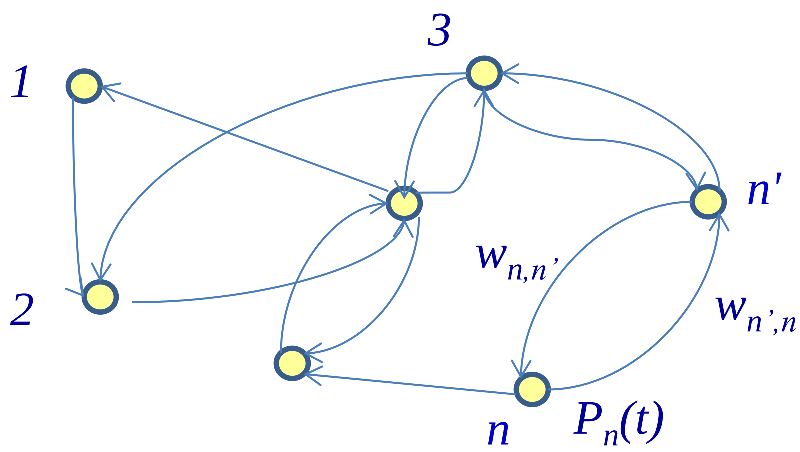
Master egyenlet, diszkrét állapottér: 2 Ising spin hőtartályban



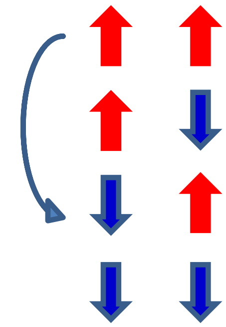
$P(s_1,s_2,t) \rightarrow \boxed{P_n(t)}$

$w_{3,1}$

$\downarrow$

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

átmeneti ráta



$P_1(t)$

$P_2(t)$

$P_3(t)$

$P_4(t)$

Master egyenlet: $P_n(t)$ időfejlődése

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

Egyensúly T hőmérsékleten:

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

Egy lehetséges átmeneti ráta választás:

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

Részletes egyensúly feltétele:

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

2 Ising spin hőtartályban -- egyensúly

$s_1 = \pm 1 \quad s_2 = \pm 1$

s_1	s_2	$P(s_1, s_2, t)$
↑	↑	$P(\uparrow\uparrow, t)$
↑	↓	$P(\uparrow\downarrow, t)$
↓	↑	$P(\downarrow\uparrow, t)$
↓	↓	$P(\downarrow\downarrow, t)$

$E(s_1, s_2) = -Js_1 s_2$ ferromágneses kölcsönhatás $J > 0$

$E(\uparrow\uparrow) = E(\downarrow\downarrow) = -J \qquad E(\uparrow\downarrow) = E(\uparrow\downarrow) = J$

Egyensúlyi eloszlás:

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

Normalizáció:

$$\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{Z} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{K s_1 s_2} = 1$$

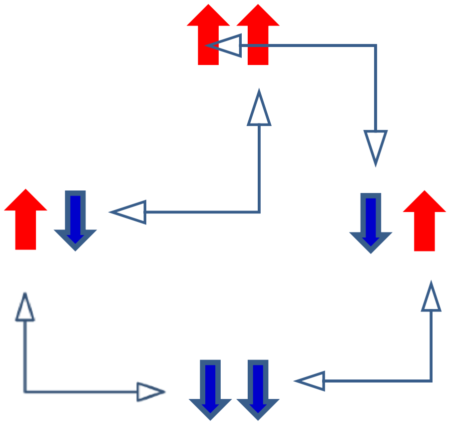
Állapotösszeg:

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} e^{K s_1 s_2} = e^K + e^{-K} + e^{-K} + e^K = 2(e^K + e^{-K})$$

$$P^{(e)}(\uparrow\uparrow) = P^{(e)}(\downarrow\downarrow) = \frac{e^K}{2(e^K + e^{-K})} > P^{(e)}(\uparrow\downarrow) = P^{(e)}(\downarrow\uparrow) = \frac{e^{-K}}{2(e^K + e^{-K})}$$

