統計力学AⅡ

2011/10/13

統計力学とは

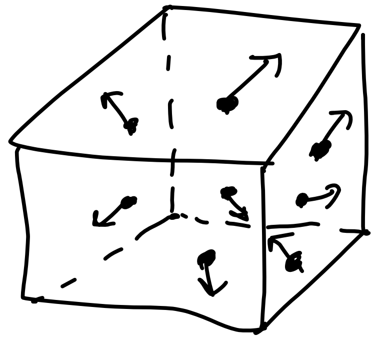
- 力学状態 $\Gamma = (\mathbf{r}_1, \dots \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N}$
- ハミルトニアン

  $H(\Gamma)$

  $H(\Gamma; L)$ パラメータ依存性
- エネルギー面

  $H(\Gamma) = E$

???



$H(\Gamma)$

つなぐ

$S(U,V)$

- 熱力学状態 (U, V)
- エントロピー $S(U,V)$

統計力学の"道具"

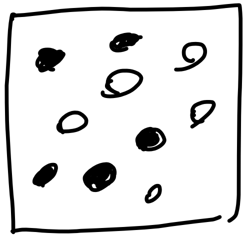
- 巨大な数の操作
  - ▶ 事件は"指数関数の肩"でおこる.
- 確率の導入
  - ▶ 力学 ⇄ "確率" ⇄ 熱力学

~Intermission~

例：N個のコイン投げ

σ_i :
$$\sigma_i = \begin{cases} 1 & \text{i番目のコインが表 ●} \\ -1 & \text{i番目のコインがウラ ○} \end{cases}$$

N=10の例



ミクロ

$\Updownarrow$

$$m = \frac{\text{●の数} - \text{○の数}}{N}$$

マクロ

- $\Gamma \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N) \in \{1, -1\}^N$

  ミクロな状態

- $m \equiv \dfrac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i$

  マクロな状態　$-1 \leq m \leq 1$

$\Downarrow$

ミクロな法則とマクロな法則？

ミクロな法則とマクロな法則

ミクロ

各コイン：表がでる確率とウラがでる確率が等しい。

$$P(\sigma_i = +1) = P(\sigma_i = -1) = \frac{1}{2}$$

マクロ

m は"大体0"である。

「$N \to \infty$ で $m \to 0$」(?)

実験の立場：
- 精度を指定
- その精度の範囲で0

ミクロからマクロを導びく

$P(m)$: $\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$ が m という値になる確率

・'確率変数'と'値'の記号の縮退

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i = \frac{N_+ - N_-}{N}$$

N_+ : コインが表の数

N_- : コインがウラの数

$$P(m) = \frac{1}{2^N}\cdot\frac{N!}{N_+!\,N_-!}$$

$$\begin{cases} N_+ + N_- = N \\ N_+ - N_- = Nm \end{cases}$$

⇩

$$N_+ = \frac{N(1+m)}{2},\quad N_- = \frac{N(1-m)}{2}$$

スターリングの公式

$$\log N! = N\log N - N + o(N)$$

・$\sqrt{N}$
・$\log N$

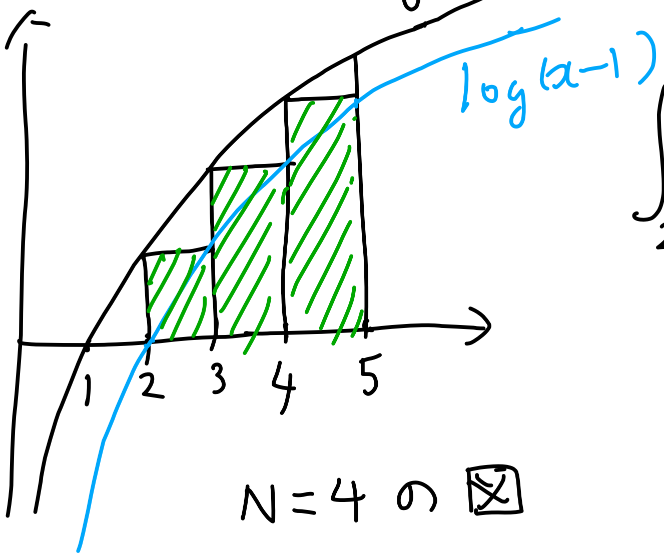
small-o

$$f(N) = g(N) + o(N)$$

$$\Longleftrightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{|f(N) - g(N)|}{N} = 0$$

