Ehrenfestův model

Jaroslava Schovancová

1 Formulace úlohy, strategie řešení

Psal se rok 1906, když navrhli Paul Ehrenfest a jeho žena Taťána velmi jednoduchý pravděpodobnostní model časového vývoje systému mnoha částic. Jejich konstrukce pomohla ve vyjasnění záhadné nesmiřitelnosti nevratnosti relaxačních dějů a vratného charakteru Newtonových rovnic. Ehrenfestův model tak sehrál významnou roli v průběhu dalšího vývoje nerovnovážné statistické fyziky.

K následujícímu myšlenkovému experimentu si připravíme tyto rekvizity: osudí (klobouk), $2R$ očíslovaných papírových lístků s čísly $1, 2, \ldots, 2R$, dvě urny (nádoby) a $2R$ očíslovaných koulí (například kulečníkové koule, na kterých jsou nalepena čísla $1, 2, \ldots, 2R$). Na počátku vložíme všechny papírové lístky do osudí a všechny koule do jedné urny, např. do urny $\mathcal{A}$. Urna $\mathcal{B}$ je prázdná.

Tímto jsme vše připravili a časová evoluce systému může začít. V pravidelných časových intervalech budeme provádět posloupnost identických **kroků**. Každý krok je tvořen následujícími dvěma operacemi.

1. Pečlivě promícháme lístky v osudí. Jeden z nich vyjmeme a přečteme číslo na něm uvedené. Toto číslo si zapamatujeme a lístek vrátíme do osudí. Například: v osudí je celkem 100 lístků, vytažen byl lístek s číslem 53.

2. Nalezneme kouli s vylosovaným číslem (v uvedeném příkladě kouli s číslem 53). Vyjmeme ji z urny ve které se právě nachází a přemístíme ji do druhé urny. Například, koule číslo 53 se nacházela v urně $\mathcal{A}$, přemístíme ji tedy do urny $\mathcal{B}$.

Počet provedených kroků k vlastně měří diskrétně se měnící čas. Termíny „čas" a „počet kroků" budeme používat jako synonyma. **Stavem** systému v daném čase k budeme označovat číslo $s(k)$, které udává rozdíl počtu koulí v urně $\mathcal{A}$ po provedení k-tého kroku a čísla R. To je totéž jako polovina rozdílu počtu koulí v urně $\mathcal{A}$ a počtu koulí v urně $\mathcal{B}$. Při obecném rozmístění koulí může tedy stav nabývat jedné z $2R + 1$ hodnot $-R, -R + 1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, R - 1, R$. Na počátku (v čase $k = 0$) je tedy systém ve stavu $s(0) = R$. Po provedení prvního kroku (v čase $k = 1$) bude systém s jistotou ve stavu $s(1) = R - 1$. Skutečně, ať už při prvním kroku vylosujeme jakékoliv číslo, příslušná koule se s jistotou nachází v urně $\mathcal{A}$ (jsou v ní totiž všechny koule). Po jejím přemístění do urny $\mathcal{B}$ bude v urně $\mathcal{A}$ již jen $2R-1$ koulí. Avšak již v druhém kroku se začíná uplatňovat pravděpodobnostní charakter evoluce. Může se stát, že při druhém tahu bude z osudí vylosováno stejné číslo jako při tahu prvním. Díky důkladnému promíchání lístků v osudí je pravděpodobnost tohoto jevu rovna $1/(2R)$. S touto pravděpodobností tedy bude stav systému v čase $k = 2$ opět $s(2) = R$. S doplňkovou pravděpodobností $[1-1/(2R)]$ bude ovšem po druhém kroku $s(2) = 2R - 2$.

Jak se vlastně vyvíjí stav systému, jestliže mnohokrát opakujeme popsaný krok? Intuice nám napovídá: počet koulí v urně $\mathcal{A}$ se bude v jistém pravděpodobnostním smyslu zmenšovat a stav systému se bude přibližovat k hodnotě 0, kdy je v obou urnách stejný počet koulí. Je-li totiž absolutní hodnota rozdílu počtu koulí v obou urnách velká, je pravděpodobnost jejího snížení v dalším kroku větší, než pravděpodobnost jejího dalšího zvýšení. Tento „relaxační trend" je tím silnější, čím je stav systému vzdálenější od stavu 0. A co se stane po dosažení stavu „naivní rovnováhy", tj. po vyrovnání počtu koulí v obou urnách? Již v dalším kroku jej systém musí nutně opustit! Dále bude jeho stav **fluktuovat** kolem hodnoty 0. Ale jak dlouho? Budeme-li systém sledovat po velmi dlouhou dobu, pak není vyloučena ani taková posloupnost tahů, která jej přivede zpět do výchozího stavu (všechny koule v urně $\mathcal{A}$). Při velkém počtu koulí $2R$ však dojde k takové **rekurenci** až za historicky velmi významnou dobu.