2 Ising spin hőtartályban – spin-flip dinamika

$s_i \to -s_i \quad i = 1, 2$



$\boxed{w_1(s_1,s_2)}$ $\boxed{w_2(s_1,s_2)}$:az $\boxed{s_1,s_2}$ állapotban $\boxed{s_1}$ $\boxed{s_2}$ átfordulási rátája

Master egyenlet

$$\dot{P}(s_1,s_2,t) = -[\, w_1(s_1,s_2) + w_2(s_1,s_2)]P(s_1,s_2,t) + w_1(-s_1,s_2)P(-s_1,s_2,t) + w_2(s_1,-s_2)]P(s_1,-s_2,t)$$

$\boxed{w_1(s_1,s_2)}$ $\boxed{w_2(s_1,s_2)}$ választása: részletes egyensúly

$$w_1(s_1,s_2)P^{(e)}(s_1,s_2) = w_1(-s_1,s_2)P^{(e)}(-s_1,s_2)$$

$$w_2(s_1,s_2)P^{(e)}(s_1,s_2) = w_2(s_1,-s_2)P^{(e)}(s_1,-s_2)$$

$$\frac{w_1(s_1,s_2)}{w_1(-s_1,s_2)} = \frac{e^{-2Ks_1s_2}}{1} = \frac{1}{e^{2Ks_1s_2}}$$

$$\frac{w_2(s_1,s_2)}{w_2(s_1,-s_2)} = \frac{e^{-2Ks_1s_2}}{1} = \frac{1}{e^{2Ks_1s_2}}$$

$\rightarrow$

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

$$\boxed{w_1(\uparrow,\downarrow) = w_1(\downarrow,\uparrow) = w_2(\uparrow,\downarrow) = w_2(\downarrow,\uparrow) = 1}$$

2 Ising spin hőtartályban – a dinamikai mátrix számolása

Átmeneti ráták: $w_1(\uparrow,\uparrow) = w_1(\downarrow,\downarrow) = w_2(\uparrow,\uparrow) = w_2(\downarrow,\downarrow) = e^{-2K}$

$w_1(\uparrow,\downarrow) = w_1(\downarrow,\uparrow) = w_2(\uparrow,\downarrow) = w_2(\downarrow,\uparrow) = 1$

Master egyenlet

$$\begin{aligned}
\dot{P}(\uparrow,\uparrow,t) &= -2e^{-2K}P(\uparrow,\uparrow,t) + P(\downarrow,\uparrow,t) + P(\uparrow,\downarrow,t) + 0 \\
\dot{P}(\downarrow,\uparrow,t) &= e^{-2K}P(\uparrow,\uparrow,t) - 2\,P(\downarrow,\uparrow,t) + 0 + e^{-2K}P(\downarrow,\downarrow,t) \\
\dot{P}(\uparrow,\downarrow,t) &= e^{-2K}P(\uparrow,\uparrow,t) + 0 - 2P(\uparrow,\downarrow,t) + e^{-2K}P(\downarrow,\downarrow,t) \\
\dot{P}(\downarrow,\downarrow,t) &= 0 + P(\downarrow,\uparrow,t) + P(\uparrow,\downarrow,t) - 2e^{-2K}P(\downarrow,\downarrow,t)
\end{aligned}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{\dot{\vec{P}}(t) = \boldsymbol{A}\,\vec{P}(t)}$$

Dinamikai mátrix

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -2e^{-2K} & 1 & 1 & 0 \\ e^{-2K} & -2 & 0 & e^{-2k} \\ e^{-2K} & 0 & -2 & e^{-2K} \\ 0 & 1 & 1 & -2e^{-2K} \end{pmatrix}$$