(証明)

$$\sum_{k=1}^{N} \log k$$



N=4の図

$$\int_2^{N+1} dx \log(x-1) < \log N! < \int_1^{N+1} dx \log x$$

$$\int^N dx \log x = N\log N - N + \text{const}$$

P(m)の計算

$$P(m) = \frac{1}{2^N} \cdot \frac{N!}{N_+! N_-!}$$

$$N_+ = \frac{N(1+m)}{2}$$

$$N_- = \frac{N(1-m)}{2}$$

$$\log P(m) = \log N! - \log \frac{N(1+m)}{2}! - \log \frac{N(1-m)}{2}! - N\log 2$$

$$= N\log N - N + o(N)$$

$$- \frac{N(1+m)}{2}\log\frac{N(1+m)}{2} + \frac{N(1+m)}{2} + o(N)$$

$$- \frac{N(1-m)}{2}\log\frac{N(1-m)}{2} + \frac{N(1-m)}{2} + o(N) - N\log 2$$

キャンセル

$$= \left[N - \frac{N(1+m)}{2} - \frac{N(1-m)}{2}\right]\log N$$

$$- N\left[\frac{1+m}{2}\log\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\log\frac{1-m}{2} + \log 2\right] + o(N)$$

$$= -N\frac{1}{2}\left[(1+m)\log(1+m) + (1-m)\log(1-m)\right] + o(N)$$

P(m) の表現

$$\log P(m) = -N\frac{1}{2}\left[(1+m)\log(1+m)+(1-m)\log(1-m)\right] + o(N)$$

$$P(m) = e^{-\underline{N}\,I(m) + \underline{o(N)}}$$

N に依存しない

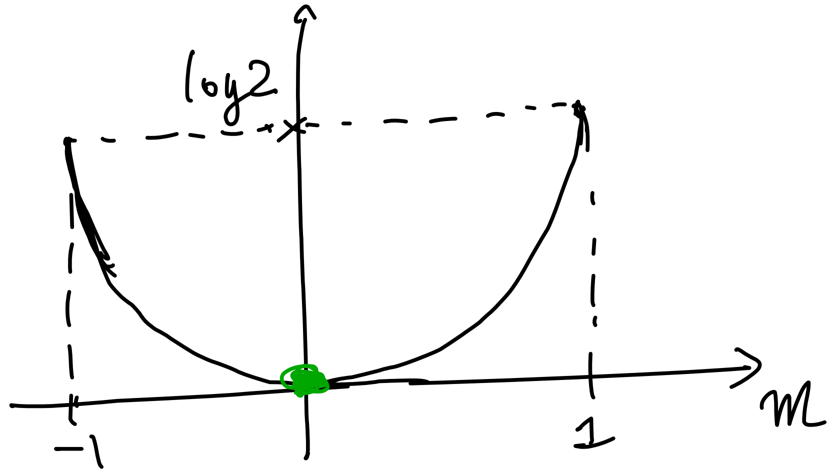
$$I(m) = \frac{1}{2}\left[(1+m)\log(1+m)+(1-m)\log(1-m)\right]$$

e.g

$|m| > 0.01$

となる確率は

N とともに指数関数的に小さい。



$I(m) \geq 0$

$\underline{I(m_*) = 0 \quad m_* = 0}$

$$\boxed{\forall \varepsilon > 0 \quad \lim_{N\to\infty} P(|m| > \varepsilon) = 0}$$

$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$ は 0 に"確率的に"収束する

～Intermission～

力学に確率を導入

例：1次元ばね

力学の問題

$$\begin{cases} \dot{x} = \dfrac{p}{m} \\ \dot{p} = -kx \end{cases} \qquad \begin{cases} x(0) = x_0 \\ p(0) = p_0 \end{cases} \Rightarrow \text{解 } (x(t), p(t))$$

