

令和7年度 大学院 理学研究科 入学試験

物質科学専攻 専門科目

情報第1問の解答例

出題意図：行列、ベクトルおよびフーリエ変換の諸性質を理解し、適切に計算および使用できるかを問う。

問1

(1) 固有値を λ 、固有ベクトルを $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T$ とする。

特性方程式は

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = -(\lambda+1)(\lambda-1)(\lambda-2) = 0$$

となるので、固有値は $-1, 1, 2$ 。

$\lambda = -1$ のときは連立方程式

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

に従うので、規格化した固有ベクトルは $\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{6}}(1, -2, 1)^T$ 。

$\lambda = 1$ のときは連立方程式

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

に従うので、規格化した固有ベクトルは $\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 0, -1)^T$ 。

$\lambda = 2$ のときは連立方程式

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

に従うので、規格化した固有ベクトルは $\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, 1)^T$ 。

(2) (1)から行列 A を対角化する直交行列 P は固有ベクトルを順番に並べて

$$P = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \\ -2/\sqrt{6} & 0 & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{6}}{6} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & \sqrt{2} \\ -2 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{3} & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

となり、その逆行列は

$$P^{-1} = \frac{\sqrt{6}}{6} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

となる。

よって、

$$P^{-1}AP = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & \sqrt{2} \\ -2 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{3} & \sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

したがって、 A^n の各成分は

$$\begin{aligned} A^n &= P(P^{-1}AP)^nP^{-1} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & \sqrt{2} \\ -2 & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{3} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (-1)^n & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} (-1)^n & \sqrt{3} & 2^n\sqrt{2} \\ -2(-1)^n & 0 & 2^n\sqrt{2} \\ (-1)^n & -\sqrt{3} & 2^n\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} (-1)^n + 3 + 2^{n+1} & -2(-1)^n + 2^{n+1} & (-1)^n - 3 + 2^{n+1} \\ -2(-1)^n + 2^{n+1} & 4(-1)^n + 2^{n+1} & -2(-1)^n + 2^{n+1} \\ (-1)^n - 3 + 2^{n+1} & -2(-1)^n + 2^{n+1} & (-1)^n + 3 + 2^{n+1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。

問2

(1)

$$\text{grad } \frac{1}{r} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{r}, \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{r}, \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{r} \right) = \left(-\frac{x}{r^3}, -\frac{y}{r^3}, -\frac{z}{r^3} \right) = -\frac{\mathbf{r}}{r^3}$$

(2)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{V} &= \frac{\partial}{\partial x}(\sin x) + \frac{\partial}{\partial y}(zx) + \frac{\partial}{\partial z}(z \cos x) = 2 \cos x \\ \nabla \times \mathbf{V} &= \left(\frac{\partial}{\partial y}(z \cos x) - \frac{\partial}{\partial z}(xz), \frac{\partial}{\partial z}(\sin x) - \frac{\partial}{\partial x}(z \cos x), \frac{\partial}{\partial x}(zx) - \frac{\partial}{\partial y}(\sin x) \right) \\ &= (-x, z \sin x, z) \end{aligned}$$

(3) ガウスの定理より、

$$\iiint \nabla \cdot \mathbf{V} dx dy dz = \iint \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} d\sigma$$

ここで積分は原点を中心とした半径 a の球面上であり、 $d\sigma$ は面要素、 $\mathbf{n}$ はその面要素に対する外向きの法線ベクトルとする。

原点を中心とした極座標系 (r, θ, ϕ) を考えると、半径 a の球面上では、

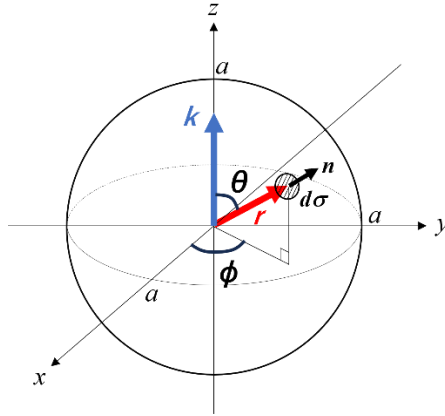
$$d\sigma = a^2 \sin \theta d\theta d\phi, \quad \mathbf{n} = \mathbf{r}/a, \quad \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} = a^2$$

