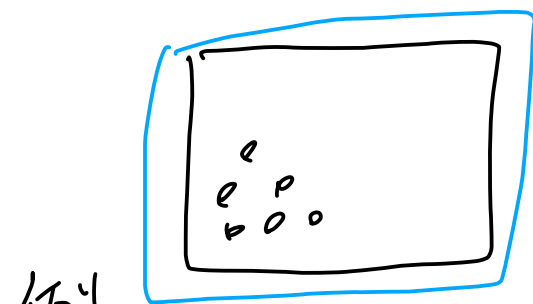


統計力学 A II

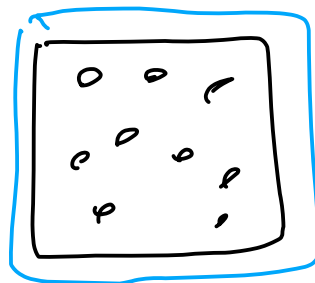
23 / 10 / 10

§ 問題



15%
左下にたま
ま、という

十分に
時間が
たつ



"平衡状態"

・ 孤立古典力学系

・ $H(\Gamma; V, N)$

・ $\Gamma = (r_1, \dots, r_N, p_1, \dots, p_N) \in \mathbb{R}^{6N}$

↑ 図

運動方程式

前回の講義

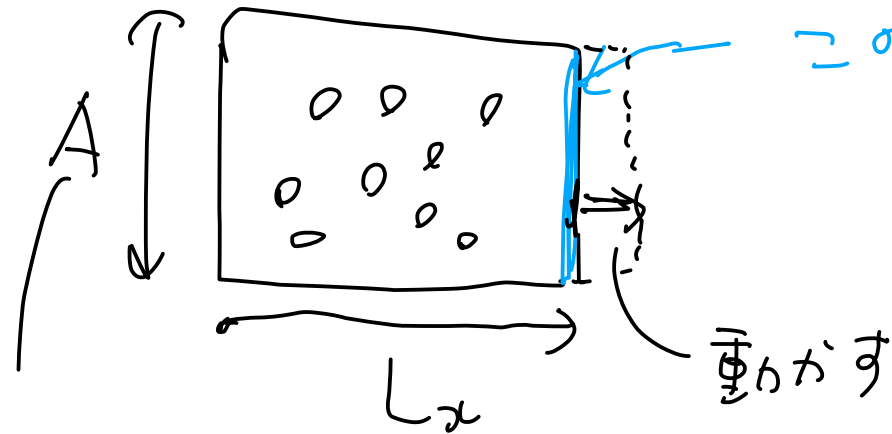
$H(\Gamma; V, N) = E$
エネルギー保存

$$\begin{cases} \frac{dr_i}{dt} = \frac{\partial H(\Gamma; V, N)}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial H(\Gamma; V, N)}{\partial r_i} \end{cases}$$

