

Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky

Domáca úloha 1, týždne 1 až 3

zadaná 11. 3. 2025, riešenia mi pošlite na email, ideálne do 25. 3. 2025

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

- Nájdite entropiu a teplotu tohto systému, keď sa na neho pozeráme ako na **mikrokanonický súbor** s energiou E .
- Za akých podmienok, ak vôbec, môže byť táto teplota záporná?
- Nájdite magnetizáciu systému M ako funkciu E .
- Ďalej sa na spiny budeme pozeráť ako na **kanonický súbor** s teplotou T . Nájdite strednú energiu systému $\bar{E}$ a ukážte že výsledok je kompatibilný s mikrokanonickým výsledkom.
- Vypočítajte strednú magnetizáciu.
- Vypočítajte entropiu $S = k \log(\Omega(\bar{E}))$.
- 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 $\{x_i\}, i = 1, \dots, N$. Začnime s nejakou hodnotou x_0 , na základe algoritmu ktorý bude špecifikovaný neskôr zvolíme testovaciu hodnotu x_t a urobme pomer

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

Potom vyberieme náhodné 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 postupnosť 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 $p(x)$.

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