2018.7.27

# 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 $\Omega$ 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。$\Omega$ 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. $0 \leq P(A) \leq 1,\ A \in \mathcal{F}.$
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. 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。

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

   以下のベイズの公式を示せ。

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

2. 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。

III. 磁性体のモデルの平均場近似での取扱い。

磁性体のもっとも簡単なモデルであるイジングモデルを考える。イジングスピンは、$s_i = \pm 1$ の値をとる。それらが相互作用することにより、磁化を生じる（磁石になる）かを統計力学により解析する。ここでは、最隣接スピン間の相互作用があるモデルを分子場近似によって解く。空間次元は特に指定せず、あるスピンの最隣接スピン数が $z$ であるとする。ハミルトニアンは、

$$H = -J \sum_{\mathrm{n.n.}} s_i s_j \tag{3}$$

で与えられる。ここで、$\sum_{\mathrm{n.n.}}$ は最隣接スピン対についての和である。分子場近似（平均場近似）では、注目するスピン $s_i$ 以外を平均値 $\langle s_j \rangle$ で置き換えることにより、一体問題に還元する。平均値は、スピンに依存しないとして、$m = \langle s_j \rangle$ とおく。具体的には、$\delta s_i = s_i - m$ として、$\delta s_i$ の 2 次の項を無視する。つまり、$s_i s_j = (m + \delta s_i)(m + \delta s_j) = m^2 + m(\delta s_i + \delta s_j) + \delta s_i \delta s_j \sim m^2 + m(\delta s_i + \delta s_j)$ と近似する。

(1) $\sum_{\mathrm{n.n.}} s_i s_j \sim mz \sum_i s_i - \frac{Nz}{2} m^2$ を示せ。

これより、ハミルトニアンは、

$$H = -zmJ \sum_i s_i + \frac{NzJ}{2} m^2 \tag{4}$$

となる。

(2) 分配関数 $Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta H}$ が

$$Z = e^{-\frac{\beta J N z m^2}{2}} [2 \cosh(\beta m z J)]^N \tag{5}$$

となることを示せ。ここで、$\beta = 1/(k_B T)$, $k_B$ はボルツマン定数、$T$ は絶対温度、$\mathrm{Tr} = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1}$. したがって、自由エネルギー $F = -k_B T \ln Z$ は、

$$F(m) = \frac{JNzm^2}{2} - \frac{1}{\beta} N \ln\{2 \cosh(\beta m z J)\} \tag{6}$$

となる。これは、ランダウ自由エネルギーと呼ばれ、これを最小にする $m$ が観測される磁化である。

(3)　自由エネルギーの極値条件より、$m$ の従う方程式（自己無撞着方程式）が、

$$m = \tanh(\beta m z J) \tag{7}$$

となる事を示せ。

(4) 式 (7) は、$T_c < T$ で $m = 0$ の解、$T_c > T$ で $m = 0$ の解の他に、$m = \pm m^*, (m^* > 0)$ の解があることを示せ。また、$T_c = \frac{Jz}{k_B}$ を示せ。

(5) $F'(m)$ の $m = m^*$ の前後での符号の変化を調べ、$T_c > T$ では、$m = \pm m^*$ で自由エネルギーが最小であることを示せ。

**選択問題　以下の問題から 1 問選択して解答せよ。**

IV. ベイズの公式の応用。乳がん検診に関する確率の問題を考える。以下のような確率を定義する。

$P$(陽性) : 検診で乳がんと判定される確率。$P$(乳がん) : 乳がんである確率。

$P$(陽性 | 乳がん) : 乳がんであるときに、検診で乳がんであると判定される確率。

$P$(乳がん | 陽性) : 検診で乳がんであると判定されたとき、実際に乳がんである確率。

いま、$P$(陽性 | 乳がん) $= 0.9$ とする。つまり、乳がんであるときに、検診で乳がんであると判定される確率が 9 割であるとする。また、実際の乳がんである人の割合は 0.8 パーセント、つまり、$P$(乳がん) $= 0.008$ とする。さらに、乳がんでないのに陽性となる確率が、$P$(陽性 | 乳がんでない) $= 0.07$ とする。
(1) $P$(陽性) $\simeq 0.08$ となることを示せ。
ヒント.　$P(A^c) = 1 - P(A)$ と、式 (2) を用いよ。
(2) ベイズの公式 (1) を用いて、検診で陽性と判定され、実際に乳がんである確率が約９パーセント、つまり、$P$(乳がん | 陽性) $\simeq 0.09$ となる事を示せ。
(3) もう一度検査して、再び陽性と判定されたとき、実際に乳がんである確率が、約５８パーセントとなる事を示せ。

V. 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。系が、体積 $V$ の断熱容器に入れられており、外部とのエネルギーのやりとりが行われていないとする。系のエネルギーは、$E$ であり、その状態数を $W$ とする。　系の状態を、$i, (i = 1, \cdots, W)$ で表すとき、状態 $i$ にある確率は、ミクロカノニカル分布

$$P_i = \frac{1}{W}$$

で与えられる。このとき、

$$\begin{aligned} S &= k_{\rm B} \ln W, \\ \frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial E}, \\ \frac{p}{T} &= \frac{\partial S}{\partial V}. \end{aligned}$$

である。一方、情報エントロピーは、

$$H_E = -\sum_{i=1}^{W} P_i \log_2 P_i$$

で与えられる。

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

となることを示せ。