2 Analytické řešení

Stav systému v čase k je nutno popsat nikoliv číslem $s(k)$, ale náhodnou proměnnou $\mathbf{S}(k)$. Znalost stavu systému v čase k pak vlastně znamená znalost pravděpodobností jednotlivých možných hodnot náhodné proměnné $\mathbf{S}(k)$. Zapsáno symboly, stav systému v čase k je určen pravděpodob-nostním rozdělením

$$p_j(k) \stackrel{\text{def}}{=} \text{Prob}\,\{\,\mathbf{S}(k) = j\}\ \ ,\ j = -R, -R+1, \dots, R-1, R\ . \tag{1}$$

Když provádíme posloupnost výše popsaných kroků, mění se určitým způsobem uvedené rozdělení. Naším cílem bude nyní sestavení **pohybové rovnice**, která by určovala závislost rozdělení (1) na časové proměnné k.

Uvažme souvislost stavů v čase $k-1$ a v čase k. Jev $\{\,\mathbf{S}(k) = j\}$, tj. jev „v čase k je v urně $\mathcal{A}$ $R+j$ koulí", mohl vzniknout právě dvěma vzájemně se vylučujícími způsoby:

1. V předchozím čase $k-1$ bylo v urně $\mathcal{A}$ $(R+j-1)$ koulí (s pravděpodobností $p_{j-1}(k-1)$) a současně byla při k-tém kroku vylosována koule z urny $\mathcal{B}$. V čase $k-1$ se ovšem v urně $\mathcal{B}$ nacházelo $R-j+1$ koulí a pravděpodobnost toho, že z osudí bylo taženo číslo některé z nich je tedy $\pi_{j-1\to j} = (R-j+1)/(2R)$.

2. V předchozím čase $k-1$ bylo v urně $\mathcal{A}$ $(R+j+1)$ koulí (tak tomu bylo s pravděpodobností $p_{j+1}(k-1)$) a současně byla při k-tém kroku vyjmuta koule z urny $\mathcal{A}$. K tomu došlo s pravděpodobností $\pi_{j+1\to j} = (R+j+1)/(2R)$.

Pravděpodobnosti vylučujících se jevů se sčítají. Má-li nastat jeden z uvedených dvou jevů, musí se současně uskutečnit dvě nezávislé události; jejich pravděpodobnosti se násobí. Celkově tak již dostáváme hledanou pohybovou rovnici pro $j = -R+1, \dots, R-1$

$$p_j(k) = \frac{R-j+1}{2R} p_{j-1}(k-1) + \frac{R+j+1}{2R} p_{j+1}(k-1)\ . \tag{2}$$

Musíme ji však ještě doplnit o počáteční podmínku(pravděpodobnostní rozdělení v čase $k=0$). Na počátku byly všechny koule umístěny v urně $\mathcal{A}$. To znamená: $p_j(0) = \delta_{jR}$ pro všechna $j = -R, \dots, R-1$.

Zamysleme se, jak se mění **střední hodnota** náhodné proměnné $\mathbf{S}(k)$. Střední hodnota náhodné proměnné je určena jako obvykle: sečteme součiny (hodnota náhodné proměnné)$\times$(pravděpodobnost této hodnoty) přes všechny možné hodnoty:

$$\sigma(k) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, \mathbf{S}(k)\, \rangle = \sum_{j=-R}^{R} j\, p_j(k)\ . \tag{3}$$

Odvození vztahu pro střední hodnotu je poměrně jednoduché. Vynásobíme celou pohybovou rovnici (2) číslem j. Měníme-li j, dostaneme tak vlastně $2R+1$ rovnic. Nakonec všechny tyto rovnice sečteme. Na levé straně se již objeví hledaná střední hodnota. Úpravou pravé strany dostaneme $\sigma(k-1)(1-1/R)$. Jinak řečeno, posloupnost $\sigma(k)$, $k = 0, 1, \ldots$ je geometrickou posloupností s parametrem $(1-1/R) < 1$. Vzhledem k uvažované počáteční podmínce je nultý člen této posloupnosti $\sigma(0) = R$. Celkem tak dostáváme závěrečný výsledek:

$$\sigma(k) = R\left(1 - \frac{1}{R}\right)^{k}\ ,\ k = 0, 1, 2, \ldots . \tag{4}$$

S rostoucím časem se tedy přibližuje střední hodnota náhodné proměnné $\mathbf{S}(k)$ k nule, tj. střední hodnota počtu koulí v obou urnách se vyrovnává. **V tomto smyslu** tedy systém relaxuje k rovnováze.

