統計力学1 期末試験問題

念の為の救済措置として大問7を設定している。ヤマが外れて大問が丸ごとわからない場合は、一旦大問7を解くのも良いかもしれない。60点以上で単位を出す予定である。

大問１：(15点の予定)

1. 1 ～ 6の目が等確率で出るサイコロを振る。1回降った時の出る目の期待値と分散を求めよ。また、2回降った時の平均の目の期待値と分散を求めよ。
2. 確率変数Xに対して、期待値μ, 分散σ^2を与えるガウス分布$N(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left[-\frac{(X-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$のモーメント生成関数を求めよ。また、モーメント法によりX, X^2の期待値$E[X], E[X^2]$を求めよ。

大問２：(15点の予定)

1. 非負の確率変数Xについて、以下で表されるMarkovの不等式が成り立つ事を示せ。

$$\mathrm{Pr}[X \geq a] = \int_a^\infty dXp(X) \leq \mathrm{E}[X]/a \tag{1}$$

2. 下に凸な関数$f(x)$と確率変数xに対して、$x = X_i$となる確率分布が$\{p_i\}(\sum_i p_i = 1)$であるとする。この時、以下の不等式(Jensen(イェンセン)の不等式)が成立する事を示せ。

$$f(E[x]) \leq E[f(x)] \quad \left(f(\sum_{i=1}^n p_i X_i) \leq \sum_{i=1}^n p_i f(X_i)\right) \tag{2}$$

大問３：(25点の予定)

1. 大きさ$L \times L \times L$の箱に閉じ込められている質量mの粒子のエネルギー固有値をSchrodinger方程式より導け。(答えだけでも良い。)(離散変数$n_x, n_y, n_z(= 0, 1, 2, 3, \ldots)$を用いて表せ)
2. 1の結果を用いてこの粒子のエネルギーϵがEよりも小さいとした時の粒子の取りうる状態の数を求めよ。$2\pi\hbar/L$が十分小さく、$2\pi\hbar n_\alpha/L$を連続値としてみなしてよい。
3. 2の結果を用いて、粒子のエネルギーが$E \sim E + dE$の間にある時の状態数をdEについて１次のオーダーまでで表せ。またその結果をdEで割った状態密度$W(E)$を書いてみよ。
4. 同様の箱にお互いが相互作用しない粒子がN個入っている時の、状態数・状態密度を計算せよ。(N次元の半径rの球の体積が$2\pi^{N/2}r^N/N\Gamma(N/2)$と書けることを用いて良い。$\Gamma$はガンマ関数である。) ここでN個の粒子は互いに区別しないとして、希薄極限において計算せよ。

5. ４の問題設定において、エントロピーを $S(E)=k_B\log[W(E)]$ とおき、N が十分大きいとして N の一番大きなオーダーのみ考えた時、理想気体のエネルギー E が $E=\frac{3}{2}Nk_BT$ で与えられる事を示せ。

大問４：(15 点の予定)

大問３の問題設定と同じく、$L\times L\times L$ の立方体の中の N 個の自由粒子が平衡状態でカノニカル分布になっている時、分配関数を計算せよ。また分配関数からエネルギーの期待値、自由エネルギーを求め、熱力学的な圧力 $(P=-\partial F/\partial V)$ を計算せよ。(粒子は区別しないとして希薄極限を考えよ。)

大問５：(20 点の予定)

カノニカル分布は「エネルギーの期待値を固定した際に、シャノンエントロピーを最大化する分布」としても導出する事ができる。これを Lagrange の未定乗数法を用いて導出したい。(ミクロカノニカルは状態 (確率変数) のエネルギーを固定して導出。)

1. 状態を x, その状態のエネルギーを $\epsilon(x)$ とした時に、状態確率分布 $p(x)$ についての拘束条件を２つ書け。(確率分布の和が１、そしてエネルギー期待値が E とする)

2. (1) の拘束条件について、Lagrange の未定乗数をそれぞれ α,β として、シャノンエントロピー $S(p)=-\int dxp(x)\log[p(x)]$ に取り入れた Lagrange 関数を書け。

3. (2) の Lagrange 関数から拘束条件下でシャノンエントロピーを最大にする状態確率分布 $p(x)$ を、未定乗数 α,β を用いて表せ。また結果を拘束条件式に代入する事で α,β が満たすべき式を書け。ただし汎函数微分
$$\frac{\delta}{\delta p}\Big(\int dxF(p(x))\Big)=0\Rightarrow\frac{\partial F(p)}{\partial p}(x)=0\Big(\forall x\Big)$$
を用いよ。

4. エネルギー ϵ の状態の状態数を Ω_ϵ として、(3) で求めた $p(x)$ を $p(\epsilon)$ に書き直せ。さらに多体極限で成り立つとされる近似
$$Z(\beta(E))=\sum_\epsilon\Omega_\epsilon\exp[-\beta(E)\epsilon]$$
$$E=-\frac{\partial}{\partial\beta(E)}\log Z(\beta(E))\simeq-\frac{\partial}{\partial\beta(E)}\log\Big[\Omega_E\exp[-\beta(E)E]\Big]$$
を用いる事で、Lagrange の未定乗数 β が (注目している系の) 逆温度である事を導け。

大問6：(10点の予定)

Ising模型の真の平衡状態を表す確率分布 $p(\{s_i\})$ に対して、独立性を仮定した近似分布 $\tilde{p}(\{s_i\}) = \prod_i \tilde{p}(s_i)$ を導出したい。 この時、$p(\{s_i\})$ と $\tilde{p}(\{s_i\})$ は分布としてできるだけ近くなっていて欲しいので、確率分布における (擬) 距離である Kullback-Leibler divergence

$$D_{KL}(\tilde{p}|p) = \sum_{\{s_i\}} \tilde{p}(\{s_i\})\log[\tilde{p}(\{s_i\})/p(\{s_i\})]$$

を $\sum_{s_i} \tilde{p}(s_i) = 1$ の制約下で最小化する事を考える。$p(\{s_i\})$ は Ising模型の Hamiltonian

$$H = -J \sum_{<i,j>} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

が与えるカノニカル分布であるとして、近似分布 $\tilde{p}(s_i)$ をサイト j のスピンの期待値 $< s_j >$ を用いて表せ。またそこから $< s_i > = < s_j >$ として、$< s_i >$ が満たすべき式を求めよ。(これは平均場近似で求めた式と一致する。)($s_i = \pm\frac{1}{2}$ の値をとるとする)

大問7：(大問6までの合計が60点までに満たない場合、この問題の配点を加点する。そうでない場合は、配点の半分を加点する。)(公平性のため、大問6までで60点に満たない場合は、この問題の加点による合計は最大65点で打ち切るものとする。)(20点の予定) (ヤマが外れてしまった場合の救済措置もしくは時間が余った人のボーナス問題として問題を設定している。)

周期的なNサイトの1次元Ising模型 $H = \sum_{i=1}^{N}[-Js_i^z s_{i+1}^z - hs_i^z]$ $(J < 0, s_{N+1} = s_1)$ において、熱平衡状態における磁化の期待値を転送行列もしくは平均場近似を用いて計算せよ。系の逆温度を β とする。(平均場近似を用いる場合は、解を求める為の方程式を導出すれば良い。ただし (平均場近似で解く場合) 反強磁性 (交互に逆向きに磁化すること) が出る可能性も考慮せよ。)