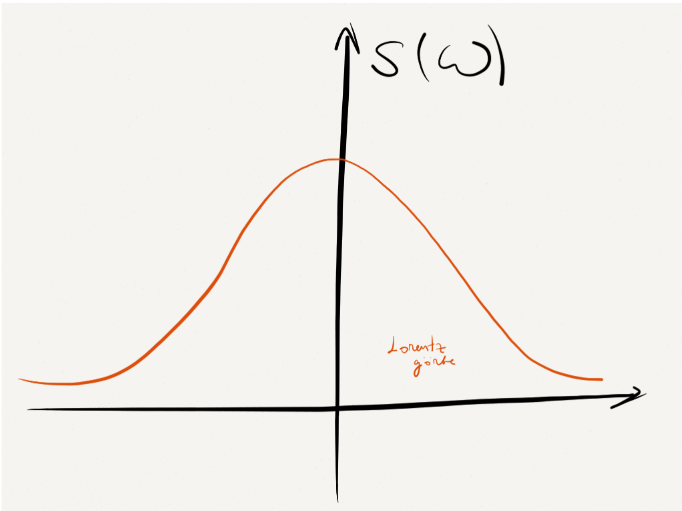
17. ábra.

A teljesítményspektrum:

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{0}^{\infty} e^{i\omega t} c(t) dt =$$

(nem más ez, mint az autokorrelációs függvény Fourier transzformáltja.

$$= \frac{A}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} e^{-\Gamma|t|} dt = \frac{A}{2\pi} \left[\int\limits_{-\infty}^{0} e^{(i\omega+\Gamma)t} dt + \int\limits_{0}^{\infty} e^{(i\omega-\Gamma)t} dt \right] = ... = \frac{A}{\pi} - \frac{\Gamma}{\omega^2 + \Gamma^2}$$



18. ábra.