3 Počítačová simulace

Nejprve si ukážeme, jak lze na počítači generovat jednu konkrétní **realizaci** konečné posloupnosti $\{s(k)\}_{k=0}^{k_{max}}$. Předpokládejme, že po provedení k-tého kroku se v urně $\mathcal{A}$ nachází o $s(k)$ koulí více, než je hodnota R. Jak již víme, tento počet se v dalším kroku může změnit pouze o jedničku. Přesněji řečeno, s pravděpodobností $\pi_{s(k)\to s(k)-1} = [R+s(k)]/(2R)$ se počet koulí v urně $\mathcal{A}$ **zmenší** o jedničku (bude totiž vylosována jedna z $R+s(k)$ koulí v urně $\mathcal{A}$). S pravděpodobností $\pi_{s(k)\to s(k)+1}(k) = [R-s(k)]/(2R)$ se naopak stav o jedničku **zvětší** (bude vylosována jedna z $R-s(k)$ koulí v urně $\mathcal{B}$). Všimněte si, že tyto pravděpodobnosti *závisí* na aktuální hodnotě $s(k)$. Na druhé straně pravděpodobnost přechodu k jistému počtu koulí v čase $k+1$ *nezávisí* na tom, jakým způsobem probíhal vývoj počtu koulí v od počátku do času $k-1$ včetně. Známe-li přítomnost (aktuální situaci v čase k), je budoucí vývoj nezávislý na minulosti (na vývoji systému před časem k). Právě tato důležitá vlastnost našeho modelu je vymezujícím kritériem pro širší třídu pravděpodobnostních modelů, pro tzv. Markovovské řetězce [1].

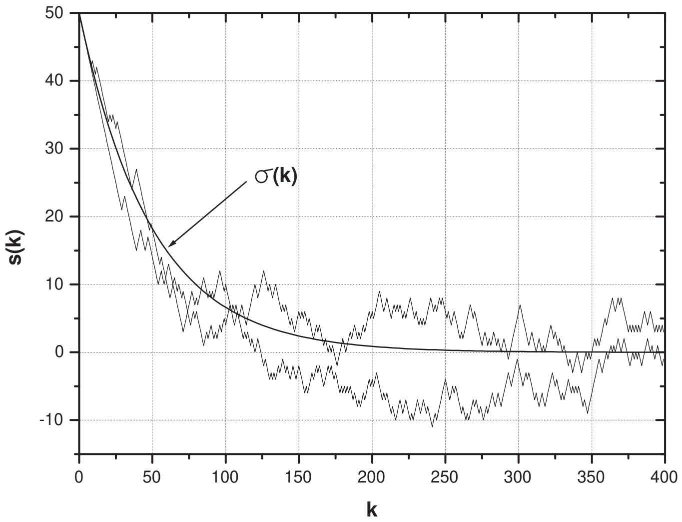
Nyní již zasedneme k počítači. Budeme potřebovat generátor náhodných čísel. Jak víte, po každém jeho vyvolání získáme jednu realizaci r spojité náhodné veličiny s *rovnoměrným rozdělením* na intervalu $(0, 1)$. Jinými slovy, je-li $a \in (0, 1)$ jisté pevně dané číslo, máme již zaručeno, že získané číslo r leží s pravděpodobností a v intervalu $(0, a)$. Algoritmus řešení našeho úkolu lze shrnout do tří bodů.

1. Podle našeho předpokladu, na počátku je $s(0) = R$. Položme $k = 0$.

2. Vyvoláme generátor náhodných čísel a získáme číslo r. Platí-li $r < [R+s(k)]/(2R)$, položíme $s(k+1) = s(k) - 1$. V opačném případě, tj. pro $r \geq [R + s(k)]/(2R)$, položíme naopak $s(k+1) = s(k)+1$. Získanou hodnotu $s(k+1)$ uložíme do paměti.

3. Jestliže $k + 1 < k_{max}$, zvětšíme k o jedničku (posuneme hodiny) a opakujeme předchozí krok. Jestliže je již $k + 1 = k_{max}$, ukončíme program.

Na Obrázku 1 jsou znázorněny dva možné výsledky práce tohoto algoritmu.

