Todennäköisyys ja statistinen fysiikka **Harjoitukset 4**
Kevät 2014 **13.2.2014**

Tehtävä 1. Olkoot $a < b$ kokonaislukuja, olkoon $S = (S_t)_{t\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ symmetrinen satunnaiskävely $\mathbb{Z}$:lla lähetettynä pisteestä $S_0 = x \in [\![a,b]\!]$, ja olkoon τ poistumisaika väliltä $[\![a,b]\!]$ eli $\tau = \inf\{t \geq 0 \,|\, S_t = a \text{ tai } S_t = b\}$. Määritellään generoiva funktio

$$g(x,z) = \mathsf{E}\left[z^\tau\right] = \sum_{s=0}^{\infty} z^s\, \mathsf{P}\left[\tau = s \,\middle|\, S_0 = x\right], \qquad \text{kun } x \in [\![a,b]\!] \text{ ja } |z| < 1.$$

Osoita, että funktio $x \mapsto g(x,z)$ on muotoa $x \mapsto A\lambda^x + B\lambda^{-x}$, ja laske luvut λ, A, B.

Tehtävä 2. Olkoon H Hamiltonin funktio Ω:lla ja P_β vastaava Boltzmannin jakauma, $\beta \geq 0$. Määritellään seuraavasti

$$S = \mathsf{E}_\beta[-\log(\exp(-\beta H)/Z(\beta))], \quad U = \mathsf{E}_\beta[H], \quad F = -\frac{1}{\beta}\log Z(\beta), \quad T = \frac{1}{\beta}.$$

Osoita seuraavat kaavat: $U = \partial_\beta(\beta F)$, $S = \beta^2\partial_\beta F$, $F = U - ST$.

Tehtävä 3. Tn-jakauman entropian määritelmä on $S(\,(p_i)_{i\in I}\,) = -\sum_{i\in I} p_i \log p_i$.

(a) Jos $(p_{ij})_{i\in I, j\in J_i}$ on todennäköisyysjakauma äärellisellä joukolla $\Omega = \bigsqcup_{i\in I} J_i$ (joukkojen erillinen yhdiste), ja määrittelemme $q_i = \sum_{j\in I_j} p_{ij}$ ja $r_{ij} = \frac{p_{ij}}{q_i}$, niin osoita, että

$$(\star) \qquad S\left(\,(p_{ij})_{i\in I, j\in J_i}\,\right) = S\left(\,(q_i)_{i\in I}\,\right) + \sum_{i\in I} q_i\, S\left(\,(r_{ij})_{j\in J_i}\,\right).$$

(b) Oleta nyt vain, että kaikilla Ω, $\#\Omega = n$, entropia S on n:n muuttujan symmetrinen, jatkuva funktio, ja että $(\star)$ pätee, ja että Boltzmannin kaava entropialle pätee $S\big(\underbrace{1/n, \ldots, 1/n}_{n \text{ kpl}}\big) = \log n$. Osoita, että $S(\,(p_i)_{i\in I}\,) = -\sum_{i\in I} p_i \log p_i$.

Tehtävä 4. Tarkastellaan Isingin mallia ilman lähinaapurien ferromagneettista vuorovaikutusta: asetetaan $\Omega = \{-1,+1\}^N$ ja määritellään Hamiltonin funktio $H\colon \Omega \to \mathbb{R}$ kaavalla $H(\underline{\sigma}) = -B\sum_{i=1}^N \sigma_i$, kun $\underline{\sigma} = (\sigma_i)_{i=1}^N \in \Omega$. Laske partitiofunktio $Z(\beta, B) = \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$, empiirisen magnetisaation odotusarvo Boltzmannin jakaumassa $M(\beta,B) = \mathsf{E}[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \sigma_i]$ ja suskeptiivisuus $\chi = \frac{\partial}{\partial B} M(\beta, B)$.

Tehtävä 5. Curie-Weiss mallin Helmholtzin vapaa energia on

$$g(\beta, m) = \frac{1}{\beta}\Big(\frac{1+m}{2}\log(1+m) + \frac{1-m}{2}\log(1-m) - \log(2)\Big) - m^2.$$

(a) Kiinnitetyllä $\beta > \frac{1}{2}$ olkoon $\bar{m} = \bar{m}(\beta)$ yhtälön $\frac{\partial}{\partial m} g(\beta, m) = 0$ yksikäsitteinen positiivinen ratkaisu. Laske $\lim_{\beta \searrow \frac{1}{2}} \frac{\bar{m}(\beta)}{(\beta - \frac{1}{2})^{1/2}}$.

