Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria I

Zadanie 1. (F) Mając daną sumę statystyczną $Z_N(H,T)$ możemy wyznaczyć *energię swobodną* (na jeden spin) układu poprzez przejście do *granicy termodynamicznej*

$$f(H,T) = -k_B T \lim_{N\to\infty} \frac{\ln Z_N(H,T)}{N}.$$

Widom (1965) zasugerował, że w otoczeniu punktu krytycznego funkcja f powinna podlegać regułom skalowania w postaci

$$\lambda f(H,t) = f(\lambda^a t, \lambda^b H), \qquad \text{dla } \lambda > 0,$$

gdzie $t = (T - T_c/T_c)$ i T_c jest temperaturą w punkcie krytycznym, zaś a i b są pewnymi rzeczywistymi parametrami.

Entropia s, *magnetyzacja* m, *ciepło właściwe* c_H (przy stałym H) oraz *podatność magnetyczna* χ_T może być wyznaczona za pomocą wzorów

$$s = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_M, \quad M = -\frac{1}{\mu_0}\left(\frac{\partial f}{\partial H}\right)_T, \quad c_H = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_H, \quad \chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T.$$

Dla $H = 0$ i $t = 0$ wielkości termodynamiczne mogą mieć osobliwości. Asymptotyczne zachowanie wielkości termodynamicznych w otoczeniu punktu krytycznego może być opisane przez wykładniki krytyczne $\alpha, \alpha', \beta, \gamma, \gamma', \delta$:

$$M(0,T) \sim \begin{cases} (-t)^\beta & \text{, gdy } t \to 0^- \\ 0 & \text{, gdy } t \to 0^+ \end{cases}, \qquad M(H,T_c) \sim \pm|h|^{1/\delta} \text{ , gdy } h \to \pm 0,$$

$$\chi_T(0,T) \sim \begin{cases} t^{-\gamma} & \text{, gdy } t \to 0^+ \\ (-t)^{-\gamma'} & \text{, gdy } t \to 0^- \end{cases}, \quad c_H(0,T) \sim \begin{cases} t^{-\alpha} & \text{, gdy } t \to 0^+ \\ (-t)^{-\alpha'} & \text{, gdy } t \to 0^- \end{cases}.$$

Zakładając hipotezę skalowania Widoma i dodatkowe założenie $\frac{\partial g}{\partial y}(-1,y) \sim y^c$, gdy $y \to \infty$ dla pewnej stałej c, udowodnij, że

$$\alpha = \alpha' = 2 - \frac{1}{a}, \quad \beta = \frac{1}{a} - \Delta, \quad \gamma = \gamma' = 2\Delta - \frac{1}{a}, \quad \delta = \frac{\Delta}{\beta}.$$

Wywnioskuj stąd związki między wykładnikami krytycznymi

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \qquad \gamma = \beta(\delta - 1). \tag{1}$$

Zadanie 2. (M) (pierścień Isinga) Spiny s_i dla $i = 1, \ldots, N$ mogą przyjmować niezależnie wartości ± 1 (z rozkładem jdnostajnym). Hamiltonian układu dany jest wzorem

$$\mathcal{H}(s_1, \ldots, s_N) = -J \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^{N} s_i,$$

gdzie $s_{N+1} = s_1$ i $J > 0$. Znajdź sumę statystyczną

$$Z_N(H,T) = \sum_{s_1,\ldots,s_N=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}(s_1, \ldots, s_N)),$$

gdzie $\beta = 1/k_B T$. Wyznacz $M(H,T)$ i udowodnij, że $\lim_{H\to 0} M(H,T) = 0$ dla $T > 0$. Zatem nie ma przejścia fazowego w niezerowej temperaturze. Wskazówka: rozważ macierz z Zadania 3.

Zadanie 3. (M) Wartość średnią funkcji mikrostanu $A(\{s_i\})$ względem zespołu kanonicznego definiujemy jako

$$\langle A\rangle = \frac{\sum_{\{s_i\}} A(\{s_i\})e^{-\beta\mathcal{H}(\{s_i\})}}{\sum_{\{s_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{s_i\})}} = Z_n^{-1}\sum_{\{s_i\}} A(\{s_i\})e^{-\beta\mathcal{H}(\{s_i\})}$$

Udowodnij, że w modelu z Zadania 2 po przejściu do granicy termodynamicznej mamy

$$\langle s_i s_j\rangle = \cos^2 2\phi + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{|j-i|}\sin^2 2\phi, \qquad \langle s_i\rangle = \cos 2\phi,$$

gdzie $\lambda_1 > \lambda_2$ są wartościami własnymi macierzy

$$\begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}, \qquad K = J/k_B T, h = H/k_B T$$

i $\cot 2\phi = e^{2K}\sinh h$.

Zadanie 4. (M)

a) Udowodnij, że jeśli $r_1, r_2, \ldots, r_N$ są niezależnymi rademacherami, to zmienne $r_1 r_2, r_2 r_3, \ldots, r_{N-1} r_N$ są również niezależnymi rademacherami;

b) Hamiltonian dla jednowymiarowego modelu Isinga ze swobodnymi warunkami brzegowymi oraz bez pola magnetycznego jest postaci

$$\mathcal{H}(s_1,\ldots,s_N) = -J\sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1}.$$

Korzystając z części a) wyznacz sumę statystyczną dla tego układu.

