Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 20.3.2019 *Metropolisov algoritmus, doplnky k termodynamike*

Akékoľvek otázky smelo smerujte na `juraj(a)tekel(b)gmail(c)com`

Metropolisov algortimus

Príklad 1 (Metropolisov algoritmus ako generátor náhodných čísel)**.** Majme náhodnú premennú x, ktorá je rozdelená podľa rozdelenia pravdepodobnosti $p(x)$. Zostrojme nasledujúcu postupnosť hodnôt náhodnej premennej $\{x_i\}, i = 1, \ldots, N$. Začnime s nejakou hodnotou x_0, na základe algoritmu ktorý bude špecifikovaný neskôr zvoľme testovaciu hodnotu x_t a urobme pomer

$$\alpha = \frac{p(x_t)}{p(x_0)} \ . \tag{1}$$

Potom vyberieme náhdoné číslo q z intervalu $(0, 1)$ a ak $\alpha \geq q$, za x_1 zvolíme x_t, ak $\alpha < q$ za x_1 zvolíme x_0. Rovnakú postup opakujeme postupne pre ďalšie x_i. Dá sa ukázať, že rozdelenie takomto súbore hodnôt $\{x_i\}$ konverguje k $p(x)$, t.j. že vybrať náhodne z tohto súboru je to isté ako vybrať náhodne zo všetkých možných x podľa rozdelenia pravdepodobnosti $p(x)$.

a. Rozmyslite si, že pre generovanie postupnosti nepotrebujeme poznať normalizáciu $p(x)$. Prečo je to dôležité?

b. Rozmyslite si, že pre x stav v kanonickom súbore a $p(x)$ príslušné rozdelenie pravdepodobnosti takto dostaneme algoritmus z prednášky.

c. Za náhodnú premennú zvoľme celé čísla $\mathbb{Z}$ a $x_0 = 0$. Za algoritmus generovania x_t zoberme náhodný krok veľkosti 1 vpravo alebo vľavo. Takýto algoritmus vygeneruje pre $p(x) = e^{-x^2/2}$ postupnosť celých čísel rozdelených podľa Gaussovho rozdelenia. Overte to počítačovým programom. Skúste, ako váš výsledok závisí od voľby N a ako to vyzerá, keď budete čísla x voliť na číselnej osi hustejšie.

d. Naprogramujte aj dvojrozmerný prípad, pre $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^2$. Algoritmus generovania testovacieho bodu skúste ako

- krok náhodným smerom veľkosti 1,
- krok veľkosti 1 náhodne doprava alebo doľava a potom krok veľkosti 1 náhodne hore alebo dole.

Porovnajte výsledky, fungujú oba spôsoby generovania rovnako dobre?

e. Vyskúšajte rôzne iné rozdelenia $p(x)$, napríklad aj také, kedy neviete nájsť generátor metódou inverzná k primitívnej. Kedy funguje Metropolis lepšie, ako táto metóda?

Treba upozorniť, že táto implementácia je trochu naivná a program môže mať niekoľko problémov, ktoré potom treba riešiť sofistikovanejším postupom.

Príklad 2 (Metropolisov algoritmus ako generátor náhodných čísel 2)**.** Druhý algoritmus z prednášky (a z nasledujúceho príkladu) je o čosi iný ako vyššie prezentovaný. Tam sa zoberie ako hodnota náhodnej premennej posledná vygenerovaná premenná x_N a ďalšia hodnota sa potom generuje novou postupnosťou. Zvoľte N_1, N_2 a upravte váš program tak, aby N_2-krát vygeneroval postupnosť N_1 náhodných čísel a za výsledný súbor zoberal iba posledné vygenerované premenné. Porovnajte z výsledkom z predchádzajúcej úlohy pre $N = N_2$.

Príklad 3 (Metropolis pre dvojhladinový systém). Majme dvojhladinový systém s energiami $E_1 < E_2$.

a. Rozmyslite si, že pri výbere testovacieho stavu nie je moc čo riešiť. Nájdite transfer maticu pre tento systém.

b. Nájdite jej vlastné čísla a vlastné vektory a nájdite rozklad všeobecného rozdelenia na dvoch stavoch do týchto vektorov.

c. Ako vyzerá rozdelenie pravdepodobnosti po n Metropolisovských krokoch a ako vyzerá v limite $n \to \infty$?