解 $\Gamma_0 \mapsto \Gamma_t$
↑ 初期条件

問: 平衡状態における 圧力
を 古典力学 から 決める

§ 圧力 $p(\Gamma)$



断面積 $V = AL_x$

$$\Delta V = A \Delta L_x$$

$$\Rightarrow V = V(t)$$

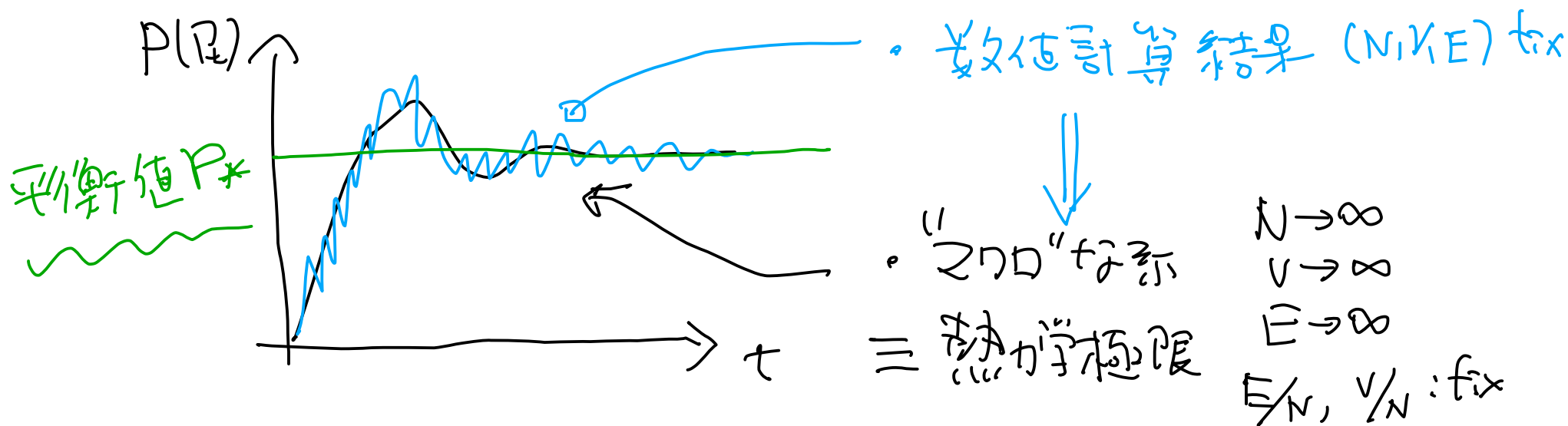
注意: $H(\Gamma; V, N)$
には $V_{\text{wall}}(r_i; V)$
が含まれている。

$$\begin{aligned} E(\tau) - E(0) &= \int_0^\tau dt \frac{dH(\Gamma_t; V(t), N)}{dt} \\ &= \int_0^\tau dt \dot{V} \frac{\partial H(\Gamma_t; V, N)}{\partial V} \Big|_{V=V(t)} \\ &= - \int_0^\tau dt \dot{V} \underbrace{p(\Gamma_t; V, N)}_{\text{def} = \text{圧}} \end{aligned}$$

$$p(\Gamma; V, N) \equiv - \frac{\partial H(\Gamma; V, N)}{\partial V}$$

$$H(\Gamma; V, N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} V_{\text{int}}(|r_i - r_j|) + \sum_{i=1}^N \underbrace{V_{\text{wall}}(r_i; V)}$$

§ 時間変化の様子



平衡値 P^* と関数 P_t の関係

$$P^* = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt P(\Gamma_t) \quad \left(\begin{array}{l} \text{“ゼロ”系} \\ \text{にだけ} \end{array} \right)$$

★ Γ_t の詳細は必要ない。

長時間平均が分かれば、平衡値が分かる
 (まだ力学世界にいる)

§ 転換

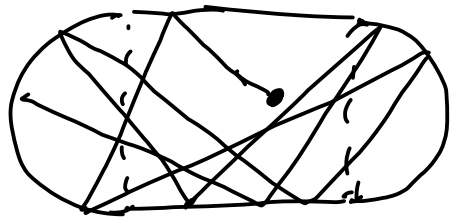
$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \, p(\Gamma_t) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \, p(\Gamma_t) \int d\Gamma \, \delta(\Gamma - \Gamma_t) \\ &= \int d\Gamma \, p(\Gamma) \left[\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \, \delta(\Gamma - \Gamma_t) \right] \\ &= \int d\Gamma \, p(\Gamma) \bar{P}(\Gamma)\end{aligned}$$

- $\bar{P}(\Gamma)$: 確率密度, $\int d\Gamma \bar{P}(\Gamma) = 1$. (経路平均分布とも呼ばれる)
相空間上の
(Γ のあたり)
- Γ_0 に依存する

まだ 力学世界にいるが、相空間上の積分
で しか ない

§ 1例

2次元1粒子ビリヤード系 $\Gamma = (V, P)$



D : ビリヤード内部

$|D| = V$

- 解 P_t は作図できる
(ほとんど全ての P に対して)
- $\frac{|P|^2}{2m} = E, \quad V \in D$ となる (V, P) .

