統計物理学 1 演習　　No.3　　97/10/23

1. ラグランジュ未定乗数法を用いて以下の問いに答えよ。

(1) 系が W 個の状態の内 j 番目の状態をとる確率を f_j とするとき、エントロピー

$$S = -\sum_{j=1}^{W} f_j \log f_j$$

を最大にする f_j を求めよ。$\sum_j^W f_j = 1$ を拘束条件にすること。

(2) (1) の問題において、状態 j のエネルギーを E_j とし、$\sum_j^W E_j f_j = E$ も拘束条件であるとすると、エントロピーを最大化する f_j はどうなるか。

(3) (2) の問題において、状態 j にある粒子数を N_j とし、$\sum_j^W N_j f_j = N$ も拘束条件であるとすると、エントロピーを最大化する f_j はどうなるか。

(4) 確率変数を x、確率密度関数を $f(x)$ とする。拘束条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x = 1$$

および

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x)\mathrm{d}x = \sigma^2$$

の下で、エントロピー

$$S = -\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\log f(x)\mathrm{d}x$$

を最大化する $f(x)$ はどのようなものか。

(5) 気体分子の速度が v_x, v_y, v_z と $v_x+\mathrm{d}v_x, v_y+\mathrm{d}v_y, v_z+\mathrm{d}v_z$ の間にある確率を $f(v_x, v_y, v_z)\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z$ としよう。このとき、エントロピー

$$S = -\int\int\int f\log f\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z$$

を最大化する $f(x)$ を定めよ。拘束条件は

$$N = \int\int\int f\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z$$

と

$$E = \int\int\int \frac{m}{2}(v_x^2+v_y^2+v_z^2) f\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z,$$

である。

2. 非常に多くの粒子からなる閉じた系を考える。さらに、この系の部分系を考える。この部分系も十分多数の粒子からなるとする。この部分系もほとんど閉じていると考えてよい。この部分系を長時間にわたって非常に多くの時刻 $t_1, t_2, \cdots$ に観測する。それぞれの時刻において部分系の状態はその系の位相空間の点で表される。これらの点の分布確率は、分布関数 $\rho(q_1, q_2, \cdots, p_1, p_2, \cdots)$ で表される。ただし、q_i, p_i は部分系に含まれる粒子の座標と運動量である。以下、簡単のため $\rho(q,p)$ と書く。今、$t_1, t_2, \cdots$ での観測の代わりに、考えている部分系の多くのコピーを (仮想的に) 用意して、ある時刻にこれらを観測すると考える。このとき、それぞれの部分系の状態はやはり $\rho(q,p)$ にしたがって分布する。

(1) この位相空間内に多くの点が$\rho(q,p)$にしたがって分布している状況の時間発展を考える。これは$2s$次元 ($s=3n$、nは部分系に含まれる粒子の数) の (位相) 空間内の密度$\rho(q,p)$の流体の流れと見なせる。連続の方程式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{s}\left[\frac{\partial}{\partial q_i}(\rho\dot{q}_i)+\frac{\partial}{\partial p_i}(\rho\dot{p}_i)\right]=0$$

を導け。

(2) いま、ρはあからさまには時間に依らないから定常流と見なせる。このことと運動方程式 (ハミルトン方程式) を用いて、分布関数は位相空間の軌道に沿って不変であること、つまり

$$\frac{d\rho}{dt}=0$$

を示せ。これをリウヴィル (Liouville) の定理という。

(3) リウヴィルの定理よりρは保存量でなければならない。そればかりではなく$\ln\rho$が相加的な保存量であることを示せ。(ヒント： 2 つの部分系を考えてそれらを合わせることを考えよ。)

(4) いま、全系を箱の中にいれてあるとする。このとき、a 番目の部分系に対して、

$$\ln\rho_a=\alpha_a+\beta E_a(q,p) \tag{1}$$

と書けることを示せ。ただし、α_a,βは定数である。

(5) 2.2 で見たように、巨視的な系に対して巨視的な物理量のゆらぎは極めて小さい ($\sim 1/\sqrt{n}$)。したがって、いま考えている部分系の$\rho(E)$は $E=\bar{E}$ ($\bar{x}=\langle x\rangle$ は x の平均値) のところに鋭いピークを持っていて、そのごく近くでのみ有意な値を持つ。今、

$$\rho(\bar{E})\Delta q\Delta p=1$$

によって位相空間の微小体積$\Delta q\Delta p$を定義すると、これはエネルギーのゆらぎΔEに対応していて、部分系は大部分の時間をこの位相空間の微小な領域で過ごす。(あるいは上で考えた部分系の仮想的なコピーのほとんどがこの領域内の状態にあるといってもよい。) もし系の状態が (量子論の場合のように) 離散的であるならば、$\Delta q\Delta p$はΔEの範囲にある部分系の状態の数に対応している。エントロピーを

$$S=\ln\Delta q\Delta p$$

によって定義する。長さの単位を $1/c$ 倍するとエントロピーはどう変化するか。また、エントロピーの差についてはどうか。

(6) 式 (1) を用いて、

$$S=-\int\rho\ln\rho\,dqdp$$

となることを示せ。すなわち、上のエントロピーの定義は 1. の定義と一致する。

(7) 全系を k 個の部分系に分け、a 番目の部分系のエントロピーを S_aとする。全系のエントロピーをS_aで表せ。