Zadanie 5. (M) Znajdź wektory własne i wartości własne macierzy

$$(M)_{i,j=1,\ldots,n} = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & \cdots & c_n \\ c_n & c_1 & \cdots & c_{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_2 & c_3 & \cdots & c_1 \end{bmatrix}.$$

Pokaż, że w sytuacji gdy macierz M jest rzeczywista i symetryczna, wartości własne są równe

$$\lambda_k = \sum_{s=1}^{n} c_s \cos[2\pi(k-1)(s-1)/n], \qquad k = 1,\ldots,n,$$

i odpowiadają im unormowane wektory własne

$$\left(\frac{1}{\sqrt{n}}(\cos[2\pi(k-1)(s-1)/n] + \sin[2\pi(k-1)(s-1)/n])\right)_{s=1,\ldots,n}, \qquad k = 1,\ldots,n.$$

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria II

Zadanie 1. (M) (model gaussowski) W modelu gaussowskim spiny mogą przyjmować wartości ciągłe z gęstością rozkładu normalnego. Zatem suma statystyczna jest równa

$$Z_N(H,T) = \int_{\mathbb{R}^N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}^N} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N s_i^2\right) \exp\left(-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(s_1,\ldots,s_N)\right) \mathrm{d}s_1 \ldots \mathrm{d}s_N.$$

Rozważmy hamiltonian układu N spinów zadany wzorem

$$\mathcal{H}(s_1,\ldots,s_N) = -\sum_{i,j=1}^N J_{ij} s_i s_j - H\sum_{i=1}^N s_i,$$

przy czym $J_{ij} = c_{|j-i| \mathrm{mod}\ (n)\ +1}$. Innymi słowy mamy

$$\mathcal{H}(s_1,\ldots,s_N) = -s^T M s - H\sum_{i=1}^N s_i,$$

gdzie $s = (s_1, s_2, \ldots, s_N)$ i macierz M ma postać jak w Zadaniu 1.5. Oznaczmy $\beta = 1/k_B T$, $h = H/k_B T$. Udowodnij, że

$$Z_N(H,T) = \exp\left(\frac{Nh^2}{1-2\beta\lambda_1} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \ln(1-2\beta\lambda_i)\right),$$

gdzie λ_k są jak w zadaniu 1.5. Wykaż, że w przypadku oddziaływania najbliższych sąsiadów $J_{ij} = J\delta_{|i-j|,1}$ mamy

$$\begin{aligned}\beta f(H,T) &= -\frac{h^2}{1-4K} + \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} \ln(1-4K\cos\omega)\,\mathrm{d}\omega \\ &= -\frac{h^2}{1-4K} + \ln\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-16K^2}\right).\end{aligned}$$

Zadanie 2. (M) (delta Diraca) a) Udowodnij, że dla funkcji $f \in L^2(\mathbb{R})$, hölderowskiej w zerze mamy

$$\lim_{M\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{1}{2\pi} \int_{-M}^{+M} e^{itx}\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x = f(0).$$

b) Udowodnij, że jeśli σ jest miarą Lebesgue'a na sferze $S^{N-1} \subset \mathbb{R}^N$ i $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ jest funkcją gładką o zwartym nośniku, to

$$\int_{S^N} f(s)\,\mathrm{d}\sigma(s) = \lim_{M\to\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^N} f(x) \int_{-M}^{+M} e^{it(1-|x|^2)}\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}x$$

Zadanie 3. (M) (model sferyczny Berlina i Kaca) W modelu sferycznym spiny mogą przyjmować konfiguracje spełniające warunek $\sum_{i=1}^{N} s_i^2 = N$. Konkretniej, suma statystyczna jest równa

$$\int_{S^{N-1}} \exp\left(-\frac{1}{k_B T}\mathcal{H}(s_1,\ldots,s_N)\right) \mathrm{d}\sigma(s),$$

gdzie σ jest standardową miarą probabilistyczną, rotacyjnie niezmienniczą na euklidesowej sferze S^{N-1}. Pokaż, że dla hamiltonianu z Zadania 1 mamy

$$Z_N(H=0,T) = A_n^{-1}\pi^{N/2}\frac{1}{2\pi i}\int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} \exp\left(\sum_{i=1}^{N}\left(z - \frac{1}{2}\ln(z-\beta\lambda_i)\right)\right) \mathrm{d}z,$$

gdzie A_N jest miarą Lebesgue'a sfery S^{N-1}, a liczba $\alpha > 0$ jest dostatecznie duża.

Zadanie 4. (M) a) Przypuśćmy, że $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ jest funkcją gładką spełniającą $g'(x) \neq 0$ dla $x \in \operatorname{supp} f$ i niech $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ będzie funkcją gładką o zwartym nośniku. Udowodnij, że

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)e^{iNg(x)}\,\mathrm{d}x = o(N^{-k})$$

dla wszystkich $k \in \mathbb{N}$.

b) Jeśli g ma skończenie wiele punktów krytycznych, które są niezdegenerowane, to

