MIT Açık Ders Malzemeleri

http://ocw.mit.edu

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

8.333: İstatistiksel Mekanik I **Problem Seti #2** Son Tarih: 10/10/07

Olasılık

1. *Rekorlar kitabı*: Bir rassal sayılar dizisi $\{x_1, x_2, \cdots, x_n, \cdots\}$'i ele alalım; x_n girdisi, eğer kendinden önce gelen tüm sayılardan daha büyükse, yani $x_n > \{x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}\}$ ise, bir *rekor*dur. O zaman, bununla bağlantılı bir göstergeler dizisi $\{R_1, R_2, \cdots, R_n, \cdots\}$'i tanımlayabiliriz, öyle ki eğer x_n bir rekorsa $R_n = 1$, değilse $R_n = 0$'dır (şüphesiz $R_1 = 1$).

(a) Varsayalım ki, her bir x_n girdisi aynı olasılık dağılımı $p(x)$'den alınsın. [Bir başka deyişle, $\{x_n\}$'ler BADdir (bağımsız aynen dağılmış).] $p(x)$'in biçiminden bağımsız olarak, x_n girdisinin bir rekor olma olasılığı P_n için çok basit bir ifadenin olduğunu gösteriniz.

(b) Rekorlar *Guinness Rekorlar Kitabı'*na girilmektedir. Rekorların ortalama sayısı $\langle S_N \rangle$, N denemeden sonra nedir, ve $N \gg 1$ için nasıl büyür? Eğer denemelerin sayısı, örneğin bir spor dalındaki katılımcıların sayısı, her yıl iki katına çıkarsa, rekor kitabındaki girdilerin sayısı zaman içinde asimptotik olarak nasıl büyür?

(c) Rekor göstergeleri $\{R_n\}$'nin (özdeş olmasa da) bağımsız rassal değişkenler olduğunu ispatlayınız, böylece $m \neq n$ için $\langle R_n R_m \rangle_c = 0$ olacaktır.

(d) N girdiden sonra rekorların toplam sayısı S_N'nin tüm momentleri ve ilk üç kümülantını hesaplayınız. Merkezi limit teoremi S_N için geçerli midir?

(e) İlk rekor elbette $n_1 = 1$ için gerçekleşir. Eğer üçüncü rekor, deneme sayısı $n_3 = 9$'da ortaya çıkarsa, ikinci rekorun konumu için ortalama değer $\langle n_2 \rangle$ nedir? Dördüncü rekorun konumu için ortalama değer $\langle n_4 \rangle$ nedir?

****

2. *Zar*: Hileli bir zarda 6, 1'e göre iki kat daha sık gelmektedir.

(a) Zarın 6 yüzü için nesnel olasılıkları hesaplayınız.

(b) Zar hakkındaki yukarıdaki ifadenin bilgi içeriği (bit biriminde) nedir?

****

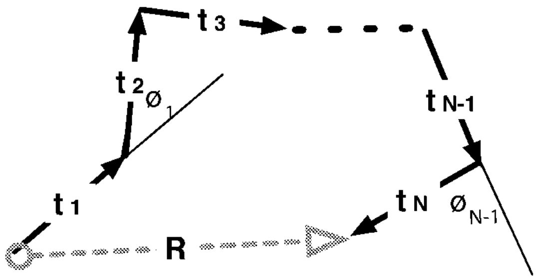
3. *Rassal kaplama*: Bir ayna, vakumda, bir altın elektrodun elektrik akımı geçirilerek buharlaştırılmasıyla kaplanmaktadır. Altın atomları tüm yönlerde uçuşur ve bir kısmı cama (ya da cam plakaya önceden gelen diğer altın atomlarına) yapışır. Kaplanan atomların her bir sırasının komşu sıralardan bağımsız olduğunu ve ortalama kaplama hızının saniyede d tabaka olduğunu varsayalım.

