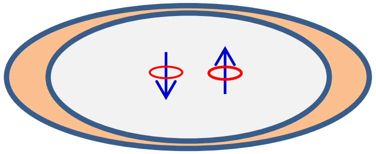
Master egyenlet diszkrét állapottérben I

Einstein:
Valószínűségi folyamatok
→ eloszlások időfejlődése

Diszkrét állapottér:
A vizsgált állapotok száma véges ($n = 1, 2, \ldots, N$).
A többit termális háttérként (hőtartályként) kezeljük.



2 spin 1/2

$w(2 \leftarrow 1)$

	Marci	Julcsi		Spin1	Spin2	
1			$P(1,t)$	↑	↑	$P(\uparrow\uparrow,t)$
2			$P(2,t)$	↑	↓	$P(\uparrow\downarrow,t)$
3			$P(3,t)$	↓	↑	$P(\downarrow\uparrow,t)$
4			$P(4,t)$	↓	↓	$P(\downarrow\downarrow,t)$

$P(\mathbf{s},t)$

$P(s_1,s_2,t)$

$$P(1,t+dt) = P(1,t) - w(2\leftarrow 1)dt\, P(1,t) + w(1\leftarrow 2)dt\, P(2,t) + \ldots$$

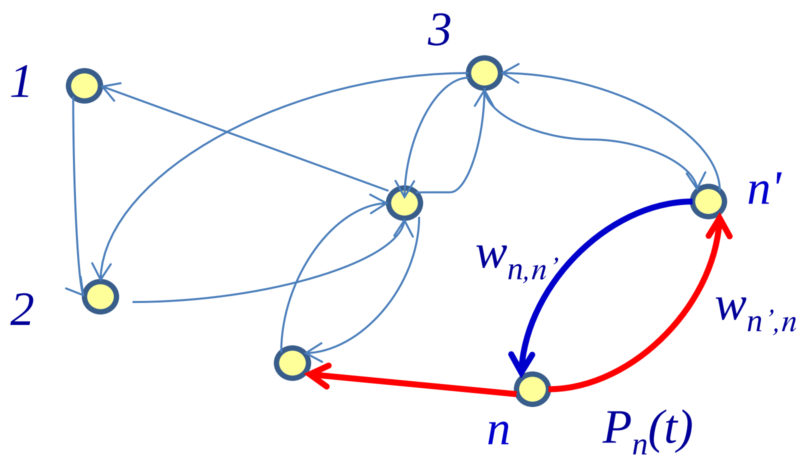
$$\partial_t P(1,t) = - w(2\leftarrow 1)P(1,t) + w(1\leftarrow 2)P(2,t) + \ldots$$

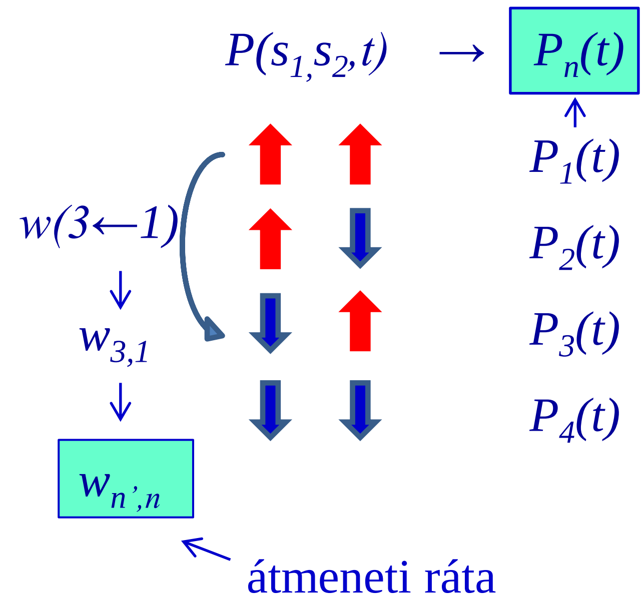
$\vdots$

Honnan vesszük a $w(j \leftarrow i)$ átmeneti rátákat?

Master egyenlet diszkrét állapottérben II

Állapotok: $n = 1, 2, \ldots, N$.