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)e^{iNg(x)}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \sum_{x:g'(x)=0} e^{\frac{1}{4}i\pi \operatorname{sgn} g''(x)}\,\frac{e^{iNg(x)}f(x)}{\sqrt{|g''(x)|}} + o(N^{-3/2}).$$

c) Jeśli g ma pojedyncze niezdegenerowane maksimum globalne w $x = x_0$, to

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)e^{Ng(x)}\,\mathrm{d}x = f(x_0)e^{Ng(x_0)}\left(\sqrt{\frac{2\pi}{N|g''(x_0)|}} + o(N^{-3/2})\right).$$

d) Jeśli $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ jest funkcją analityczną i $h : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ jest funkcją analityczną posiadającą pojedyncze globalne maksimum części rzeczywistej w punkcie $z = z_0$ i jeśli γ jest konturem, to

$$\int_{\gamma} f(z)e^{Ng(z)}\,\mathrm{d}z = e^{-\frac{1}{2}i\arg[-g''(z_0)]}\left(\sqrt{\frac{2\pi}{N|g''(z_0)|}} + o(N^{-3/2})\right).$$

Oczywiście zakładamy rozsądną całkowalność tych wyrażeń.

Zadanie 5. (M) Korzystając z Zadania 4 oblicz energię swobodną w modelu Berlina i Kaca:

$$-\beta f = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}[1+(4K)^2]^{1/2} - \frac{1}{2}\ln\frac{1}{2}\{1+[1+(4K)^2]^{1/2}\}.$$

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria III

Model Sherringtona-Kirkpatricka

Zadanie 1. (M) Niech $(g_{ij})_{i<j}$ będą niezależnymi zmiennymi losowymi o rozkładzie $\mathcal{N}(0,1)$. Niech (standardowo) $\sigma_i \in \{-1,+1\}$, $i = 1,\ldots,N$. Definiujemy losowy hamiltonian

$$H_N(\sigma)(\sigma) = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} g_{ij}\sigma_i\sigma_j.$$

Zdefiniujmy

$$R_{1,2}(\sigma^1,\sigma^2) = \frac{1}{N}\sum_{i\leq N} \sigma_i^1\sigma_i^2$$

oraz metrykę Hamminga na konfiguracjach spinów

$$d(\sigma^1,\sigma^2) = \frac{1}{N}\sharp\{i \leq N \mid \sigma_i^1 \neq \sigma_i^2\}.$$

Udowodnij, że

$$R_{1,2}(\sigma^1,\sigma^2) = 1 - 2d(\sigma^1,\sigma^2)$$

oraz

$$\mathbb{E}\left(H_N(\sigma^1), H_N(\sigma^2)\right) = \frac{N}{2}R_{1,2}^2 - \frac{1}{2}, \qquad \mathbb{E}H_N^2(\sigma) = \frac{N-1}{2}.$$

Zadanie 2. (M) Niech $(g_i)_{i\leq M}$ będą symetrycznymi gaussowskimi zmiennymi losowymi, dla których $\mathbb{E}g_i^2 \leq \tau$ dla $i \leq M$ (nie zakładamy niezależności). Udowodnij, że

$$\mathbb{E}\max_{i\leq M} g_i \leq \tau\sqrt{2\ln M}.$$

Zadanie 3. (M) Udowodnij, że $\mathbb{E}(\max_\sigma H_N(\sigma)/N) \leq \sqrt{2\ln 2}$.

Zadanie 4. (M) Definiujemy zmienną losową $Z_N = \sum_\sigma e^{-H_N(\sigma)}$. Jest to losowa suma statystyczna. Udowodnij, że istnieje wartość oczykiwana energii swobodnej na jeden spin

$$p_N = \frac{1}{N}\mathbb{E}\ln Z_N.$$

Zadanie 5. (M) Zdefiniujmy hamiltonian układu N spinów w polu magnetycznym h wzorem

$$H_N(\sigma) = -\frac{\beta}{\sqrt{N}}\sum_{i<j} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - h\sum_{i\leq N}\sigma_i.$$

Udowodnij, że

$$\ln 2 \leq p_N \leq \frac{\beta^2}{4}\left(1 - \frac{1}{N}\right) + \ln 2 + \ln \mathrm{ch} h.$$

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria IV

Zadanie 1. (M) Udowodnij, że dla hamiltonianu z Zadania III.3 mamy

$$0 \leq \frac{p_N(\beta)}{\beta} - \frac{1}{N}\mathbb{E}\max_{\sigma}(-H_N(\sigma)) \leq \frac{\ln 2}{\beta}.$$

Zadanie 2. (M) Wprowadzamy nowy, losowy hamiltonian

$$H_N(\sigma) = -\sum_{i\leq N} \sigma_i(\beta z_i\sqrt{q} + h),$$

gdzie q jest pewnym parametrem, a $z_1, z_2, \ldots$ są niezależnymi standardowymi zmiennymi gaussowskimi. Definiujemy średnią wartość funkcji $f : \Sigma_N \to \mathbb{R}$ (gdzie $\Sigma_N = \{-1, 1\}^N$) wzorem

$$\langle f\rangle = \frac{\sum_\sigma f(\sigma)e^{-\beta H_N(\sigma)}}{\sum_\sigma e^{-\beta H_N(\sigma)}}.$$

Zaobserwuj, że miara Gibbsa (zespół kanoniczny) generowana przez nowy hamiltonian jest produktowa, czyli dla funkcji $f : \Sigma_N \to \mathbb{R}$ postaci $f(\sigma) = \prod_{i\leq N} f_i(\sigma_i)$, gdzie $f_i : \Sigma_1 \to \mathbb{R}$, mamy $\langle f\rangle = \prod_{i\leq N}\langle f_i\rangle_i$. Średnia $\langle\cdot\rangle_i$ jest rozumiana jako średnia względem miary Gibbsa dla $H^{(i)}(\sigma) = \sigma(\beta z_i\sqrt{q} + h)$. Udowodnij, że

$$\langle\sigma_i\rangle = \mathrm{th}(\beta z_i\sqrt{q} + h).$$

Udowodnij, że

$$Z_N = 2^N \prod_{i\leq N} \mathrm{ch}(\beta z_i\sqrt{q} + h), \qquad p_N = \ln 2 + \mathbb{E}\ln \mathrm{ch}(\beta z\sqrt{q} + h),$$

gdzie z jest standardową zmienną gaussowską.