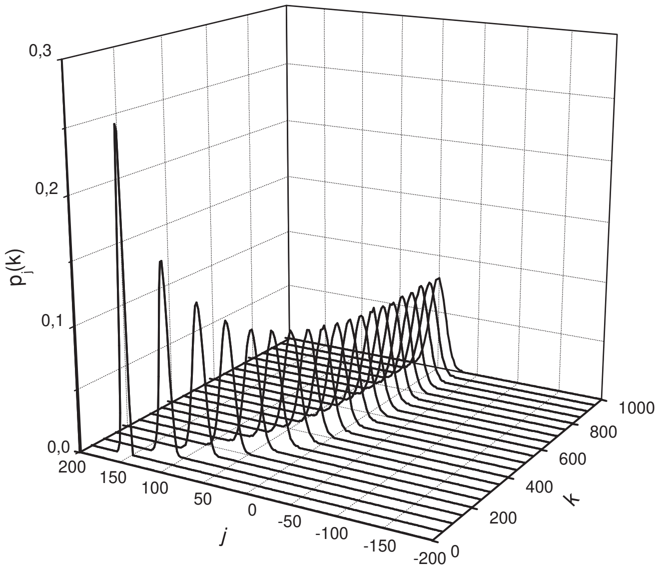


Obrázek 1: Simulace časového vývoje počtu koulí v urně $\mathcal{A}$. Celkový počet koulí byl $2R = 100$. Dvě po částech lineární křivky představují dvě realizace posloupnosti $\{s(k)\}_{k=0}^{k_{max}}$, pro $k_{max} = 400$. Sousední body $[k, s(k)]$ jsou pro názornost spojeny úsečkami. Hladká křivka představuje časový vývoj střední hodnoty $\sigma(k)$ podle rovnice (4).

Představme si nyní, že vytvoříme ne dvě, ale velký počet (řekněme $M = 10^5$) popsaných realizací. V libovolném, ale pevném čase k se ocitne každá z těchto realizací na jedné z $2R + 1$ celočíselných souřadnic $j = -R, \ldots, R$. Označme tedy symbolem $M_j(k)$ počet realizací, které v čase k „zapadnou do přihrádky" j. Zřejmě platí $\sum_{j=-R}^{R} M_j(k) = M$, tj. součet obsazovacích čísel jednotlivých přihrádek musí dát celkový počet realizací. A nyní se již dostáváme k samé podstatě dynamické Monte Carlo metody: pro dostatečně velká M budou zlomky $M_j(k)/M$ simulovat přesné hodnoty pravděpodobností $p_j(k)$, definovaných v rovnici (1). Tak vlastně pomocí počítače získáme řešení rovnice (2). Obrázek 2 ukazuje výsledek. Pozorujeme, jak s rostoucím časem přechází systém k jistému rovnovážnému stavu. A můžeme simulovaným výsledkům vůbec věřit? Naštěstí máme možnost porovnat výsledky simulací s přesným výpočtem: stačí dosadit simulované hodnoty pravděpodobností do rovnice (3) a provést požadovaný součet.

4 Srovnání obou přístupů

Označme $\sigma^{(sim)}(k) = \sum_{j=-R}^{R} j \frac{M_j(k)}{M}$. Na základě simulace časového vývoje počtu koulí v urně $\mathcal{A}$ mohu říci, že simulovaná střední hodnota počtu koulí v urně $\mathcal{A}$, tj. $\sigma^{(sim)}(k)$, velmi dobře aproximuje analyticky vypočtenou střední hodnotu $\sigma(k)$, viz Obrázek 1.



Obrázek 2: Simulace časového vývoje pravděpodobnostního rozdělení $p_j(k)$. Celkový počet koulí byl $2R = 400$, celkový počet generovaných realizací $M = 10^5$. Zobrazená rozdělení odpovídají situaci po každých padesáti krocích.

Podíváme-li se na Obrázek 2, zjistíme, že při sledování vývoje pravděpodobnostního rozdělení $p_j^{(sim)}(k)$ v průběhu prvních 1000 kroků se maximum zmenšuje a posouvá se k hodnotě $j = 0$. To je v souladu s očekávanou hodnotou pravděpodobnostního rozdělení $p_j(k)$ dle vztahu pohybové rovnice (2) s danými počátečními podmínkami. Tedy

$$\sigma^{(sim)}(k) \approx \sigma(k), \qquad\qquad p_j^{(sim)}(k) \approx p_j(k)$$

5 Závěr

Fyzikální nevratnost tedy spočívá ve skutečnosti, že systém má vždy mnohem více možností směřovat k rovnováze, něž se od rovnováhy vzdalovat. Přesvědčila jsem se, že simulovaná střední hodnota $\sigma^{(sim)}(k)$ počtu koulí v urně $\mathcal{A}$ velmi dobře aproximuje analyticky vypočtenou hodnotu $\sigma(k)$. Dále jsem se přesvědčila, že simulace časového vývoje pravděpodobnostního rozdělení $p_j^{(sim)}(k)$ aproximuje hodnotu $p_j(k)$ analyticky vypočtenou.

Reference

[1] FELLER, W., *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Vol. 1., Třetí vydání, Wiley, New York, 1968.

[2] GRINSTEAD, CH. M., SNELL L. J., *Introduction to Probability*, `http://www.dartmouth.edu/~chance/teaching_aids/books_articles/probability_book/pdf.html`