

科目コード／科目名 (Course Code / Course Title)	CB114／物理学特別講義 1 (Special Lecture in Physics 1)		
テーマ／サブタイトル等 (Theme / Subtitle)	統計力学の基礎と応用に関する解析的・数値的側面		
担当者名 (Instructor)	山中 雅則(YAMANAKA MASANORI)		
学期 (Semester)	秋学期(Fall Semester)	単位 (Credit)	2単位(2 Credits)
科目ナンバリング (Course Number)	PHY3910	言語 (Language)	日本語 (Japanese)
備考 (Notes)			

#### 授業の目標(Course Objectives)

統計力学の基礎である統計集団と統計平均(期待値)について具体的な模型(二準位系, 調和振動子系, 理想気体)を例として, それらの分配関数や期待値の計算ができるようにする.

We can calculate a partition function and the expectation, which is a foundation of statistical mechanics, as a case with a concrete model (two-level system, harmonic oscillator system, ideal gas) using statistical ensemble.

#### 授業の内容(Course Contents)

統計力学は, 確率・統計の考え方をを用いることにより, 微視的な法則から巨視的な物理量を計算し実験を説明する学問である. 前半はこの方法論の基礎を, カノニカル集団を中心として, 具体的には二準位系, 調和振動子, 理想気体について分配関数や期待値の計算を基礎から省略する事なく解説する. 統計力学1・2の再履修者が統計力学1・2の単位を取得できるような補習授業として, 極めて初等的な内容から解説する. 後半ではイジング模型やゲージ模型を用いて解析的・数値的に取り扱うことにより基礎から応用までを体系的に解説する. 統計力学の考え方はさまざまな分野へ適用することができるが, それら応用例において統計力学の方法論がどのように用いられるか解説を行う. 例えば, 生物物理学への応用においてはDNA分子コンピューティングアルゴリズムと蛋白質の分子動力学の主成分分析, グラフ理論への応用においては四色問題等の染色問題や条件充足問題の解を固有状態として持つ統計力学系に関して解説を行う. また, これらに付随して計算量・NP困難性・PCの主メモリサイズなどの計算を実際に行う場合に現実に直面する諸問題についても解説を行う.

Statistical mechanics is the study of calculating macroscopic physical quantities from microscopic laws and explaining experiments by using the concept of probability and statistics. In the first half, the basics of this methodology are explained, focusing on canonical ensemble, and in particular for two-level systems, harmonic oscillators, and ideal gases, without omitting the calculations of partition functions and expected values from the basics. We will explain from the extremely basic contents so that those who re-take statistical mechanics 1 and 2 will understand. In the second half, we will systematically explain basics to applications by analytically and numerically treating them using Ising model and gauge model. Though the concept of statistical mechanics can be applied to various fields, we explain how the methodology of statistical mechanics is used in these applications. For example, in applications to biophysics, principal component analysis of DNA molecular computing algorithms and molecular dynamics of proteins, and in applications to graph theory, solutions of staining problems such as four-color problems and condition satisfaction problems are taken as eigenstates We explain about the statistical dynamics system we have. In addition, we will explain the problems that will actually be encountered when actually performing calculations such as computational complexity, NP difficulty, and main memory size of a PC.

#### 授業計画(Course Schedule)

1. 統計力学の必要性, 統計力学の基礎, 確率と統計の基礎, 離散・連続確率変数, 確率密度関数
2. マクスウェル分布に従う古典的理想気体, ガウス積分, 多変数の確率密度関数
3. 正準集団と確率分布・統計平均, 相対確率, 確率の規格化, 分配関数と期待値, 期待値としての物理量
4. 正準集団による二準位系の取り扱い, 二準位系と分配関数の計算, エネルギー期待値, エネルギー期待値の高温・低温極限, 比熱, 比熱の高温・低温極限
5. 分配関数と期待値, 分配関数の性質, 分配関数の合成
6. 正準集団による調和振動子系の取り扱い, 調和振動子系と分配関数の計算, エネルギー期待値, エネルギー期待値の高温・低温極限, 比熱, 比熱の高温・低温極限, エネルギー等分配の法則
7. 正準集団による理想気体の取り扱い1, 同種粒子とフェルミ粒子・ボース粒子, 理想気体と分配関数の計算, エネルギー期待値, シュレーディンガー方程式(井戸型ポテンシャル)
8. 正準集団による理想気体の取り扱い2, 1次元理想気体, 理想気体と分配関数の計算, エネルギー期待値, ヘルムホルツの自由エネルギー
9. 正準集団による理想気体の取り扱い3, 3次元理想気体, エネルギー期待値の高温・低温極限, 比熱, 比熱の高温・低温極限, エネルギー等分配の法則
10. イジング模型
11. 格子ゲージ模型

12. グラフ理論の基礎とNP困難性、ラムゼー数とラムゼー理論
13. モンテカルロ法, メトロポリス法
14. 蛋白質の分子動力学と主成分分析, ランダム行列理論と経済物理学

授業時間外(予習・復習等)の学習 (Study Required Outside of Class)

「量子力学 1・2」と「統計力学 1・2」の講義の復習を行うこと, また, 前の時間に板書した内容の計算を実際にノートで演習しておくことで準備学習とする。

成績評価方法・基準 (Evaluation)

毎回の講義で課されるレポート(100%)

テキスト(Textbooks)

なし

参考文献 (Readings)

1. 長岡洋介、1994、『統計力学』、岩波書店 (ISBN:4000079271)  
統計力学1・2のいずれかの再履修者は、参考文献1を購入して通読し、基礎事項を理解すること。参考文献の内容については授業以外の内容であっても質問等の対応を行う。

その他(HP等) (Others(e.g.HP))

注意事項 (Notice)