Zadanie 3. (M) Dla niezależnych zmienych gaussowskich $g_1, \ldots, g_M$ definiujemy przestrzeń gaussowską $\mathcal{G}$ jako zbiór liniowych kombinacji $z = \sum_{i\leq M} a_i g_i$. Przestrzeń liniową $\mathcal{G}$ jest naturalnie wyposażona w iloczyn skalarny $z\cdot z' = \mathbb{E}zz'$. W tym sensie jest podprzestrzenią $L^2(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.

a) Udowodnij, że podprzestrzenie F_1, F_2 przestrzeni $\mathcal{G}$ są ortogonalne wtedy i tylko wtedy, gdy są niezależne.

b) Dla dowolnego wektora $(z_1, \ldots, z_M)$ o rozkładzie łącznym gaussowskim istnieją zmienne $z'_1, \ldots, z'_N \in \mathcal{G}$ takie, że $(z_1, \ldots, z_M) \sim (z'_1, \ldots, z'_M)$.

c) dla dowolnej dodatnio określonej macierzy $(q_{ij})_{i,j\leq M}$ istnieją zmienne $y_1, \ldots, y_M$ o rozkładzie łącznym gaussowkim spełniające $\mathbb{E}y_i y_j = q_{ij}$.

Zadanie 4. (M) a) Wykaż, że jeśli g jest symetryczną zmienną gaussowską i $F \in C^1(\mathbb{R})$ jest funkcją spełniającą $\lim_{|t|\to\infty} F(t)e^{-at^2} = 0$ dla $a > 0$, to

$$\mathbb{E}gF(g) = \mathbb{E}g^2\mathbb{E}F'(g).$$

b) Wykaże, że jeśli $F \in C^1(\mathbb{R}^n)$ spełnia $\lim_{\|x\|\to\infty} |F(x)|e^{-a\|x\|^2} = 0$ dla $a > 0$, to

$$\mathbb{E}g(z_1, \ldots, z_n) = \sum_{i\le n} \mathbb{E}(gz_i)\mathbb{E}\frac{\partial F}{\partial x_i}(z_1, \ldots, z_n),$$

gdzie $g, z_1, z_2, \ldots, z_n$ są zmiennymi z pewnej przestrzeni gaussowskiej.

Zadanie 5. (M) Przypuśćmy, że rodziny $(u_i)_{i\le N}$ i $(v_i)_{i\le N}$ są niezależne i mają rozkład łączny gaussowski. Rozważamy losowe ścieżki

$$u_i(t) = \sqrt{t}u_i + \sqrt{1-t}v_i.$$

Niech $\phi(t) = \mathbb{E}F(u(t))$. Udowodnij, że dla funkcji F (jak w Zadaniu IV.4) mamy

$$\phi'(t) = \frac{1}{2}\sum_{i,j\le N} (\mathbb{E}u_iu_j - \mathbb{E}v_iv_j)\mathbb{E}\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j}(u(t)).$$

Zadanie 6. (M) (Lemat Slepiana) Przypuśćmy, że rodziny $(u_i)_{i\le N}$ i $(v_i)_{i\le N}$ mają rozkład łączny gaussowski i F jak poprzednio. Jeśli

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \ge 0 \qquad \text{dla } i \ne j,$$

$$\mathbb{E}u_i^2 = \mathbb{E}v_i^2 \quad \text{dla } i \le j, \qquad \mathbb{E}u_iu_i \ge \mathbb{E}v_iv_j \quad \text{dla } i \ne j,$$

to

$$\mathbb{E}F(u) \ge \mathbb{E}F(v).$$

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria V

Zadanie 1. (M) (nie martw się jeśli nie umiesz zrobić!) Niech $F : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}$ będzie funkcją L-lipschitzowską (względem metryki euklidesowej) i niech $g = (g_1, \ldots, g_M)$ będzie standardowym wektorem gaussowskim. Wtedy dla każdego $t > 0$ mamy

$$\mathbb{P}\left(|F(g) - \mathbb{E}F(g)| > t\right) \leq 2\exp\left(-\frac{t^2}{4L^2}\right).$$

Zadanie 2. (M) Dla każdego elementu s należącego do pewnego zbioru skończonego S rozważamy wektor $a(s) \in \mathbb{R}^M$ i liczbę $w_s > 0$. Definiujemy funkcję $F : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}$ wzorem

$$F(x) = \ln \sum_{s \in S} w_s \, e^{x \cdot a(s)}.$$

Niech g będzie standardowym wektorem gaussowskim w $\mathbb{R}^M$. Udowodnij, że

$$\mathbb{P}\left(|F(g) - \mathbb{E}F(g)| > t\right) \leq 2\exp\left(-\frac{t^2}{4\max_{s \in S} \|a(s)\|^2}\right),$$

dla $t > 0$, gdzie $\|\cdot\|$ jest normą euklidesową.