の途には必ず通過する。

- エネルギー面上を "コンパクト" 運動させる

$$\Rightarrow \bar{P}(\Gamma) = \frac{\delta\left(\frac{|P|^2}{2m} - E\right) \chi(V \in D)}{\sum (E, V) \propto}$$

$$\chi(\cdot) = \begin{cases} 1 & \text{if } \cdot \text{ true} \\ 0 & \text{if } \cdot \text{ false} \end{cases}$$

- ① エネルギー面に「穴」があかない
& $\bar{P}(P_t)$ が t に依存しない

規格化定数

$$\int dP \bar{P}(\Gamma) = 1$$

おし決まる。

§ 一般化

“エネルギー面上をうまく運動する” みたい”

$$\bar{P}(P) = \frac{\delta(H(P; V, N) - E)}{\Sigma(E, V, N)} \quad \text{が” ほとんど”}$$

全ての P に対して成り立つ。

運動方程式の解を明示的に使っていない。

≡ 力の平均分布

$$\rho_{EVN}^{mc}(P) \equiv \frac{\delta(H(P; V, N) - E)}{\Sigma(E, V, N)}$$

§ 正確な表現

- エネルギー面上をくまなく運動する

≡ 「 エネルギー面 $X = \{p \mid H(p; V, N) = E\}$
の部分集合 A に対して、その時間発展
 $A_t \equiv \{p_t \mid p_0 \in A\}$ が不変 ($\forall t, A_t = A$) とせよ。
このとき、 A は エネルギー面全体、あるいは
 A の $(6N-1)$ 次元体積が O 」

エルゴード性

§ 等重率の原理

圧力の平衡値 P_* $= \int d\Gamma p(\Gamma) \rho_{E,V,N}^{mc}(\Gamma)$

$$= - \int d\Gamma \underbrace{\frac{\partial H(\Gamma; V, N)}{\partial V} \frac{\delta(H(\Gamma; V, N) - E)}{\Sigma(E, V, N)}}_{\text{高次元空間の積分}}$$

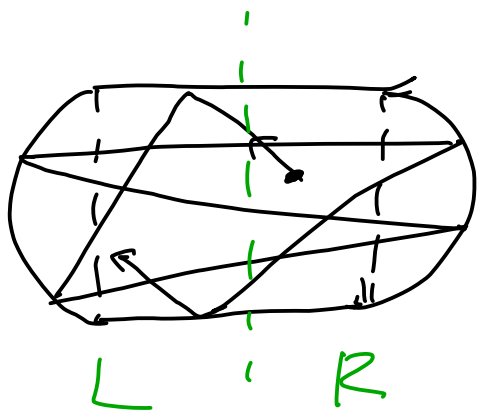
一般に、孤立系における
熱力学量 $O(\Gamma)$ の平衡状態の値 O_* :

$$O_* = \int d\Gamma O(\Gamma) \rho_{E,V,N}^{mc}(\Gamma) \quad \text{と与えられる。}$$

積分は果て!!

§ カオス

例: 2次元, 1粒子, スタジアム, 完全反射壁



運動の軌跡: 作図できる

L L R L R L ...