なので、

$$\iint \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d\sigma = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (a^2 \mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r}/a) a^2 \sin \theta d\theta d\phi = a^5 [-\cos \theta]_0^\pi [\phi]_0^{2\pi} = 4\pi a^5$$

問 3

- (1) 極座標系で考え、 $\mathbf{k}$ を下図のような配置にする。被積分関数が $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}$ の内積のみに依存するため、このような配置でも一般性は失われない。



このとき、

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \theta, \quad dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi,$$

となるので、

$$\begin{aligned} \hat{f}(\mathbf{k}) &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(r) e^{-ikr \cos \theta} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int_0^\infty f(r) r^2 \left[\frac{e^{-ikr \cos \theta}}{ikr} \right]_0^\pi [\phi]_0^{2\pi} dr \\ &= 2\pi \int_0^\infty f(r) r^2 \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} dr = 2\pi \int_0^\infty f(r) r^2 \frac{2i \sin(kr)}{ikr} dr \\ &= \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r \sin(kr) f(r) dr \end{aligned}$$

- (2) 部分積分を繰り返して、

$$\begin{aligned}
\hat{f}(\mathbf{k}) &= \frac{4\pi}{k} \int_0^\sigma r \sin(kr) (\alpha + \beta r) dr \\
&= \frac{4\pi\alpha}{k} \left\{ \left[-\frac{r \cos(kr)}{k} \right]_0^\sigma + \frac{1}{k} \int_0^\sigma \cos(kr) dr \right\} \\
&\quad + \frac{4\pi\beta}{k} \left\{ \left[-\frac{r^2 \cos(kr)}{k} \right]_0^\sigma + \frac{2}{k} \int_0^\sigma r \cos(kr) dr \right\} \\
&= \frac{4\pi\alpha}{k} \left\{ -\frac{\sigma}{k} \cos(k\sigma) + \frac{1}{k^2} \sin(k\sigma) \right\} \\
&\quad + \frac{4\pi\beta}{k} \left\{ -\frac{\sigma^2}{k} \cos(k\sigma) + \frac{2}{k} \left[\frac{r \sin(kr)}{k} \right]_0^\sigma - \frac{2}{k^2} \int_0^\sigma \sin(kr) dr \right\} \\
&= \frac{4\pi\alpha}{k} \left\{ -\frac{\sigma}{k} \cos(k\sigma) + \frac{1}{k^2} \sin(k\sigma) \right\} \\
&\quad + \frac{4\pi\beta}{k} \left\{ -\frac{\sigma^2}{k} \cos(k\sigma) + \frac{2\sigma}{k^2} \sin(k\sigma) + \frac{2}{k^3} \cos(k\sigma) - \frac{2}{k^3} \right\} \\
&= \frac{4\pi}{k^4} (-\alpha\sigma k^2 - \beta\sigma^2 k^2 + 2\beta) \cos(k\sigma) + \frac{4\pi}{k^3} (\alpha + 2\beta\sigma) \sin(k\sigma) - \frac{8\pi\beta}{k^4}
\end{aligned}$$

情報第2問の解答例

出題意図：ガウス分布の諸性質および条件付きの極値問題を理解し、適切に計算および使用できるかを問う。

問1

出題意図：ガウス分布の諸性質を理解し、適切に計算および使用できるかを問う。

$$\begin{aligned} D_{KL}(p \parallel q) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln \left\{ \frac{\sqrt{2\pi\sigma^2}}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp \left[-\frac{(x-m)^2}{2s^2} + \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right] \right\} dx \\ &= -\ln\left(\frac{\sigma}{s}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \left\{ -\frac{(x-m)^2}{2s^2} + \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right\} dx \\ &= -\ln\left(\frac{\sigma}{s}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx + \left(\frac{1}{2s^2} - \frac{1}{2\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x^2 dx \\ &\quad - \left(\frac{m}{s^2} - \frac{\mu}{\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x dx + \left(\frac{m^2}{2s^2} - \frac{\mu^2}{2\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx \end{aligned}$$