Zadanie 3. (M) Udowodnij, że losowa energia swobodna na jeden spin $f_N = N^{-1} \ln Z_N$ dla hamiltonianu

$$H_N(\sigma) = -\frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - h \sum_{i \leq N} \sigma_i$$

spełnia nierówność

$$\mathbb{P}\left(|f_N - \mathbb{E}f_N| > t\right) \leq 2\exp\left(-\frac{t^2 N}{2\beta^2}\right).$$

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria VI

Zadanie 1. (M) Niech $(u_\sigma)_\sigma$ i $(v_\sigma)_\sigma$, $\sigma \in \Sigma_N$ będą niezależnymi rodzinami o rozkładzie łącznym gaussowskim. Definiujemy ścieżkę między tymi rodzinami wzorem $u_\sigma(t) = \sqrt{t}u_\sigma + \sqrt{1-t}v_\sigma$. Niech $M = 2^N = card\ \Sigma_N$ i niech $F : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}$ będzie zadana wzorem

$$F(x) = \frac{1}{N} \ln Z(X), \qquad Z(x) = \sum_\sigma w_\sigma \exp(x_\sigma),$$

gdzie $w_\sigma > 0$ dla $\sigma \in \Sigma_N$. Wprowadzamy oznaczenie

$$U(\sigma, \tau) = \frac{1}{2}\mathbb{E}(u_\sigma u_\tau - v_\sigma v_\tau).$$

Dla $f : (\Sigma_N)^n \to \mathbb{R}$ definiujemy

$$\langle f \rangle_t = \frac{\sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_n} f(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)\ w_{\sigma_1} \cdot \ldots \cdot w_{\sigma_n} \exp(u_{\sigma_1}(t)) \cdot \ldots \cdot \exp(u_{\sigma_n}(t))}{w_{\sigma_1} \cdot \ldots \cdot w_{\sigma_n} \exp(u_{\sigma_1}(t)) \cdot \ldots \cdot \exp(u_{\sigma_n}(t))}.$$

Dla $\phi(t) = \mathbb{E}F(u(t))$ udowodnij, że

$$\phi'(t) = \frac{1}{N}\left(\mathbb{E}\langle U(\sigma,\sigma)\rangle_t - \mathbb{E}\langle U(\sigma^1,\sigma^2)\rangle_t\right).$$

Zadanie 2. (M) Niech $(g_{ij})_{1\le i<j\le N}$ i $(z_i)_{i\le N}$ będą niezależnymi zmiennymi losowymi o standardowym rozkładzie gaussowskich. Niech $(h_i)_{i\le N}$ będą zmiennymi losowymi o tym samym rozkładzie ze wszystkimi momentami skończonymi. Definiujemy zmienne

$$u_\sigma = \frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{1\le i<j\le N} g_{ij}\sigma_i\sigma_j, \quad v_\sigma = \beta \sum_{i\le N} z_i\sqrt{q}\sigma_i, \quad w_\sigma = \exp\left(\sum_{i\le N} h_i\sigma_i\right)$$

i funkcję $\phi(t) = F(u(t))$ (jak w Zadaniu VI.1). Udowodnij, że

$$\phi'(t) = \frac{\beta^2}{4}\left(1 - 2q - \mathbb{E}\langle R_{1,2}^2\rangle_t + 2q\mathbb{E}\langle R_{1,2}\rangle_t\right),$$

$$R_{1,2}(\sigma^1,\sigma^2) = \frac{1}{N}\sum_{i\le N} \sigma_i^1\sigma_i^2.$$

Wywnioskuj, że

$$\phi'(t) \leq \frac{\beta^2}{4}(1-q)^2, \qquad \phi(1) \leq \phi(0) + \frac{\beta^2}{4}(1-q)^2.$$

Zadanie 3. (M) Twierdzenie (Guerra's replica-symmetric bound) Dla hamiltonianu

$$H(\sigma) = -\frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i$$

prawdziwe jest oszacowanie

$$p_N(\beta, h) \leq \ln 2 + \mathbb{E} \ln \mathrm{ch}(\beta z\sqrt{q} + h) + \frac{\beta^2}{4}(1-q)^2,$$

dla wszystkich $q \geq 0$.

Zadanie 4. (M) Udowodnij, że liczba q ekstremalizująca wyrażenie

$$\mathbb{E} \ln \mathrm{ch}(\beta z\sqrt{q} + h) + \frac{\beta^2}{4}(1-q)^2$$

spełnia

$$q = \mathbb{E}\mathrm{th}^2(\beta z\sqrt{q} + h).$$

Zadanie 5. (M) (Latala-Guerra Lemma) Niech $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ będzie rosnącą funkcją nieparzystą, spełniająca $\phi''(y) < 0$ dla $y > 0$. Wówczas funkcja $\Psi(x) = \mathbb{E}\phi(z\sqrt{x} + h)^2/x$ jest malejąca na $\mathbb{R}^+$ i spełnia $\lim_{x\to+\infty} \Psi(x) = 0$ ($h \in \mathbb{R}$, z ma standardowy rozkład normalny).