(a) Bir t süre sonra, bir noktada m tane atom kaplanma olasılığı nedir? Camın ne kadarlık kısmı hiç altın atomuyla kaplanmamıştır?

(b) Kalınlıktaki varyans nedir?

****

4. *İki boyutta yarı-esnek polimer:* Bir model polimerin konfigürasyonları, ya iki boyutta a uzunlukta vektörlerin bir kümesi $\{\mathbf{t}_i\}$ ile $(i = 1, \cdots, N)$, veya onun yerine aşağıdaki şekilde gösterildiği gibi, ardışık vektörler arası açılar kümesi $\{\phi_i\}$ ile tanımlanabilir.



Polimer bir T sıcaklığına, ve şöyle bir enerjiye sahiptir

$$\mathcal{H} = -\kappa \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_{i+1} = -\kappa a^2 \sum_{i=1}^{N-1} \cos\phi_i \quad ,$$

burada κ bükme sertliğiyle ilişkilidir. Herhangi bir konfigürasyonun olasılığı $\exp(-\mathcal{H}/k_B T)$ ile orantılıdır.

(a) $\langle \mathbf{t}_m \cdot \mathbf{t}_n \rangle \propto \exp(-|n-m|/\xi)$ olduğunu gösteriniz ve *devamlılık uzunluğu* $\ell_p = a\xi$ için bir ifade elde ediniz. (Yanıtı, basit integrallerin oranı olarak bırakabilisiniz)

(b) Şekilde çizildiği gibi uçtan uca mesafe $\mathbf{R}$'ye bakalım. $N \gg 1$ limitinde $\{R^2\}$ için bir ifade bulunuz.

(c) $N \gg 1$ limitinde $p(\mathbf{R})$ olasılığını bulunuz.

(d) Eğer polimerin uçları bir $\mathbf{F}$ kuvvetiyle çekilip açılırsa, polimer konfigürasyonlarının olasılıkları $\exp\left(\frac{\mathbf{F}\cdot\mathbf{R}}{k_B T}\right)$ Boltzmann ağırlığıyla değişir. Bu ağırlığın açılımını yaparak veya başka şekilde şunu gösteriniz

$$\langle \mathbf{R} \rangle = K^{-1}\mathbf{F} + \mathcal{O}(F^3) \ ,$$

ve Hook sabiti K için önceden hesaplanmış nicelikler cinsinden bir ifade yazınız.

****

5. *Jarzynski eşitliği*: Bir T sıcaklığında dengede olan, makroskopik bir sistemin, bir μ mikro durumunda olma olasılığı şöyledir, $p(\mu) = \exp[-\beta\mathcal{H}(\mu)]/Z$, burada $\mathcal{H}(\mu)$ mikrodurumun enerjisi, $\beta = 1/(k_B T)$'dir, ve normalleştirme çarpanı serbest enerjiyle şöyle ilişkilidir, $-\beta F = \ln Z$. Dış iş W'yu yaparak sistemin makroskopik durumunu, yeni durumda da T sıcaklığında dengede olacak şekilde, değiştiriyoruz. Örneğin, bir gazın hacminin, bir pistonu $L(t) = L_1 + (L_2 - L_1)t/\tau$ şeklinde hareket ettirerek değiştirildiğini düşünün. Protokole (yani $u = (L_2 - L_1)/\tau$ hızı) bağlı olarak, süreç tersinir olmaya yakın veya uzak olabilir. Yine de Jarzynski eşitliği, W işi için olasılık dağılımını serbest enerjinin *dengede* değişimi ile ilişkilendirir.