Master egyenlet: $P_n(t)$ időfejlődése

$$P_n(t+dt) = P_n(t) - \sum_{n'} w_{n'n} dt\, P_n(t) + \sum_{n'} w_{nn'} dt\, P_{n'}(t)$$

$$\boxed{w_{n',n}\ dt}$$

$$\frac{P_n(t+dt) - P_n(t)}{dt} = -\sum_{n'} w_{n'n}\, P_n(t) + \sum_{n'} w_{nn'}\, P_{n'}(t)$$

Annak a valószínűsége, hogy dt idő alatt a rendszer az n-ből az n' megy át

$$\boxed{\dot{P}_n(t) = -\sum_{n'} w_{n'n}\, P_n(t) + \sum_{n'} w_{nn'}\, P_{n'}(t)}$$

$w_{n',n}$?

Átmeneti ráták – egyensúlyhoz relaxálás

Honnan vesszük a $w_{n'n}$ átmeneti rátákat?

Elvileg: QM Fermi aranyszabálya $\quad w_{n'n} \sim \frac{2\pi}{h} |< n\,|\hat{H}|\, n' > |^2 \rho(\varepsilon_{n'})$

Valójában: (1) Marci-Julcsi esetén $w_{n'n}$ fenomenologikus meggondolásokból.

(2) Fizikában: $w_{n'n}$ az elhanyagolt szabadsági fokokra átlagolásból (általánosan még mindig kivitelezhetetlen)

(3) A háttér T hőmérsékletű hőtartályként értelmezhető $\longrightarrow$ a rendszer egyensúlyhoz kell relaxáljon

lásd: Brown mozgás

Az egyensúlyi eloszlás ismert

$$\boxed{P_n^{(e)} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}}$$

E_n	$\beta = \frac{1}{kT}$	$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$
energia	hőmérséklet	állapotösszeg

Az egyensúlyi eloszlás stacionárius

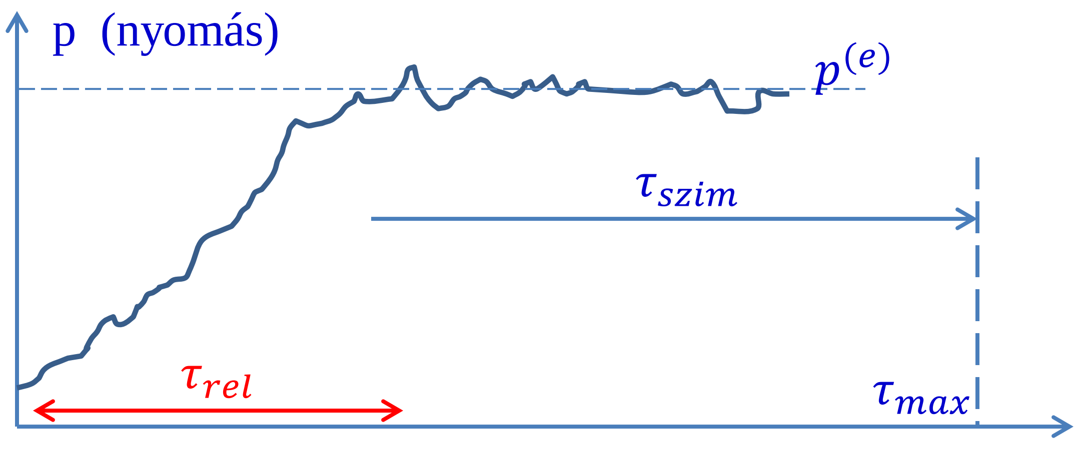
$$\boxed{\dot{P}_n^{(e)} = -\sum_{n'} w_{n'n} P_n^{(e)} + \sum_{n'} w_{nn'} P_{n'}^{(e)} = 0}$$

Ha sikerül olyan rátákat találnunk, amelyekre $e^{-\beta E_n}$ stacionáris megoldás, akkor módszerünk az egyensúly szimulációjára.