Zadanie 6. (M) Udowodnij, że jeśli $\mathbb{E}h^2 > 0$, to równanie

$$q = \mathbb{E}\mathrm{th}^2(\beta z\sqrt{q} + h)$$

ma dokładnie jedno rozwiązanie.

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria VII

Zadanie 1. (M) Definiujemy

$$H_N(\sigma) = -\frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i, \quad p_N(\beta, h) = \frac{1}{N}\mathbb{E}\ln Z_N.$$

Udowodnij, że

$$p_{N_1+N_2}(\beta, h) \geq \frac{N_1}{N_1+N_2} p_{N_1}(\beta, h) + \frac{N_2}{N_1+N_2} p_{N_2}(\beta, h).$$

Udowodnij, że istnieje granica termodynamiczna $p(\beta, h) = \lim_{N\to\infty} p_N(\beta, h)$.

Wskazówka: Rozważ standardową ścieżkę od hamiltonianu H (policz $\phi(1)$) do hamiltonianu nieoddziałujących podukładów

$$\tilde{H}_N(\sigma) = -\frac{\beta}{\sqrt{N_1}} \sum_{i<j\leq N_1} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - \frac{\beta}{\sqrt{N_2}} \sum_{N_1<i<j\leq N_1+N_2} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i\leq N_1+N_2} h_i\sigma_i$$

i policz $\phi(0)$. Wyznacz $U(\sigma^1, \sigma^2)$, $U(\sigma, \sigma)$ i udowodnij, że $\phi'(t) > 0$ (patrz Zadania VI.1 i VI.2).

Zadanie 2. (M) Dla $w_\sigma > 0$ i $u_\sigma \in \mathbb{R}$ udowodnij, że

$$\Phi(\beta) := \frac{1}{N} \ln \sum_\sigma w_\sigma \exp(\beta u_\sigma)$$

jest funkcją wypukłą. Wywnioskuj stąd, że funkcja $\Phi(\beta) := N^{-1} \ln Z_N(\beta, h)$ jest losową funkcją wypukłą. Udowodnij to również zauważając, że dla dowolnej miary μ i funkcji $f > 0$ (na pewnej przestrzeni mierzalnej) funkcja $\beta \mapsto \ln \int f^\beta \mathrm{d}\mu$ jest wypukła.

Zadanie 3. (M) Udowodnij, że jeśli ciąg różniczkowalnych funkcji wypukłych $\phi_N : (a, b) \to \mathbb{R}$ jest zbieżny do funkcji wypukłej ϕ, to $\lim_{n\to\infty} \phi'_N(x) = \phi'(x)$ w punktach różniczkowalności funkcji ϕ.

Zadanie 4. (M) Udowodnij, że

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta} p_N(\beta, h) = \frac{\beta}{2}(1 - \mathbb{E}\langle R_{1,2}^2\rangle).$$

Udowodnij istnienie granicy $\lim_{N\to\infty} \mathbb{E}\langle R_{1,2}^2\rangle$.

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria VIII

Rozważamy dwie rodziny o rozkładzie łącznym gaussowskim $(u_\sigma)_{\sigma\in\Sigma}$, $(v_\sigma)_{\sigma\in\Sigma}$. Tworzymy ścieżkę między tymi rodzinami

$$u_\sigma(t) = \sqrt{t}u_\sigma + \sqrt{1-t}v_\sigma.$$

Dla funckcji $f : (\Sigma_N)^n \to \mathbb{R}$ i liczb $w_\sigma > 0$ określamy

$$\langle f\rangle_t = \frac{\sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} f(\sigma^1,\ldots,\sigma^n) w_{\sigma^1}\cdot\ldots\cdot w_{\sigma^n} \exp\left(\sum_{l\le n} u_{\sigma^l}(t)\right)}{\sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^n} w_{\sigma^1}\cdot\ldots\cdot w_{\sigma^n} \exp\left(\sum_{l\le n} u_{\sigma^l}(t)\right)}.$$

Określamy też $\nu_t(f) = \mathbb{E}\langle f\rangle_t$ i $\nu_t'(f) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\mathbb{E}\langle f\rangle_t)$. Używaliśmy też notacji

$$U(\sigma^l,\sigma^{l'}) = \frac{1}{2}\left(\mathbb{E}u_{\sigma^l}u_{\sigma^{l'}} - \mathbb{E}v_{\sigma^l}v_{\sigma^{l'}}\right).$$

Zadanie 1. (M) Udowodnij, że

$$\begin{aligned}\nu_t'(f) = &\sum_{1\le l,l'\le n} \nu_t\Big(U(\sigma^l,\sigma^{l'})f\Big) - 2n\sum_{1\le l\le n}\nu_t\left(U(\sigma^l,\sigma^{n+1})f\right)\\ &- n\nu_t\left(U(\sigma^{n+1},\sigma^{n+1})f\right) + n(n+1)\nu_t\left(U(\sigma^{n+1},\sigma^{n+2})f\right).\end{aligned}$$

Pokaż, że jeśli $U(\sigma,\sigma)$ nie zależy od σ, to

$$\begin{aligned}\nu_t'(f) = 2\Big(&\sum_{1\le l<l'\le n}\nu_t\Big(U(\sigma^l,\sigma^{l'})f\Big) - n\sum_{1\le l\le n}\nu_t\left(U(\sigma^l,\sigma^{n+1})f\right)\\ &+\frac{n(n+1)}{2}\nu_t\left(U(\sigma^{n+1},\sigma^{n+2})f\right)\Big).\end{aligned}$$