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

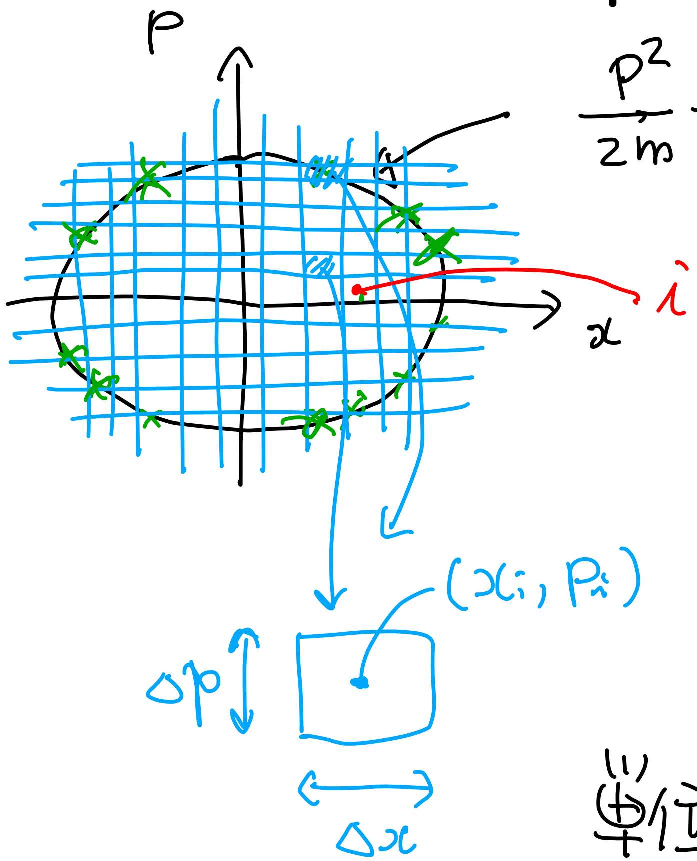
▷ (x_0, p_0) 知らない

$\Longrightarrow$ 時刻 t_1 をランダムに選んで測定する

$$\Rightarrow \begin{cases} (x(t_1), p(t_1)) & (\text{私}) \\ (x(t_2), p(t_2)) & (\text{あなた}) \\ \vdots & (\ \vdots\ ) \end{cases}$$

N個のデータ

データを整理する



$$\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}x^2=E$$

・測定点をプロットする *

・方眼紙をあてて
頻度を数える

方眼紙の目
のラヴェル

$\Rightarrow n(x_i, p_i)$

$$\sum_i n(x_i, p_i) = N$$

・割合 $n(x_i, p_i)/N$

単位面積あたりの出現割合

$$\lim_{\Delta x, \Delta p \to 0} \lim_{N\to\infty} \frac{n(x, p)}{N \Delta x \Delta p} \equiv \rho(x, p)$$

上から zero に近づける

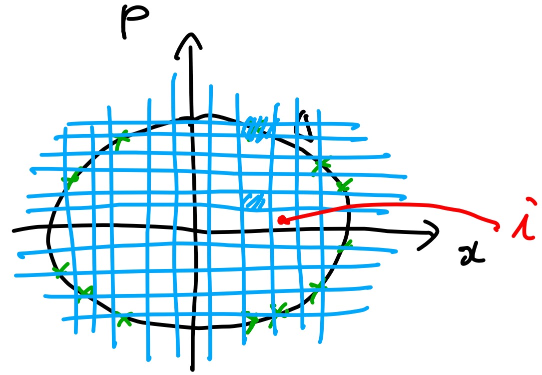
def する

確率密度

確率密度 $\rho(x,p)$ の決定

- $\int dx\,dp\,\rho(x,p) = 1$

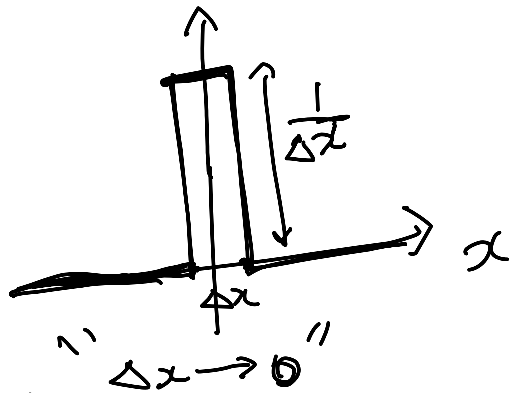
- $\rho(x,p) = \text{const}$ in $(x,p) \in \overbrace{H(x,p)=E}^{\text{エネルギー面}}$



$$\Rightarrow \boxed{\rho(x,p) = \frac{\delta(H(x,p)-E)}{\Sigma(E)}}$$

規格化因子

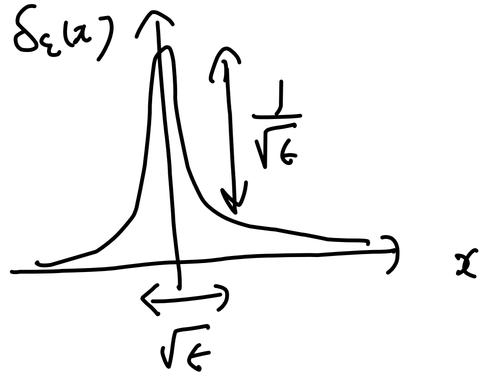
δ-関数



$$\int dx\,dp\,\rho(x,p) = \frac{1}{\Sigma(E)} \int dx\,dp\,\delta(H(x,p)-E) = 1$$

