2017.7.28

情報統計力学試験問題

定義.

サイコロ投げのように，起こりうる現象（１の目がでるなど）の集合を Ω とし，標本空間という。サイコロ投げなら，$\Omega = \{1,2,3,4,5,6\}$ である。ただし，ここで，1 は 1 の目が出ることを表す。Ω の部分集合 A を事象と呼ぶ。事象の集合 $\mathcal{F}$ が次の性質を満たすとする。

1. $\Omega \in \mathcal{F}$
2. $A \in \mathcal{F}$ ならば，$A^c \in \mathcal{F}$, ここで，$A^c = \Omega - A$,　つまり，A の補集合
3. $A_i \in \mathcal{F}$ $(i = 1, 2, \cdots)$ ならば，$\cup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{F}$

また，$\mathcal{F}$ の要素 $A \in \mathcal{F}$ に対して次の性質を持つ確率 $P(A)$ が定義されているとする。

1. $P(\Omega) = 1.$
2. $0 \le P(A) \le 1,\ A \in \mathcal{F}.$
3. $A_i \in \mathcal{F}$ $(i = 1, 2, \cdots)$ が背反事象，つまり，$A_i \cap A_j = \phi,\ (i \neq j)$ ならば

$$P(\cup_{i=1}^{\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$$

必修問題

I. 以下を示せ。

1. $P(\phi) = 0$, ここで，ϕ は空集合。
2. $A, B \in \mathcal{F}$，かつ $A \subset B$ なら，$P(A) \le P(B)$.
3. $A, B \in \mathcal{F}$ が互いに背反，つまり，$A \cap B = \phi$ なら，$P(A \cup B) = P(A) + P(B)$.
4. $A \in \mathcal{F}$ なら，$P(A^c) = 1 - P(A)$.
5. 事象 A, B について，$P(A) > 0, P(B) > 0$ とする。B が起こる条件のもとで A が起こる確率を，事象 B が与えられたときに A が起こる条件付き確率といい，$P(A|B)$ と書く。これは次のようになる。

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}.$$

ベイズの公式

$$P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A) \tag{1}$$

6. 次の等式を示せ。ただし，$P(B) > 0, P(B^c) > 0$ とする.

$$P(A) = P(A|B)P(B) + P(A|B^c)P(B^c) \tag{2}$$

II. 大数の法則，中心極限定理，大偏差原理について述べよ。

選択問題　以下の問題から 1 問選択して解答せよ。

III. 統計力学と情報理論におけるエントロピーの関係。
$k_{\rm B}$ をボルツマン定数とする。絶対温度 T，化学ポテンシャル μ の熱浴，粒子浴とエネルギー及び粒子のやりとりをする系を考える。この系の粒子数とエネルギーが N, E_N である一つの状態にある確率は，グランドカノニカル分布

$$P(N,E_N)=\frac{1}{\Xi}e^{-\beta(E_N-\mu N)},\quad \Xi=\sum_{N=0}^{\infty}\int dE\Omega(N,E)e^{-\beta(E-\mu N)}$$

で与えられる。ここで，$\beta=1/(k_{\rm B}T)$，$\Omega(N,E)$ は粒子数が N，エネルギーが E であるときの状態密度である。$\Xi(V,T,\mu)$ は大分配関数と呼ばれる。このとき，

$$\begin{aligned} PV &= k_{\rm B}T\ln\Xi, \\ \langle N\rangle &= k_{\rm B}T\frac{\partial}{\partial\mu}\ln\Xi, \\ S &= \frac{\partial}{\partial T}(k_{\rm B}T\ln\Xi) \end{aligned}$$

で与えられる。一方，情報エントロピーは，

$$H_E=-\sum_{N=0}^{\infty}\int dE\Omega(N,E)P(N,E)\log_2 P(N,E)$$

で与えられる。

$$H_E=\frac{1}{k_{\rm B}\ln 2}S$$

となることを示せ。

IV. グランドカノニカル分布の応用として，気体分子が M 個の孔へ吸着する問題を考える。気体分子の系を，温度 T，化学ポテンシャル μ の熱浴，粒子浴と考える。1 個の孔の状態は，気体分子が入らないときには，エネルギー 0，気体分子が 1 個入っている時には，エネルギー ε とする。また，2 個以上の気体分子は入れないとする。以下の問いに答えよ。

(1) M 個の吸着孔の大分配関数 Ξ を求めよ。

(2) M 個の吸着孔のうち，気体分子が吸着している孔の数の期待値 $\langle N\rangle$ を計算し，吸着率 $r=\frac{\langle N\rangle}{M}$ が

$$r = \frac{1}{1+e^{-\beta(\varepsilon+\mu)}}$$

となることを示せ。