$p(x)$ は平均 μ 、分散 σ^2 のガウス分布なので、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x dx = \mu, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x^2 dx = \sigma^2 + \mu^2$$

これらを代入すると、

$$\begin{aligned} D_{KL}(p \parallel q) &= -\ln\left(\frac{\sigma}{s}\right) + \left(\frac{1}{2s^2} - \frac{1}{2\sigma^2}\right) (\sigma^2 + \mu^2) - \left(\frac{m}{s^2} - \frac{\mu}{\sigma^2}\right) \mu + \left(\frac{m^2}{2s^2} - \frac{\mu^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= -\ln\left(\frac{\sigma}{s}\right) + \frac{\sigma^2 + (\mu - m)^2}{2s^2} - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

問2

$$\begin{aligned} f(\sigma) &= -\ln\left(\frac{\sigma}{s}\right) + \frac{\sigma^2}{s^2} - \frac{1}{2}, \\ g(\mu) &= \frac{(\mu - m)^2}{2s^2} \end{aligned}$$

とすると、 $D_{KL}(p \parallel q) = f(\sigma) + g(\mu)$ のように σ と μ の関数に分離できるため、それぞれの

関数の性質を調べればよい。

$\frac{df}{d\sigma} = -\frac{1}{\sigma} + \frac{\sigma}{s^2} = 0$ となるのは $\sigma = s$ のときで、そのとき $f(s) = 0$ となる。

$\frac{d^2f}{d\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{s^2} > 0$ より、 $f(\sigma)$ は $\sigma = s$ で最小値を取る下に凸な関数であることがわかる。

したがって、 $f(\sigma) \geq 0$ 。

$g(\mu)$ は μ の二次関数で、 $\mu = m$ のときに最小値 $g(m) = 0$ となる。

したがって、 $g(\mu) \geq 0$ 。

以上より、 $D_{KL}(p \parallel q) = f(\sigma) + g(\mu) \geq 0$ であり、 $D_{KL}(p \parallel q) = 0$ となるのは、 $\sigma = s, \mu = m$ のときである。

(つまり、 $p(x)$ と $q(x)$ が同じ分布のときに $D_{KL}(p \parallel q) = 0$ となる。)

問 3

$$x = m + s\tilde{x}, \quad dx = s d\tilde{x}$$

なので、

$$\begin{aligned} q(x)dx &= \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right] dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left[-\frac{s^2\tilde{x}^2}{2s^2}\right] s d\tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\tilde{x}^2}{2}\right] d\tilde{x} \\ &= \tilde{q}(\tilde{x}) d\tilde{x} \end{aligned}$$

よって、

$$\tilde{q}(\tilde{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\tilde{x}^2}{2}\right].$$

同様にして、

$$p(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(s\tilde{x} + m - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] s d\tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\left(\frac{\sigma}{s}\right)^2}} \exp\left[-\frac{\left(\tilde{x} - \frac{\mu - m}{s}\right)^2}{2\left(\frac{\sigma}{s}\right)^2}\right] d\tilde{x} = \tilde{p}(\tilde{x}) d\tilde{x}$$

より、

$$\tilde{p}(\tilde{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\left(\frac{\sigma}{s}\right)^2}} \exp\left[-\frac{\left(\tilde{x} - \frac{\mu - m}{s}\right)^2}{2\left(\frac{\sigma}{s}\right)^2}\right].$$