Zadanie 2. (M) Niech teraz

$$u_\sigma = \frac{\beta}{\sqrt{N}}\sum_{1\le i<j\le N} g_{ij}\sigma_i\sigma_j,\quad v_\sigma = \beta\sum_{1\le i\le N} z_i\sqrt{q}\sigma_i,\quad w_\sigma = \exp(\sum_{1\le i\le N} h_i\sigma_i),$$

gdzie (z_i) są niezależnymi standardowymi zmiennymi gaussowskimi. Wprowadziliśmy już notację

$$R_{l,l'} = \frac{1}{N}\sum_{1\le i\le N}\sigma_i^l\sigma_i^{l'}.$$

Udowodnij, że jeśli $f : (\Sigma_N)^2 \to \mathbb{R}$, to

$$\nu_t'(f) = \frac{N\beta^2}{2}\left(\nu_t((R_{1,2}-q)^2 f) - 2\sum_{1\le l\le 2}\nu_t((R_{l,3}-q)^2 f) + 3\nu_t((R_{3,4}-q)^2 f)\right).$$

Zadanie 3. (M) Udowodnij, że dla $\lambda > 0$ mamy

$$\nu_t\left((R_{3,4}-q)^2\exp(\lambda N(R_{1,2}-q)^2)\right) \le \nu_t\left((R_{1,2}-q)^2\exp(\lambda N(R_{1,2}-q)^2)\right).$$

Zadanie 4. (M) Udowodnij, że

$$\nu_t'\left(\exp(\lambda N(R_{1,2}-q)^2)\right) \le 2N\beta^2\nu_t\left((R_{1,2}-q)^2\exp(\lambda N(R_{1,2}-q)^2)\right).$$

Zadanie 5. (M) Udowodnij, że dla $t < \frac{\lambda}{2\beta^2}$ mamy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\nu_t\left(\exp((\lambda - 2t\beta^2)N(R_{1,2}-q)^2)\right)\right) \le 0.$$

Zadanie 6. (M) Przypuśćmy, że $q = \mathbb{E}\mathrm{th}^2(\beta z\sqrt{q}+h)$. Udowodnij, że dla $\lambda < 1/2$ mamy

$$\nu_0\left(\exp(\lambda N(R_{1,2}-q)^2)\right) \le \frac{1}{\sqrt{1-2\lambda}}.$$

W tym celu:
a) Pokaż, że $\nu_0(\sigma_i^1\sigma_i^2) = q$,
b) Pokaż, że dla $u \in \mathbb{R}$ mamy

$$\nu_0\left(\exp(u(\sigma_i^1\sigma_i^2 - q))\right) = \exp(-qu)(\mathrm{ch}u + q\mathrm{sh}u).$$

c) Udowodnij, że dla $q \ge 0$ mamy

$$(\mathrm{ch}u + q\mathrm{sh}u)\exp(-qu) \le \exp(u^2/2).$$

d) Udowodnij, że dla $u \in \mathbb{R}$ mamy

$$\nu_0\left(\exp(Nu(R_{1,2}-q))\right) \le \exp(Nu^2/2).$$

e) Udowodnij, że jeśli g jest gaussowska o średniej 0 i $\mathbb{E}g^2 = \tau^2$, $2a\tau^2 < 1$, to dla każdego b mamy

$$\mathbb{E}\exp(ag^2+bg) = \frac{1}{\sqrt{1-2a\tau^2}}\exp\left(\frac{\tau^2 b^2}{2(1-2a\tau^2)}\right).$$

f) Rozważ zmienną gaussowską u o wariancji $2\lambda/N$ i uzyskaj tezę.

Zadanie 7. (M) Niech $\beta < 1/2$ i $2s < 1 - 4\beta^2$. Udowodnij, że

$$\nu_1\left(\exp(sN(R_{1,2}-q)^2)\right)\right) \le \frac{1}{\sqrt{1-2s-4\beta^2}},$$

gdzie q jest rozwiązaniem równania $q = \mathbb{E}\mathrm{th}^2(\beta z\sqrt{q}+h)$.

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria IX

Zadanie 1. (M) Niech

$$H_N(\sigma) = -\frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} g_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i, \quad p_N(\beta, h) = \frac{1}{N}\mathbb{E}\ln Z_N,$$

gdzie (h_i) są niezależnymi gaussowskimi zmiennymi losowymi o tym samym rozkładzie (niekoniecznie symetrycznymi). Udowodnij, że

$$\mathbb{E}\Big|\frac{1}{N}\ln Z_N(\beta, h) - p_N(\beta, h)\Big|^k \leq KN^{-k/2}$$

i stała K pozostaje ograniczona, gdy β i $Var(h)$ są ograniczone.

Zadanie 2. (M) Niech $a(k) = \mathbb{E}g^k$, gdzie g jest standardową zmienną gaussowską i niech

$$b = \mathbb{E}(\ln \mathrm{ch} Y)^2 - (\mathbb{E}\ln \mathrm{ch} Y)^2 - \frac{\beta^2 q^2}{2},$$

gdzie $Y = \beta z\sqrt{q} + h$. Udowodnij, że przy założeniach poprzedniego zadania dla $\beta < 1/2$ i $k \geq 1$ mamy

$$\Big|\mathbb{E}\left(\frac{1}{N}\ln Z_N(\beta, h) - SK(\beta, h)\right)^k - \frac{1}{N^{k/2}}a(k)b^{k/2}\Big| \leq \frac{K}{N^{(k+1)/2}},$$

gdzie K nie zależy od N.