Príklad 4 (■ Metropolis pre trojhladinový systém). Majme trojhladinový systém s energiami $-E, 0, E$. Stavy budeme číslovať ich energiou.

a. Rozmyslite si, že pri výbere testovacieho stavu už je čo riešiť. Skúmajme dve možnosti.

   - Zo stavu 0 vieme prejsť do oboch stavov $\pm E$, zo stavu $\pm E$ vieme prejsť len do stavu 0.
   - Z každého stavu sa vieme dostať do každého iného.

   Nájdite transfer matice v oboch prípadoch.

b. Nájdite ich vlastné čísla a vlastné vektory a nájdite rozklad všeobecného rozdelenia na troch stavoch do týchto vektorov.

c. Ako vyzerá rozdelenie pravdepodobnosti po n Metropolisovských krokoch a ako vyzerá v limite $n \to \infty$? Ktorá z metód výberu testovacieho stavu vedie na správne rozdelenie? Prečo?

Návod. Skúste si napísať maticu výberu testovacieho stavu v oboch prípadoch a uvidieť v nich rozdiel. Ako vyzerá matica výberu testovacieho stavu v predchádzajúcej úlohe?

Vlastnosti termodynamických potenciálov

Príklad 5 (■ Maxwellove vzťahy (odvodzovátka 1)). Máme nasledujúe štyri termodynamické potenciály

- energia $E(S, V)$

$$dE = TdS - pdV \ , \tag{2}$$

- voľná energia $F(T, V)$

$$F = E - TS \ , \tag{3}$$
$$dF = - SdT - pdV \ , \tag{4}$$

- Gibbsova voľná energia $G(T, p)$

$$G = F + pV \ , \tag{5}$$
$$dG = - SdT + Vdp \ , \tag{6}$$

- entalpia $H(S, p)$

$$H = E + pV \ , \tag{7}$$
$$dH = TdS + Vdp \ . \tag{8}$$

a. Ujasnite si, ako vznikajú vzťahy pre zmenu každého potenciálu a za akých podmienok je každý z potenciálov zaujímavý.

b. Ujasnite si, s akými deriváciami akých potenciálov súvisia fyzikálne veličiny.

c. Z komutovania druhých parciálnych derivácií odvoďte štyri Maxwellove vzťahy.

Príklad 6 (Identity pre derivácie (odvodzovátka 2)). Majme tri premenné x, y, z, ktoré závisa $x(y, z), y(x, z), z(x, y)$. Ukážte, že pre parciálne derivácie platí

$$\left.\frac{\partial x}{\partial y}\right|_z \left.\frac{\partial y}{\partial x}\right|_z = 1 \ , \tag{9}$$
$$\left.\frac{\partial x}{\partial y}\right|_z \left.\frac{\partial y}{\partial z}\right|_x \left.\frac{\partial z}{\partial x}\right|_y = - 1 \ . \tag{10}$$

Rozmyslite si, že prvý vzťah je dôsledkom vety o derivovaní inverznej funkcie a druhý vety o derivovaní implicitne zadanej funkcie. Prečo sa v prvom vzťahu d-čka krátia, ale v druhom nie?

Aplikácie termodynamických vzťahov

Príklad 7 (■ Ukážte, že)**.**

$$\left.\frac{\partial E}{\partial V}\right|_T = T\left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_V - p \ , \tag{11}$$

$$\left.\frac{\partial E}{\partial p}\right|_T = -T\left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p - p\left.\frac{\partial V}{\partial p}\right|_T \ , \tag{12}$$

$$\left.\frac{\partial C_V}{\partial V}\right|_T = T\left.\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right|_V \ , \tag{13}$$

$$\left.\frac{\partial C_p}{\partial p}\right|_T = -T\left.\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right|_p \ . \tag{14}$$

Príklad 8 (Zovšeobecnený Mayerov vzťah)**.** .

a. Rozmyslite si, že nasledujúce dve definície sú rozumné

$$C_V = T\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_V \ , \ C_p = T\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_p \ . \tag{15}$$

b. Nájdite rozdiel $C_p - C_V$ vyjadrený cez derivácie stavových veličín, ktoré sa dajú získať zo stavovej rovnice $p = f(V, T)$.

c. Ukážte, že pre stavovú rovnicu ideálneho plynu dostaneme dobre známy výsledok.