(衝突点が L か R を記録)

初期条件 (x_0) が決まれば, 決まる

命題: ほとんど全ての初期条件に対して

L と R の系列は "ランダム" である。

正確に定義するには, "数学" の言葉が必要

補足: 確率密度,

1 変数 x 場合: $x \in \mathbb{R}^+$ に対し

・ 正の値をとる確率変数 X が $[0, x]$ に値をとる確率 $P(x)$

$$P(0)=0; \quad P(\infty)=1$$

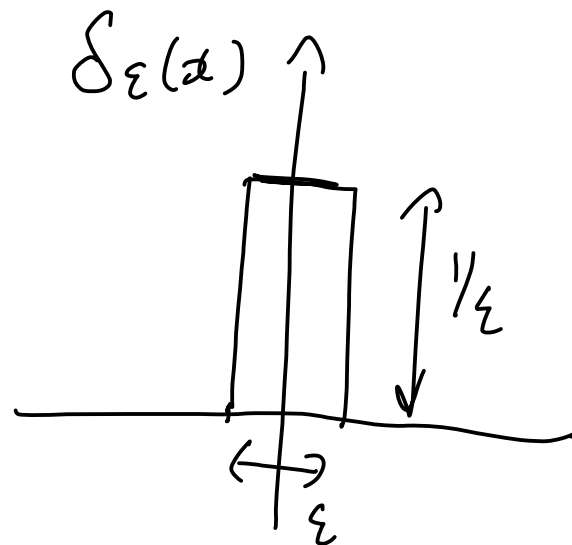
$$p(x) \equiv \frac{dP(x)}{dx}; \quad \int_0^{\infty} dx p(x) = 1$$

$$\rightarrow [x, x + \underbrace{dx}_{\text{small}}] \text{ に値をとる確率 } p(x)dx$$

⇒ 高次元に一般化

$\underbrace{f(\Gamma) d\Gamma}_{\text{6N次元付随要素}}$: 確率

补充: 7.1.1 19.5 节

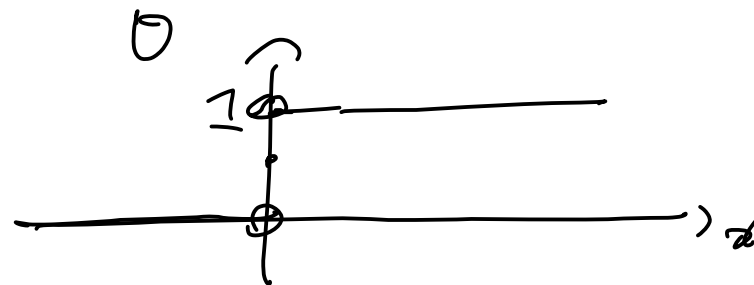
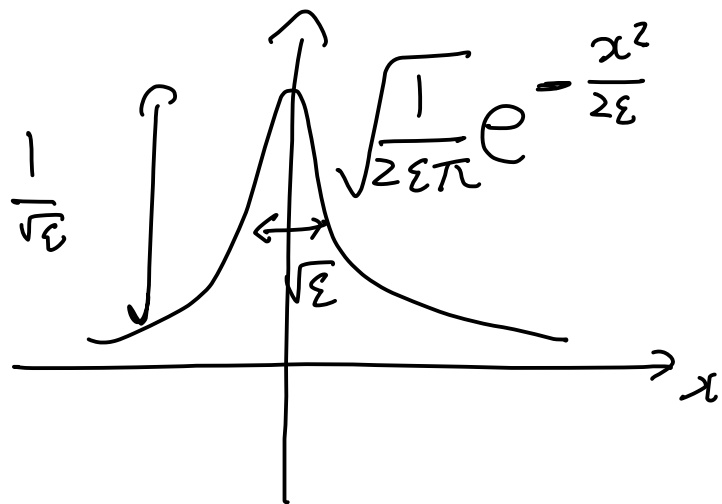


$$\delta_\epsilon(x) \rightarrow \delta(x) \quad \epsilon \rightarrow 0$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dx f(x) \delta_\epsilon(x) = \int dx f(x) \delta(x)$$

$f(0)$

$$\delta(x) = \frac{d}{dx} \theta(x)$$



$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$$

$$\delta(f(x)) = \frac{\delta(x - x_*)}{|f'(x_*)|}$$

$f(x_*) = 0$
unique $\nearrow$