Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 30.3.2021 *numerické metódy, grandkanonické rozdelenie*

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)**.** Iný postup, spomínaný v nasledujúcom príklade, 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?

Grandkanonické rozdelenie

Príklad 5 (Chemický potenciál ideélneho plynu). Na prednáške sa objavil vzorec pre chemický potenciál ideálne plynu. Rozmyslite si, že je záporný. Ako táto vec korešponduje sa tvrdením, že chemický potenciál je energia potrebná na pridanie jednej častice do systému?

Príklad 6 (Príklad z prednášky). Zopakujte odvodenie Langmuirovej adsorbčnej rovnice pre proteíny, na ktoré sa vedia zachytiť dve molekuly kyslíka. Koľko molekúl kyslíka na daný počet molekúl proteínu, bude vedieť takáto látka preniesť pri rovnakých podmienkach?

Ako by to vyzeralo pre proteín, na ktorý sa vie naviazať n kyslíkov?

Príklad 7 (Môj obľúbený príklad o grandkanonikcých súboroch). Majme ideálny plyn N častíc v kockatej škatuli s hranou a. Častice sa však môžu za cenu energie ε nalepiť na jednu zo stien nádoby a tam si žiť ako plyn v dvoch rozmeroch. Koľko častíc je nalepených na stenu, ak je škatula pri teplote T?

Návod. Popisujte systém grandkanonickým súborom, ale dobre si rozmyslite, za akých okolností je tento prístup rozumný.

Príklad 8 (Začiatok viriálového rozvoja). Ak si spomínate na príklad o Viriálovom rozvoji, jeho riešenie začínalo slovami "z grandkanonického súboru vypočítame $p/kT = \dots$ a $N/V = \dots$, kde pravé strany závisa od chemického potenciálu μ". Tento príklad od vás chce, aby ste to ozaj spravili.