Constructions of Nonequilibrium Statistical Mechanics

Piotr Nayar, Seria X

Zadanie 1. (M) Udowodnij, że dla $p \geq 1$ i $0 \leq q \leq 1$ mamy

$$\mathbb{E}(\langle \sigma_1 \cdot \ldots \cdot \sigma_p \rangle - \langle \sigma_1 \rangle \ldots \langle \sigma_p \rangle)^2 \leq K(p)\nu((R_{1,2} - q)^2).$$

W tym celu:
a) Zaobserwuj, że wystarczy udowodnić krok indukcyjny

$$\mathbb{E}(\langle \sigma_1 \cdot \ldots \cdot \sigma_p \rangle - \langle \sigma_1 \cdot \ldots \cdot \sigma_{p-1} \rangle \langle \sigma_p \rangle)^2 \leq K(p)\nu((R_{1,2} - q)^2).$$

b) Wprowadźmy oznaczenie $\dot{\sigma}_i = \sigma_i - \langle \sigma_i \rangle$. Pokaż, że

$$\mathbb{E}(\langle \sigma_1 \cdot \ldots \cdot \sigma_p \rangle - \langle \sigma_1 \cdot \ldots \cdot \sigma_{p-1} \rangle \langle \sigma_p \rangle)^2 = \nu(\sigma_1^1 \sigma_1^2 \ldots \sigma_{p-1}^1 \sigma_{p-1}^2 \dot{\sigma}_p^1 \dot{\sigma}_p^2).$$

c) Wykorzystując symetrię między spinami udowodnij, że

$$N(N-1)\ldots(N-p+1)\nu(\sigma_1^1\sigma_1^2 \ldots \sigma_{p-1}^1 \sigma_{p-1}^2 \dot{\sigma}_p^1 \dot{\sigma}_p^2)$$
$$\leq \sum_{i_1,\ldots,i_p} \nu(\sigma_{i_1}^1 \sigma_{i_1}^2 \sigma_{i_2}^1 \sigma_{i_2}^2 \ldots \sigma_{i_{p-1}}^1 \sigma_{i_{p-1}}^2 \dot{\sigma}_{i_p}^1 \dot{\sigma}_{i_p}^2) = N^p \nu\left((R_{1,2}^{p-1} - q^{p-1}) \frac{\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{1}} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{2}}}{N} \right).$$

d) Udowodnij, że

$$\nu\left((R_{1,2}^{p-1} - q^{p-1}) \frac{\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{1}} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{2}}}{N} \right) \leq (p-1)\nu((R_{1,2} - q)^2)^{1/2} \nu\left(\left(\frac{\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{1}} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{2}}}{N} \right)^2 \right)^{1/2}.$$

e) Pokaż, że

$$\left\langle \left(\frac{\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{1}} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathbf{2}}}{N} \right)^2 \right\rangle \leq \left\langle \left(\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{1}} - \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{3}}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{2}} - \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{4}})}{N} \right)^2 \right\rangle \leq 4\langle (R_{1,2} - q)^2 \rangle.$$

Wywnioskuj tezę.

Zadanie 2. (M) Niech $\beta < 1/2$. Niech G_N będzie miarą Gibbsa generowaną przez standardowy gaussowski losowy Hamiltonian $\mathcal{H}_N$. Niech $G_{N,n}$ będzie rozkładem wektora $(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$ względem G_N. Niech $\mu_n(\eta) = 2^{-n} \prod_{i \leq n} (1 + \eta_i \langle \sigma_i \rangle)$. Wówczas μ_n i $G_{N,n}$ są losowymi miarami na $\{-1, 1\}^n$. Udowodnij, że

$$\mathbb{E}\|G_{N,n} - \mu_n\|^2 \leq \frac{K(n)}{N},$$

gdzie $\|\cdot\|$ jest całkowitą wariacją miary.

Wskazówka. Rozważ zbiór $A_\eta = \{\sigma \in \Sigma_N \mid i \leq n, \sigma_i = \eta_i\}$. Niech $\sigma_I = \prod_{i\in I} \sigma_i$ i $\eta_I = \prod_{i\in I} \eta_i$. Pokaż, że

$$\mathrm{I}_A(\sigma) = 2^{-n} \prod_{i\leq n} (1 + \sigma_i \eta_i) = 2^{-n} \sum_{I\subset\{1,\ldots,n\}} \sigma_I \eta_I.$$

Zaobserwuj, że $G_{N,n}(\{\eta\}) = G_N(A_\eta) = \langle \mathrm{I}_A \rangle$ i udowodnij nierówność

$$(G_{N,n}(\{\eta\}) - \mu_n(\{\eta\}))^2 \leq 2^{-n} \sum_{I\subset\{1,\ldots,n\}} (\langle \sigma_I \rangle - \prod_{i\in I} \langle \sigma_i \rangle)^2.$$

Korzystając z równości

$$\|G_{N,n} - \mu_n\| = \sum_\eta |G_{N,n}(\{\eta\}) - \mu_n(\{\eta\})|,$$

wywnioskuj tezę.