情報統計力学
第6＆7回

2006年　前期
伊庭幸人

根本的な疑問1　一応おしまい

物理の基本法則
(ニュートン力学，量子力学) との関係は？

決定論的なニュートン力学から確率の出てくる仕組みは一体何か？　なぜ十分統計量が保存量になるのか？　その条件は？

なぜ基準となる測度は $\prod_i dx_i\, dp_i$ か？

根本的な疑問2　今日からこちら

「定常状態」といっているが，どういう状態か．
熱力学でいう平衡状態
⇒ 統計力学の内部での特徴付けは？

$$p(x,p) \propto \exp(-\beta E(x,p))$$

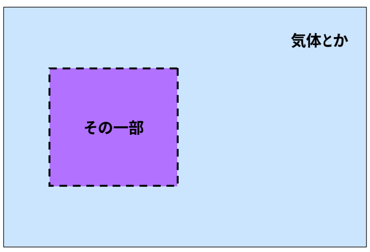
というが，エネルギーは保存量だから一定では
そもそも，どういう系を記述しているのか？

放射性物質が崩壊するのは？

- 「崩壊」してもエネルギーは同じ
- 「エネルギーの低いほうに進む」という自然法則はない

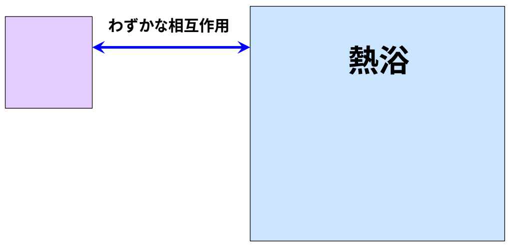
等確率の仮定 ⇒ 場合の数の多くなるほうに進む，と解釈できる

熱平衡状態のモデル化(1)

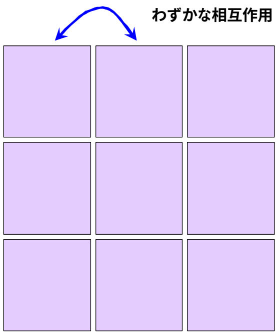


熱平衡状態のモデル化(2)

このモデルを用いる



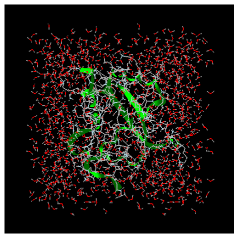
熱平衡状態のモデル化(3)

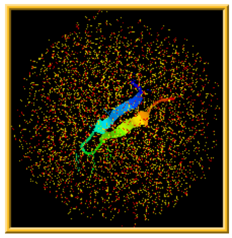


「鉄の塊」とかだともっともらしい

タンパク1分子＋水　だと？

水の中のタンパク（シミュレーション）





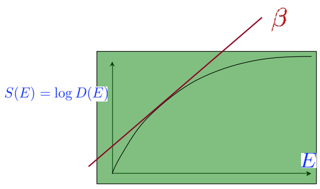
どこまでが「熱浴」なのかははっきりしない

熱浴

$E \sim E + dE \quad D(E)dE$

$S(E) = \log D(E)$

$$\beta = \frac{dS(E)}{dE} = \frac{1}{D(E)}\frac{dD(E)}{dE}$$



熱浴の性質（仮定）

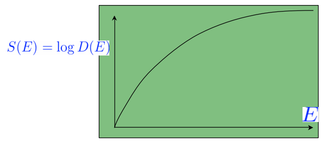
エネルギーが　$E \sim E + dE \quad D(E)dE$

↑状態密度

$S(E) = \log D(E)$

1) 上に凸　（独立な小部分からなる）

2) [問題の範囲が] 直線で近似できる（でかい）



熱浴の例（1）

多数の2準位系

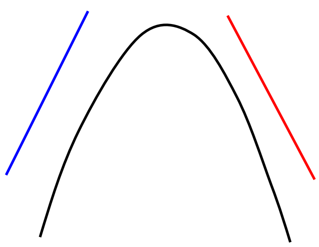
$$E = m, \quad p = m/N$$

$$D(E) = \frac{N!}{(N-m)!m!}$$

$$\log D(E) = -N\{p \log p + (1-p)\log(1-p)\}$$

$$\beta = \frac{dS(E)}{dE} = \log\frac{1-p}{p} \qquad p = \frac{\exp(-\beta)}{1+\exp(-\beta)}$$

グラフ



負温度

熱浴の例 (2)

理想気体

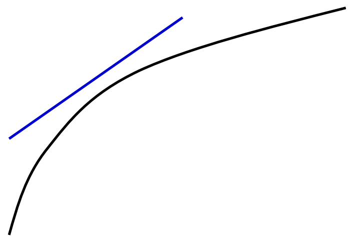
$$E = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \;:\; p_i \text{ momentum}$$

$$D(E)dE \sim E^{\frac{N}{2}-1} dE$$

$$S(E) = \log D(E) = \left(\frac{N}{2} - 1\right) \log E$$

$$\frac{dS(E)}{dE} = \frac{N/2 - 1}{E} = \beta \qquad \frac{1}{2} k_{\mathrm{B}} T \sim \frac{E}{N}$$