$D_{KL}(\tilde{p} \parallel \tilde{q})$ に代入すると、

$$\begin{aligned}
D_{KL}(\tilde{p} \parallel \tilde{q}) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{p}(\tilde{x}) \ln \left\{ \frac{\sqrt{2\pi} \left(\frac{\sigma}{s}\right)^2}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{\tilde{x}^2}{2} + \frac{\left(\tilde{x} - \frac{\mu-m}{s}\right)^2}{2\left(\frac{\sigma}{s}\right)^2} \right] \right\} d\tilde{x} \\
&= - \ln \left(\frac{\sigma}{s}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(\tilde{x}) d\tilde{x} - \int_{-\infty}^{+\infty} p(\tilde{x}) \left\{ -\frac{\tilde{x}^2}{2} + \frac{\left(\tilde{x} - \frac{\mu-m}{s}\right)^2}{2\left(\frac{\sigma}{s}\right)^2} \right\} d\tilde{x} \\
&= - \ln \left(\frac{\sigma}{s}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx + \frac{\sigma^2 - s^2}{2\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x^2 dx \\
&\quad + \left(\frac{s}{\sigma}\right)^2 \frac{\mu-m}{s} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x dx - \frac{(\mu-m)^2}{2\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx
\end{aligned}$$

となり、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x dx = \frac{\mu-m}{s}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x^2 dx = \left(\frac{\sigma}{s}\right)^2 + \left(\frac{\mu-m}{s}\right)^2$$

なので、

$$\begin{aligned}
D_{KL}(\tilde{p} \parallel \tilde{q}) &= - \ln \left(\frac{\sigma}{s}\right) + \frac{\sigma^2 - s^2}{2\sigma^2} \left\{ \left(\frac{\sigma}{s}\right)^2 + \left(\frac{\mu-m}{s}\right)^2 \right\} + \left(\frac{s}{\sigma}\right)^2 \frac{\mu-m}{s} \frac{\mu-m}{s} - \frac{(\mu-m)^2}{2\sigma^2} \\
&= - \ln \left(\frac{\sigma}{s}\right) + \frac{\sigma^2 + (\mu-m)^2}{2s^2} - \frac{1}{2} = D_{KL}(p \parallel q)
\end{aligned}$$

問4

ラグランジュの未定乗数法を用いる。

未定乗数を λ とすると、

$$h(\sigma, \mu, \lambda) = -\ln \sigma + \frac{\sigma^2}{2} + \frac{\mu^2}{2} - \frac{1}{2} + \lambda \left((\mu-1)^2 + (\sigma-1)^2 - \frac{1}{4} \right)$$

の極値を求めればよい。

$$\frac{\partial h}{\partial \sigma} = -\frac{1}{\sigma} + \sigma + 2\lambda(\sigma-1) = 0$$

より、 $\sigma = 1, -\frac{1}{2\lambda+1}$ となる。

以下で場合分けして計算していく。

$\sigma = 1$ のとき

条件より、 $(\mu-1)^2 = \frac{1}{4}$ なので、 $\mu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ となる。

$\mu = \frac{1}{2}$ のときは $D_{KL}(p \parallel q) = \frac{1}{8}$ 、 $\mu = \frac{3}{2}$ のときは $D_{KL}(p \parallel q) = \frac{9}{8}$ となる。

$\sigma = -\frac{1}{2\lambda+1}$ のとき

$$\frac{\partial h}{\partial \mu} = \mu + 2\lambda(\mu - 1) = 0$$

より、 $\mu = \frac{2\lambda}{2\lambda+1}$ となる。

σ と μ を条件式に代入すると、

$$\left(\frac{2\lambda}{2\lambda+1} - 1\right)^2 + \left(-\frac{1}{2\lambda+1} - 1\right)^2 = \frac{1}{4}$$

変形すると、

$$12\lambda^2 + 28\lambda + 19 = 0$$

となるが、

$$12\lambda^2 + 28\lambda + 19 = 12\left(\lambda + \frac{7}{6}\right)^2 + \frac{8}{3} > 0$$

なので、この式を満たす実数の λ は存在しない。

以上より、 $\mu = \frac{1}{2}, \sigma = 1$ のときに最小値 $D_{KL}(p \parallel q) = \frac{1}{8}$ となる。