Átmeneti ráták – egyensúlyi szimulációk

Egyensúlyi rendszerek számolásának problémája

Tegyük fel, hogy találtunk olyan $w_{n'n}$ -t, amelyekre
$P_n^{(e)} \sim e^{-\beta E_n}$ stacionárius megoldás



$$<f(n)> = \frac{1}{Z}\sum_n f(n)\, e^{-\beta E_n}$$

10^{23} tag ismerjük

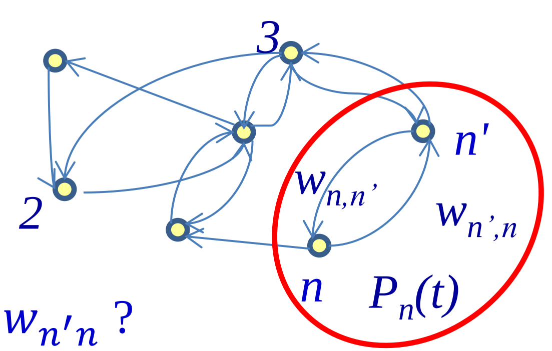
Megoldás:

Ergodicitás
sokaság átlag = időátlag

Tehát:

(1) Megoldjuk a master egyenletet
(2) Mérjük az f(n,t) mennyiséget
(3) Átlagolunk időben, ha τ_{rel} becsülhető, akkor $t > \tau_{rel}$ időkre átlagolunk.
(4) Hibabecslések: *1*
  a) τ_{max} , τ_{rel} változtatása
  b) mérések száma
  c) rendszer mérete

$$<f(n)> = \frac{1}{Z}\sum_n f(n)\, e^{-\beta E_n} \approx \frac{1}{\tau_{max}}\int_0^{\tau_{max}} f(n,t)\,dt$$



Használható $w_{n'n}$?

Részletes egyensúly feltétele

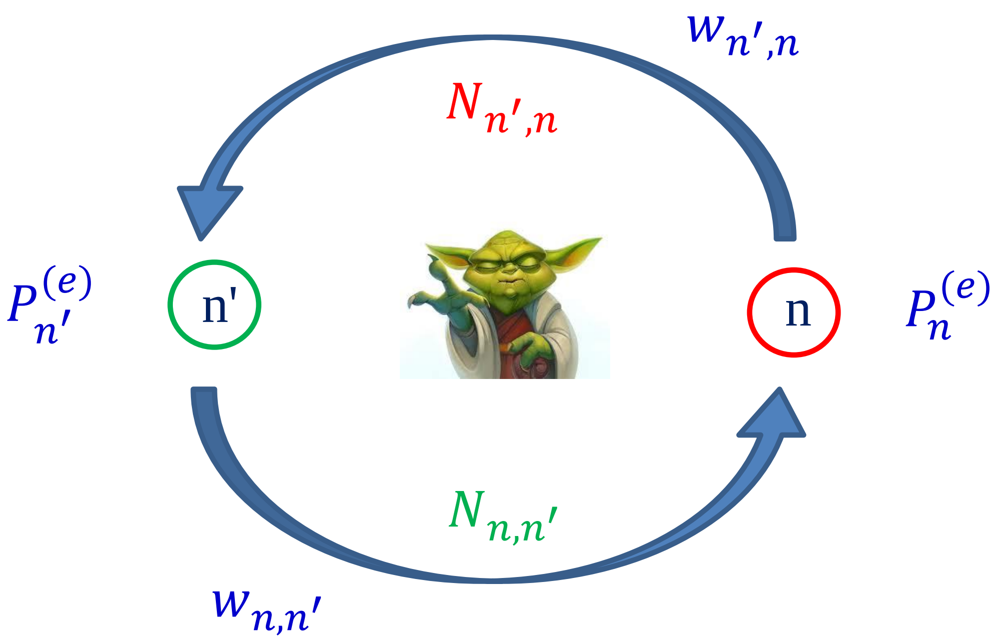
Egyensúlyban az időtükrözési szimmetria korlátozza a lehetséges $w_{n',n}$-eket.

Az $n \to n'$ átmenetek száma (egységnyi idő alatt):

$$N_{n',n} = w_{n',n}\, P_n^{(e)}$$

$n' \to n$ esetre:

$$N_{n,n'} = w_{n,n'}\, P_{n'}^{(e)}$$



$$\boxed{N_{n',n} = N_{n,n'}}$$

Másképp a film mást mutatna ellenkező irányban futtatva.