グラフ



カノニカル分布の導出

x_b 熱浴　　x_1 部分系　　(x, p) をxとする

$$p(x_1, x_b) dx_1 dx_b \propto \delta(E - E_1(x_1) - E_b(x_b)) dx_1 dx_b$$

$$p(x_1) dx_1 \propto \left\{ \int \delta(E - E_1(x_1) - E_b(x_b)) dx_b \right\} dx_1$$

$$p_1(x_1) \propto D_b(E - E_1(x_1))$$

続き

$$\log p_1(x_1) \propto \log D_b(E - E_1(x_1))$$

$$\log p_1(x_1) = \text{const.} + S_b(E - E_1(x_1))$$

$$\log p_1(x_1) \simeq \text{const.} - \frac{\partial S_b}{\partial E} E_1(x_1)$$

$$\log p_1(x_1) \simeq \text{const.} - \beta E_1(x_1)$$

$$p_1(x_1) \propto \exp(-\beta E_1(x_1))$$

部分系も連続的な状態密度を持つと仮定

$$P(E_1) dE_1 \propto \exp(-\beta E_1) D_1(E_1) dE_1$$

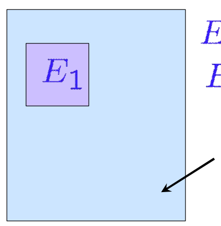
$$E_1 \sim E_1 + dE_1 \qquad D(E_1)$$

$$S_1(E_1) = \log D_1(E_1)$$

$$P(E_1) = \exp(-\beta E_1 + S_1(E_1))$$

熱浴はでかい

$$P(x) \propto \exp(-\beta E_1(x))$$



E_1 部分系のエネルギー

E_1 が変わる範囲は熱浴からみれば微小

βは熱浴の性質とエネルギーで決まる

熱浴は銀行である

E_1　借金

$\exp(-\beta E_1)$　場合の数の低下

E_1　エネルギー

βE_1「エントロピー」

↑利子？

交換可能

部分系も大きいとすると

$$P(E_1) = \exp(-\beta E_1 + S_1(E_1))$$

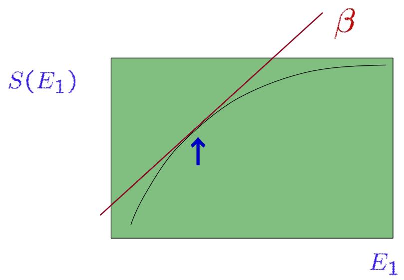
$$E_1 = O(N), \quad S_1 = O(N)$$

鞍点

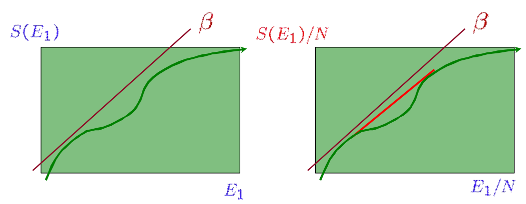
$$\frac{d}{dE_1}\{\beta E_1 - S_1(E_1)\} = 0$$

$$\frac{dS_1(E_1)}{dE_1} = \beta$$

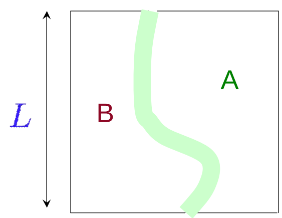
部分系の状態密度も上に凸



凸性がない場合　相共存



界面の効果



L^{d-1}/L^d

独立性と状態密度の凸性

$$D_{n+m}(E_1+E_2) \geq D_n(E_1)\,D_m(E_2)$$

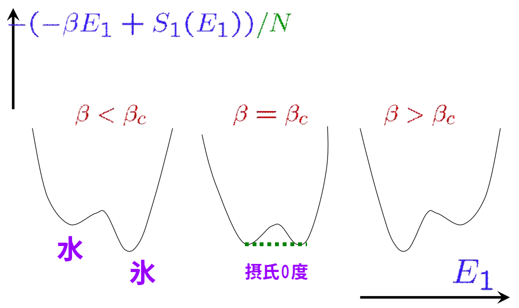
$$\log D_{n+m}(E_1+E_2) \geq \log D_n(E_1) + \log D_m(E_2)$$

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\log D_n(nE)}{n} \to \mathbb{S}(E) \qquad \tilde{E}_1 = E_1/n,\ \tilde{E}_2 = E_2/m$$

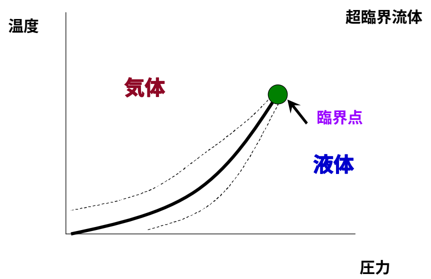
↑仮定

$$\mathbb{S}\left(\frac{n}{n+m}\tilde{E}_1 + \frac{m}{n+m}\tilde{E}_2\right) \geq \frac{n}{n+m}\mathbb{S}(\tilde{E}_1) + \frac{m}{n+m}\mathbb{S}(\tilde{E}_2)$$

「自由エネルギー」



2次転移



2次転移の「自由エネルギー」