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

A dinamikai mátrix diagonizálása – általános megoldás

$$\dot{\vec{P}}(t) = \boldsymbol{A}\,\vec{P}(t)$$

Az egyensúly stacionárius állapot kell legyen:

$$\boldsymbol{A}\,\vec{P}^{(e)} = 0$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -2e^{-2K} & 1 & 1 & 0 \\ e^{-2K} & -2 & 0 & e^{-2k} \\ e^{-2K} & 0 & -2 & e^{-2K} \\ 0 & 1 & 1 & -2e^{-2K} \end{pmatrix}$$

$$\vec{P}^{(e)} = \begin{pmatrix} P^{(e)}(\uparrow,\uparrow) \\ P^{(e)}(\downarrow,\uparrow) \\ P^{(e)}(\uparrow,\downarrow) \\ P^{(e)}(\downarrow,\downarrow) \end{pmatrix} = \underline{\frac{1}{Z}\begin{pmatrix} e^{K} \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^{K} \end{pmatrix}}$$

$$\underline{\lambda_1 = 0}$$

Tegyük fel, hogy a többi sajátvektort és sajátértéket is megtaláltuk:

$$\boldsymbol{A}\,\vec{P}^{(i)} = \lambda_i \vec{P}^{(i)}$$

A sajátvektorok időfüggését ismerjük, hiszen:

$$\dot{\vec{P}}^{(i)} = \boldsymbol{A}\vec{P}^{(i)} = \lambda_i \vec{P}^{(i)} \longrightarrow \vec{P}^{(i)}(t) = e^{\lambda_i t}\vec{P}^{(i)}$$

$\lambda_{i>1} < 0$ stabilitás

Tehát a master egyenlet általános megoldása:

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

Az a_i együtthatók a kezdeti feltételből következnek

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

A dinamikai mátrix sajátértékei és sajátvektorai

$$\dot{\vec{P}}(t) = \boldsymbol{A}\,\vec{P}(t) \qquad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -2e^{-2K} & 1 & 1 & 0 \\ e^{-2K} & -2 & 0 & e^{-2k} \\ e^{-2K} & 0 & -2 & e^{-2K} \\ 0 & 1 & 1 & -2e^{-2K} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\boldsymbol{A}\,\vec{P}^{(i)} = \lambda_i \vec{P}^{(i)}}$$

A rendszer fel-le szimmetriája: $E(-s_1, -s_2) = -Js_1 s_2 = E(s_1, s_2)$

A sajátvektorok vagy szimmetrikusak,
vagy antiszimmetrikusak tükrözésre:

$$\vec{P}^{(szim)} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ b \\ a \end{pmatrix} \qquad \vec{P}^{(aszim)} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ -b \\ -a \end{pmatrix}$$

Egyensúly szimmetrikus:

$$\vec{P}^{(e)} = \begin{pmatrix} P^{(e)}(\uparrow,\uparrow) \\ P^{(e)}(\downarrow,\uparrow) \\ P^{(e)}(\uparrow,\downarrow) \\ P^{(e)}(\downarrow,\downarrow) \end{pmatrix} = \frac{1}{Z}\begin{pmatrix} e^{K} \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^{K} \end{pmatrix} \qquad \underline{\lambda_1 = 0}$$

A másik szimmetrikus sajátvektor

$$\vec{P}^{(2)} = a\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \underline{\lambda_2 = -2(1 + e^{-2K})}$$

Antiszimmetrikus sajátvektorok:

$$\vec{P}^{(3)} = b\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \underline{\lambda_2 = -2e^{-2K}}$$

$$\vec{P}^{(4)} = c\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \underline{\lambda_4 = -2}$$

Relaxációs idő

A master egyenlet általános megoldása:

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

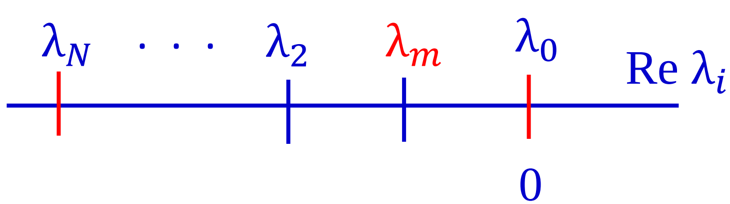
Stabilitásból következően $Re\lambda_i < 0$

