The Assignment for Chapter 6 of Statistical Mechanics and Neural Networks

Yuhao Li

PMI Lab, School of Physics, Sun Yat-sen University

November 4, 2024



考虑 $E \sim N(0, N^2/2)$, $S \sim N(0, N^{2\alpha}/2)$,讨论不同指数对处于不同自由能水平的构型数的影响

注意到 F = E - TS, 自由能的概率分布写为

$$P(F) = \mathbb{E}_{E,S} \, \delta \left(F - (E - TS) \right) = \int \frac{\mathrm{d}\hat{F}}{2\pi} \, e^{i\hat{F}F} \, \mathbb{E}_E \, e^{-i\hat{F}E} \, \mathbb{E}_S \, e^{i\hat{F}TS} \tag{1}$$

其中, 能量项计算为

$$\mathbb{E}_{E} e^{-i\hat{F}E} = \int dE \ P(E) \ e^{-i\hat{F}E} = \int dE \ \frac{1}{\sqrt{N\pi}} \exp\left(-\frac{E^{2}}{N} - i\hat{F}E\right) = e^{-N\hat{F}^{2}/4}$$
 (2)

熵项计算为

$$\mathbb{E}_{S} e^{i\hat{F}TS} = \int dS \ P(S) \ e^{i\hat{F}TS} = \int dS \ \frac{1}{N^{\alpha} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{S^{2}}{N^{2\alpha}} + i\hat{F}TS\right) = e^{-N^{2\alpha}T^{2}\hat{F}^{2}/4}$$

$$P(F) = \int \frac{d\hat{F}}{2\pi} \exp\left(-N\hat{F}^{2}/4 - N^{2\alpha}T^{2}\hat{F}^{2}/4 + i\hat{F}F\right)$$

$$= \int \frac{d\hat{F}}{2\pi} \exp\left[-\frac{1}{4}\left(N + N^{2\alpha}T^{2}\right)\hat{F}^{2} + i\hat{F}F\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi(N + N^{2\alpha}T^{2})}} \exp\left(-\frac{F^{2}}{N + N^{2\alpha}T^{2}}\right)$$

(4a)

(4b)

(4c)

考虑含有 N 个 Ising 自旋的系统,总构型数为 2^N ,给定自由能 F,构型数为

$$\langle n(F) \rangle = 2^N P(F) = \frac{1}{\sqrt{\pi N(1 + N^{2\alpha - 1}T^2)}} \exp\left(N \ln 2 - \frac{F^2}{N(1 + N^{2\alpha - 1}T^2)}\right)$$
 (5)

类比热力学熵的概念,可以定义自由能密度的构型熵,在 1RSB 中又称为复杂性,为

$$\Sigma(f) \equiv \lim_{N \to \infty} \frac{\ln \langle n(F) \rangle}{N}$$
$$= \lim_{N \to \infty} \left[\ln 2 - \frac{f^2}{N} \right]$$

$$= \lim_{N \to \infty} \left[\ln 2 - \frac{f^2}{(1 + N^{2\alpha - 1} T^2)} - \frac{1}{2N} \ln \left(\pi N (1 + N^{2\alpha - 1} T^2) \right) \right]$$

$$= \ln 2 - \lim_{N \to \infty} \frac{f^2}{(1 + N^{2\alpha - 1}T^2)}$$

因此可得构型熵与 α 的关系为

$$\Sigma(f) = \begin{cases} \ln 2 - f^2 & \text{for } \alpha < \frac{1}{2} \\ \ln 2 - \frac{f^2}{1 + T^2} & \text{for } \alpha = \frac{1}{2} \\ \ln 2 & \text{for } \alpha > \frac{1}{2} \end{cases}$$

(6b)

(6c)

(7)

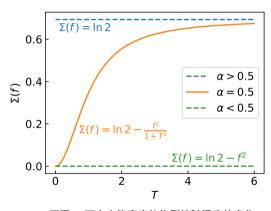


FIG. 1. 不同 α 下自由能密度的构型熵随温度的变化。 自由能密度取 $f=\sqrt{\ln 2}$,因此, $\alpha>0.5$ 时 $\Sigma=\ln 2$, $\alpha<0.5$ 时 $\Sigma=0$, $\alpha=0.5$ 时 Σ 随温度变化。

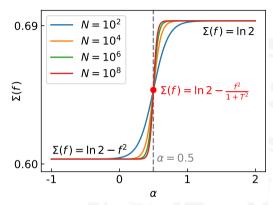


FIG. 2. 大 N 极限下自由能密度的构型熵随 α 的变化。 自由能密度取 f=0.3,温度取 T=1,在 $N\to\infty$ 极限下,构型熵 Σ 在 $\alpha=0.5$ 处发生跳变。