Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Domáca úloha 1, týždne 1 až 3

zadaná 5. 3. 2024, riešenia mi pošlite na email, ideálne do 19. 3. 2024

Príklad 1 (Opakovanie štatistickej fyziky). Majme systém N spinov s možnými stavmi $\{0, 1\}$ a energiami $\{-\varepsilon, \varepsilon\}$. Definujme magnetizáciu ako $M = n_1 - n_0$.

a. Nájdite entropiu a teplotu tohto systému, keď sa na neho pozeráme ako na **mikrokanonický súbor** s energiou E.

b. Za akých podmienok, ak vôbec, môže byť táto teplota záporná?

c. Nájdite magnetizáciu systému M ako funkciu E.

d. Ďalej sa na spiny budeme pozerať ako na **kanonický súbor** s teplotou T. Nájdite strednú energiu systému $\bar{E}$ a ukážte že výsledok je kompatibilný s mikrokanonickým výsledkom.

e. Vypočítajte strednú magnetizáciu.

f. Vypočítajte entropiu $S = k \log\big(\Omega(\bar{E})\big)$.

g. Vypočítajte entropiu z kanonickej partičnej sumy Z.

Príklad 2 (Generátor náhodného smeru). Dotiahnite úlohu o generovaní náhodného smeru v troch rozmeroch do konca. To znamená, že máme generátor dvoch rovnomerne rozdelených náhodných čísel ξ, η na intervale $(0, 1)$ a chcete z nich vyrobiť uhly θ, ϕ, ktoré budú reprezentovať rovnomerne rozdelený náhodný smer v troch rozmeroch.

V nejakom počítačovom programe vygenerujte na základe tohto predpisu náhodne body na sfére a overte, že sú rovnomerne. Skúste body vygenerovať podľa zlého vzorca – napríklad takého bez faktor $\sin\theta$ – a ukážte, že dostaneme body ktoré nie sú rovnomerne rozdelené.

Príklad 3 (Ups). Meranie hmotnosti častice ukázalo, že jej hmotnosť by mala byť $(-0.3 \pm 1)eV$. To ale tak nemôže byť, nakoľko hmotnosť je určite kladná. Aká je očakávaná hmotnosť častice po uvážení tohto faktu?

Príklad 4 (Metropolisov algoritmus ako generátor náhodných čísel). **Bonus.**

Majme náhodnú premennú x, ktorá je rozdelená podľa rozdelenia pravdepodobnosti $p(x)$. Zostrojme nasledujúcu postupnosť hodnôt náhodnej premennej $\{x_i\}, i = 1, \ldots, N$. Začnime s nejakou hodnotou x_0, na základe algoritmu ktorý bude špecifikovaný neskôr zvoľme testovaciu hodnotu x_t a urobme pomer

$$\alpha = \frac{p(x_t)}{p(x_0)} \ .$$

Potom vyberieme náhdoné číslo q z intervalu $(0, 1)$ a ak $\alpha \geq q$, za x_1 zvolíme x_t, ak $\alpha < q$ za x_1 zvolíme x_0. Rovnakú postup opakujeme postupne pre ďalšie x_i. Dá sa ukázať, že rozdelenie takomto súbore hodnôt $\{x_i\}$ konverguje k $p(x)$, t.j. že vybrať náhodne z tohto súboru je to isté ako vybrať náhodne zo všetkých možných x podľa rozdelenia pravdepodobnosti $p(x)$.

a. Za náhodnú premennú zvoľme celé čísla $\mathbb{Z}$ a $x_0 = 0$. Za algoritmus generovania x_t zoberme náhodný krok veľkosti 1 vpravo alebo vľavo. Takýto algoritmus vygeneruje pre $p(x) = e^{-x^2/2}$ postupnosť celých čísel rozdelených podľa Gaussovho rozdelenia. Overte to počítačovým programom. Skúste, ako váš výsledok závisí od voľby N a ako to vyzerá, keď budete čísla x voliť na číselnej osi hustejšie.

b. Vyskúšajte rôzne iné rozdelenia $p(x)$, napríklad aj také, kedy neviete nájsť generátor metódou inverzná k primitívnej. Kedy funguje Metropolis lepšie, ako táto metóda?