Az i-edik módus relaxációs ideje:

$$\boxed{\vec{P}(t) = \vec{P}^{(e)} + a_i e^{\lambda_i t} \vec{P}^{(i)}} \longrightarrow \boxed{\tau_i = \frac{1}{Re\lambda_i}}$$

Hosszú idő után a legnagyobb τ_i marad:

$$\boxed{\vec{P}(t) \cong \vec{P}^{(e)} + a_m e^{\mathrm{Re}\lambda_m t + i\,\mathrm{Im}\lambda_m t} \vec{P}^{(m)}}$$



Rendszerint ez az, amit megfigyelünk relaxációs időként

$$\boxed{\tau_{rel} = \frac{1}{Re\lambda_m}}$$

Szimuláció

Határozzuk meg Monte Carlo szimulácó 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; $x = -\infty, ..., -a, 0, a, ..., na, ...\infty$) a következőképpen fejezhető ki

A diszkrét állapotok

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}k(an)^2\,, \tag{1}$$

ahol k a gumiszál rugóállandója.

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

Az átmeneti ráták

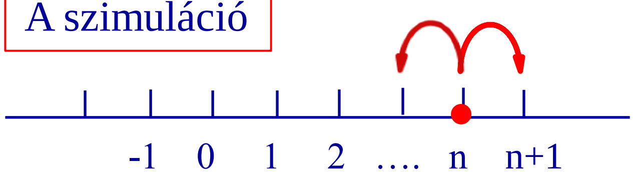
$$w(n \to n \pm 1) = \begin{cases} 1 & \text{if} \quad \Delta E < 0 \\ \exp(-\beta \Delta E) & \text{if} \quad \Delta E > 0 \end{cases} \tag{2}$$

ahol

$$\Delta E = \frac{1}{2}ka^2[(n \pm 1)^2 - n^2]\,. \tag{3}$$

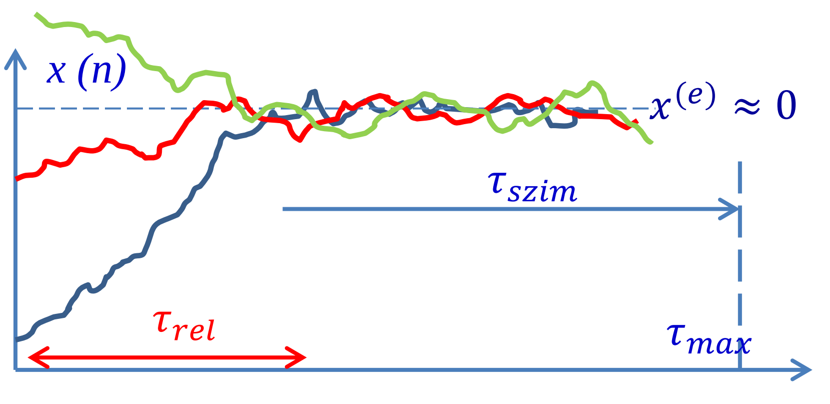
Indítsuk a részecskét az origóból (az egyensúlyi átlagok nem függhetnek a kezdeti feltételtől, tehát ellenőrizzük eredményeink helyességét azzal, hogy az origótól távolabb indítjuk a részecskét, s megnézzük ugyanazt kapjuk-e).

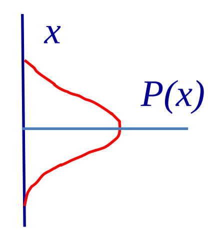
A szimuláció



A mérés (pl.)

$$<x^2> \approx \frac{1}{\tau_{max}} \int_{0?}^{\tau_{max}} x^2(t)\,dt$$





És a hiba-számítás!