$$\boxed{w_{n,n'}\, P_{n'}^{(e)} = w_{n',n}\, P_n^{(e)}}$$

A részletes egyensúlyt kielégítő $P_n^{(e)}$-k stacionárius megoldások:

$$\dot{P}_n^{(e)} = -\sum_{n'} w_{n'n}\, P_n^{(e)} + \sum_{n'} w_{nn'} P_{n'}^{(e)} = 0$$

páronként kiejtik egymást

Praktikus rátaválasztás

$$w_{n,n'}\, P_{n'}^{(e)} = w_{n',n}\, P_{n}^{(e)}$$

$$\underline{\underline{\frac{w_{n',n}}{w_{n,n'}}}} = \frac{P_{n'}^{(e)}}{P_{n}^{(e)}} = \frac{e^{-\beta E_{n'}}}{e^{-\beta E_{n}}} = e^{-\beta(E_{n'}-E_{n})} = e^{-\beta \Delta E_{n'n}} = \underline{\underline{\frac{e^{-\beta \Delta E_{n'n}}}{1}}} = \frac{1}{e^{-\beta \Delta E_{nn'}}}$$

$$w_{n',n} = \begin{cases} \sim e^{-\beta \Delta E_{n'n}} & \text{ha} \quad \Delta E_{n'n} > 0 \\ \sim 1 & \text{egyébként} \end{cases}$$

Dimenzió? $[w_{n',n}] = 1/s$

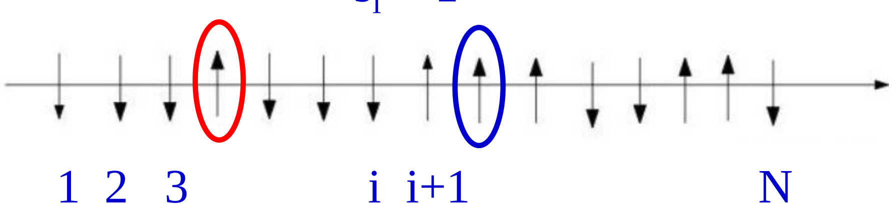
$$\boxed{w_{n',n} = \begin{cases} \frac{1}{\tau} e^{-\beta \Delta E_{n'n}} & \text{ha} \quad \Delta E_{n'n} > 0 \\ \frac{1}{\tau} & \text{egyébként} \end{cases}}$$

τ adja az időskálát (szimulációban a lépések időskálája $\tau=1$)

Ising model

Egy irányban állás preferált

$s_i = \pm 1$

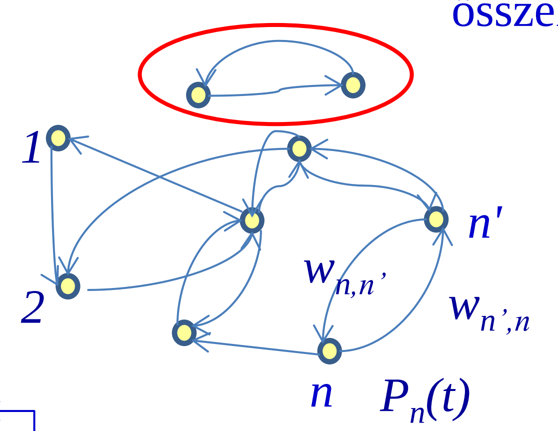


$E(i,i+1) = -J\, s_i\, s_{i+1}$

Kapcsolat az igazi időskálával: Bármely spin fordulhat, a mérettől független időlépés: $N\tau$

$P_n^{(e)}$ egyetlen stacionárius állapot?

Igen, ha
(1) N véges
(2) az állapottér irreducibilis = összekötött



A bizonyítás gondolatmenete:
(1) Master egyenlet mátrix alakban

$$\underline{P} = \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ P_N \end{pmatrix} \qquad \partial_t \underline{P} = \boldsymbol{A}\underline{P}$$

dinamikai mátrix

$$A_{nn'} = w_{nn'} - \sum_{n''} w_{n''n}\delta_{nn'}$$

stochasztikus mátrix

$$\sum_n A_{nn'} = 0$$

(2) A dinamikai mátrix spektruma

$$\boldsymbol{A}\underline{P_i} = \lambda_i \underline{P_i} \qquad \underline{P_i}(\mathrm{t}) = \underline{P_i}(0)e^{\lambda_i t}$$

(3) Egyensúly stacionárius stabilitás: $\mathrm{Re}\,\lambda_i < 0$

$$\boldsymbol{A}\underline{P}^{(e)} = 0 \qquad \lambda_0 = 0$$

(4) Perron-Frobenius:
Stochasztikus mátrixok legnagyobb és legkisebb sajátértéke nem degenerált