Príklad 9 (Adiabatický dej top-to-bottom)**.** Majme ideálny plyn so známou stavovou rovnicou a vťahom pre C_V

$$C_V = \alpha N k \ . \tag{16}$$

a. Čomu sa rovná C_p a entropia?

b. Ukážte, že pre adiabatický dej platí VT^α a pV^γ sú (rôzne) konštanty.

Príklad 10 (■ Neideálny plyn)**.** Ukáže, že ak má plyn konštantné tepelné kapacity C_V, C_p, potom je jeho stavová rovnica

$$(C_p - C_V)\,T = (p + a)\,(V + b) \ , \ a, b = \text{const} \ . \tag{17}$$

Čomu sa rovná energia a entropia ako funkcia V a T.

Návod. Rovnice (13,14).

Príklad 11 (Van der Wallsov plyn)**.** Ako vyzerajú tepelné kapacity a Mayerov vzťah pre plyn, ktorého stavová rovnica je

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \ . \tag{18}$$

Pomôže zistiť, že energia plynu sa dá zapísať v tvare

$$E = cT - \frac{a}{V} \ , \tag{19}$$

kde c je konštanta. Čomu sa rovná entropia ako funkcia V a T.

Príklad 12 (Dietericiho plyn)**.** Ako vyzerajú tepelné kapacity a Mayerov vzťah pre plyn, ktorého stavová rovnica je

$$p = \left(\frac{kT}{V/N - b}\right) e^{-\frac{aN}{VkT}} \ . \tag{20}$$

Čomu sa rovná energia a entropia ako funkcia V a T.

Príklad 13 (Neznáma hmota)**.** Stavová rovnica neznámej hmoty je daná vzťahom

$$p = A\frac{T^3}{V} \ , \ A = \text{const} \ . \tag{21}$$

Aká je jej energia?

Príklad 14 (Neznámy systém)**.** Gibbsova voľná energia pre neznámy systém je daná vzťahom

$$G = RT\log\left(\frac{ap}{(RT)^{5/2}}\right) \ . \tag{22}$$

Vypočítajte jeho tepelné kapacity a zistite, o aký systém ide.

Príklad 15 (■ Termodynamika spinovej retiazky)**.** Majme retiazku N spinov, ktoré sa nachádzajú v magnetickom poli B a navzájom neinteragujú. Energia každého spinu je

$$E = \pm\mu B \tag{23}$$

pre spin orientovaný proti smeru resp v smere magnetického poľa. Retiazka je v rovnováhe s rezervoárom s teplotou T. Magneticáziou M nazveme rozdiel medzi počtom paralelných a anti-paralelných spinov vynásobený magnetickým momentom μ.

a. Ukážte, že štatistická suma retiazky je daná vzťahom

$$Z = 2^N \left(\cosh(\beta\mu B)\right)^N \ . \tag{24}$$

Aká je stredná energia, entropia a magnetizácia retiazky?

b. Overte, že magnetizácia je konjugovanou silou k magnetickému poľu. Nájdite stavovú rovnicu pre retiazku, t.j. vzťah

$$M = f(B, T, N) \ . \tag{25}$$

c. Ako pre retiazku vyzerá Mayerov vzťah?

Príklad 16 (Termodynamike harmonického oscilátora)**.** Ako vyzerá termodynamika harmonického oscilátora s energetickými hladinami

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \ , \ n = 0, 1, \dots \ ? \tag{26}$$

Ako vyzerá jeho správanie v limitách malých a veľkých teplôt?