(a) İşin yapılma sürecinin tamamen deterministik olduğunu varsayalım, öyle ki verili bir protokolde, başlangıçtaki herhangi bir μ mikrodurumu, belli bir μ' nihai mikrodurumuna evrilecektir. Yapılan iş miktarı $W(\mu)$ başlangıç mikrodurumuna göre değişir ve dolayısıyla, dengedeki $p(\mu)$ ile ilişkilendirilebilen bir olasılık dağılımı $p_f(W)$ olur. Ancak, nihai mikrodurumun enerjisi tam olarak $\mathcal{H}'(\mu') = \mathcal{H}(\mu) + W(\mu)$'dır. Zamanda tersinme simetrisi gereği, eğer tüm momentumları aniden tersine çevirip, protokolü tersine işleterek, zamanı tersine çevrilmiş mikrodurum $\overline{\mu'}$ deterministik olarak μ mikrodurumuna geri evrilir, ve $-W(\mu)$ işi geri kazanılır. Ancak, böyle yapmak yerine, protokolü tersine çevirip işi geri kazanmadan önce, sistemin T sıcaklığında yeni makrodurumunda dengeye gelmesine izin veririz. Geri kazanılan iş $-W$, seçilen mikrodurumun bir fonksiyonu olacaktır, ve $p'(\mu') = \exp[-\beta\mathcal{H}'(\mu')]/Z'$ ile ilişkili farklı bir olasılık $p_b(-W)$'ye göre dağılacaktır. Genel olarak $p_f(W)$ veya $p_b(-W)$'yi bulmak mümkün değildir. Ancak, zamanda tersinmiş bir mikrodurum çiftinin olasılıklarının tamamen eşit olduğunu gözeterek, oranlarının şöyle olduğunu gösteriniz:

$$\frac{p_f(W)}{p_b(-W)} = \exp\left[\beta(W + F - F')\right].$$

Yukarıdaki sonucu ispat etmek için bazı varsayımlarla yönlendirildiyseniz de, bu sonuç aslında daha genel olarak geçerlidir ve *iş-dalgalanma teoremi* olarak bilinir.

(b) *Jarzynski eşitliğini* ispatlayınız

$$\Delta F \equiv F' - F = -k_B T \ln\left\langle e^{-\beta W}\right\rangle \equiv -k_B T \ln\left[\int dW p_f(W) e^{-\beta W}\right].$$

Bu sonuç ilkesel olarak, dengedeki serbest enerji farklarını, denge dışı iş ölçümleri topluluğundan hesaplamakta kullanılabilir. Örneğin, *Liphardt*, *et*. *al*., *Science* **296**, *1832* (*2002*) makalesinde tek bir RNA molekülünü germek için gereken iş hesaplanmış, ve serbest enerjideki değişimle ilişkilendirilmiştir. Ancak, deneme sayısı, ortalaması alınan, nadir olayların baskın olduğu üstel fonksiyonun doğru bir şekilde elde edilmesini sağlamaya yetecek kadar büyük olmalıdır.

(c) Aşağıdaki bilindik termodinamik eşitsizliği ispatlamak için Jarzynski eşitliğini kullanınız.

$$\langle W \rangle \geq \Delta F$$

(d) İlk aşamada bir $W - \omega$ işinin yapıldığı ve tersinmiş süreçte $-W$ işinin geri kazanıldığı bir çevrim düşünelim. Termodinamiğin ikinci yasasına göre, net kazanç ω pozitif olmalıdır. Ancak, istatistiksel fizikte bu koşulun ihlal edilmesi her zaman mümkündür. İkinci yasayı ihlal etme olasılığının aşağıdaki şekilde ihlalin derecesiyle azaldığı çıkarımına varmak için, yukarıdaki sonuçları kullanınız.

$$P_{\text{ikinci yasayı ihlal etme}}(\omega) \leq e^{-\beta\omega}$$

****

Jarzynski bağıntısı üzerine yakın tarihli bir makale olarak, bkz. *Crooks and Jarzynski*, *Phys*. *Rev*. *E* **75**, *021116* (*2007*). Rekorlarla ilgili yakın tarihli bir yayın şurada bulunabilir: *J*. *Krug*, *J. Stat*. *Mech*. (*2007*) *P07001*.