(b) Kiinnitetyillä $B > 0$ ja $\beta > 0$ olkoon $\tilde{m} = \tilde{m}(\beta, B)$ yhtälön $\frac{\partial}{\partial m}\big(g(\beta, m) - Bm\big) = 0$ yksikäsitteinen positiivinen ratkaisu. Laske $\lim_{B\searrow 0} \frac{\tilde{m}(\frac{1}{2}, B)}{B^{1/3}}$.

Exercises in English on the other side.

Exercise 1. Let $a < b$ be integers and let $S = (S_t)_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$ be a symmetric random walk on $\mathbb{Z}$ sent from $S_0 = x \in [\![a, b]\!]$, and let τ be the exit time from $[\![a, b]\!]$, that is, $\tau = \inf \{ t \geq 0 \,|\, S_t = a \text{ or } S_t = b \}$. Define a generating function

$$g(x,z) = \mathsf{E}\left[z^\tau\right] = \sum_{s=0}^{\infty} z^s \,\mathsf{P}\left[\tau = s \,\middle|\, S_0 = x\right], \qquad \text{when } x \in [\![a,b]\!] \text{ and } |z| < 1.$$

Show that the function $x \mapsto g(x,z)$ is of the form $x \mapsto A\lambda^x + B\lambda^{-x}$, and calculate the numbers λ, A, B.

Exercise 2. Let H be a Hamiltionian on Ω and let P_β be the corresponding Boltzmann distribution, $\beta \geq 0$. Define the following quantities

$$S = \mathsf{E}_\beta[-\log(\exp(-\beta H)/Z(\beta))], \quad U = \mathsf{E}_\beta[H], \quad F = -\frac{1}{\beta}\log Z(\beta), \quad T = \frac{1}{\beta}.$$

Show that the following formulas hold: $U = \partial_\beta(\beta F)$, $S = \beta^2 \partial_\beta F$, $F = U - ST$.

Exercise 3. The entropy of a probability distribution is $S(\,(p_i)_{i\in I}\,) = -\sum_{i\in I} p_i \log p_i$.

(a) If $(p_{ij})_{i\in I, j\in J_i}$ is a probability distribution on a finite set $\Omega = \bigsqcup_{i\in I} J_i$ (a disjoint union of sets), and we define $q_i = \sum_{j\in I_j} p_{ij}$ and $r_{ij} = \frac{p_{ij}}{q_i}$, then show that

$$(\star) \qquad S\left(\,(p_{ij})_{i\in I, j\in J_i}\,\right) = S\left(\,(q_i)_{i\in I}\,\right) + \sum_{i\in I} q_i\, S\left(\,(r_{ij})_{j\in J_i}\,\right).$$

(b) Now assume only, that for all Ω, $\#\Omega = n$, the entropy S is a symmetric, continuous function of n variables, and that $(\star)$ holds, and that the Boltzmann formula $S\big(\underbrace{1/n, \ldots, 1/n}_{n \text{ times}}\big) = \log n$ holds. Show that $S(\,(p_i)_{i\in I}\,) = -\sum_{i\in I} p_i \log p_i$.

Exercise 4. Consider the Ising model without the ferromagnetic interaction between the nearest neighbors: let $\Omega = \{-1, +1\}^N$, and define the Hamiltonian $H\colon \Omega \to \mathbb{R}$ by the formula $H(\underline{\sigma}) = -B\sum_{i=1}^N \sigma_i$ for $\underline{\sigma} = (\sigma_i)_{i=1}^N \in \Omega$. Calculate the partition function $Z(\beta, B) = \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$, the expected empirical magnetization in the Boltzmann distribution $M(\beta, B) = \mathsf{E}[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \sigma_i]$ and the susceptibility $\chi = \frac{\partial}{\partial B} M(\beta, B)$.

Exercise 5. For the Curie-Weiss model, the Helmholtz free energy reads

$$g(\beta, m) = \frac{1}{\beta}\Big(\frac{1+m}{2}\log(1+m) + \frac{1-m}{2}\log(1-m) - \log(2)\Big) - m^2.$$

(a) For a fixed $\beta > \frac{1}{2}$, let $\bar{m} = \bar{m}(\beta)$ be the unique positive solution of $\frac{\partial}{\partial m} g(\beta, m) = 0$. Calculate $\lim_{\beta \searrow \frac{1}{2}} \frac{\bar{m}(\beta)}{(\beta - \frac{1}{2})^{1/2}}$.

(b) For fixed $B > 0$ and $\beta > 0$, let $\tilde{m} = \tilde{m}(\beta, B)$ be the unique positive solution of $\frac{\partial}{\partial m}\big(g(\beta, m) - Bm\big) = 0$. Calculate $\lim_{B \searrow 0} \frac{\tilde{m}(\frac{1}{2}, B)}{B^{1/3}}$.

Suomenkieliset tehtävät toisella puolella.