$$\Rightarrow \Sigma(E) = \int dx\,dp\,\delta(H(x,p)-E)$$

デルタ関数



▶ $\delta_\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon}}$

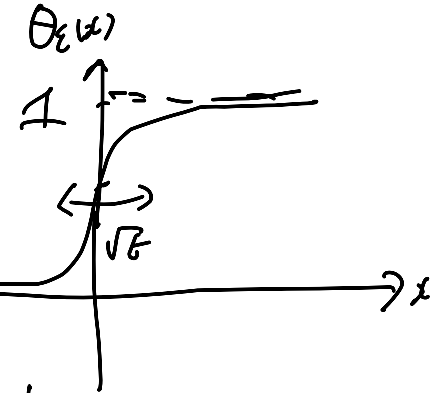
$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to0}\delta_\varepsilon(x)$

$\Updownarrow$

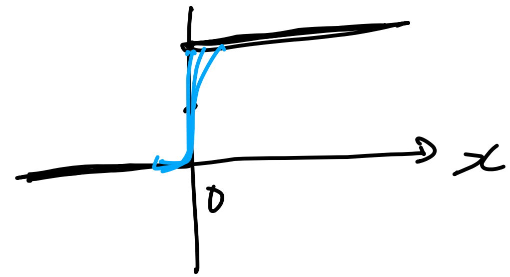
$\lim_{\varepsilon\to0}\int dx\, \delta_\varepsilon(x) f(x) = f(0)$

$\int dx\, \delta(x) f(x) = f(0)$

▷ $\Theta_\varepsilon(x) \equiv \int_{-\infty}^{x} dy\, \delta_\varepsilon(y)$



$\downarrow \varepsilon\to0$



$$\Theta(x) = \begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0 \\ \frac{1}{2} & x=0\end{cases}$$

$$\delta_\varepsilon(x) = \frac{d}{dx}\Theta_\varepsilon(x) \Longrightarrow \boxed{\delta(x) = \frac{d}{dx}\Theta(x)}$$

$\Sigma(E)$の計算

$\delta(x) = \delta(-x)$

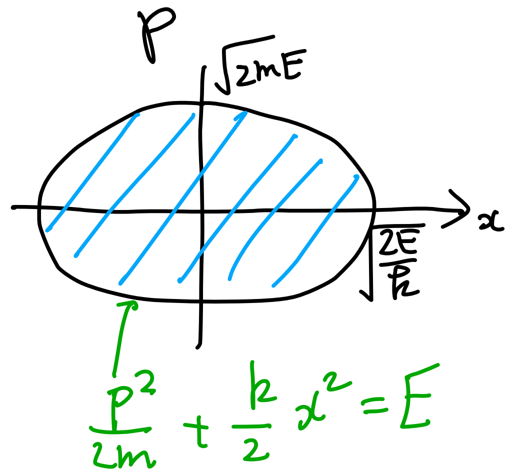
$$\Sigma(E) = \int dx\,dp\ \delta(E - H(x,p))$$

$$= \frac{d}{dE}\int dx\,dp\ \underline{\theta(E - H(x,p))}$$

$$= \frac{d}{dE}\int_{\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}x^2 \le E} dx\,dp$$

$$= \frac{d}{dE}\left(\pi\ 2E\sqrt{\frac{m}{k}}\right)$$

$$= 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$$



$$\therefore\quad \rho(x,p) = \frac{\delta(H(x,p) - E)}{2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}}$$

補足：直接計算

$$\Sigma(E) = \int dx\,dp\,\delta(H(p)-E)$$

$$= -\frac{d}{dE}\int dx\,dp\,\theta(H(p)-E)$$

$$= -\frac{d}{dE}\left\{\int_{H(p)\geq E} dx\,dp\right\}$$

$$= -\frac{d}{dE}\left\{\underbrace{\int dx\,dp}_{\infty\text{だけど定数}} - \int_{H(p)\leq E} dx\,dp\right\}$$

$$= \frac{d}{dE}\int_{H(p)\leq E} dx\,dp$$

~ Intermission ~

まとめ

▷ 巨大な数を扱う"例"

$$P(m) = e^{-N\underset{\sim}{I(m)} + o(N)}$$

事件は指数の肩で生じる

▷ 力学に確率を導入する"例"

$$\rho(x,p) = \frac{\delta(H(x,p)-E)}{\Sigma(E)}$$

⇨ 多数の粒子の力学へ

（次回）

レポート

1) 多数の硬貨を投げて、πを測定せよ。

2) スターリングの公式の証明を仕上げよ。