シミュレーションと統計力学

2016年2月

Cabri研究会

生越　茂樹

§ 1. Life game

基本形(消費税型, 破産者なし)

6人でテーブルを囲み, 6m 枚 ($m \geq 5$)のチップ(金貨)をランダムに分配します. 次に各人に１～６の番号を割り振り, 2つのサイコロ A, B を振って, Aと同じ数字の人は Bと同じ数字の人にチップを一枚渡します. これを 非常に大きい回数 繰り返すと各人のチップの枚数はどうなるでしょうか？ 但し 途中でチップが 0 枚になった人にサイコロAの目が当たった場合は, チップの移動は無いが 試行回数には入れるとします.

ゲーム後のチップの枚数のバラつきについて 1つ選んでください.
(ア) 各人の差が大きくなる
(イ) 各人の差が小さくなる
(ウ) 各人の差は全体としては変わらない

Lifegame.ggb

Lifegame.nb

基本形(消費税型，破産者なし)のシミュレーション結果

1. チップを分配した時は，バラつきは比較的小さい（正規分布）
2. やり取りを始めると，バラつきは大きくなり 0 枚の人も現れる.
   [およそm^2回後，mは1人当たりのチップの枚数]
3. さらに時間が経つと，全員が0枚を経験し，全体の分布は指数分布.
   [$n(E) \propto Exp(-\beta E)$, n は人数, E はチップの枚数]
4. さらに経つと，全員が最高枚数も経験し，各人の分布も指数分布.
   [$t(E) \propto Exp(-\beta E)$, t は回数, E はチップの枚数]
5. 最後に 全ての分配状態が同じ回数現れる. (等重率の原理)

【結論】平等なルールで試合をしても，破産者もお金持ちも出る. しかし長い時間で見れば，全員が破産とお金持ちを経験する. さらに時間が経てば，各人ともお金持ちの期間や破産している期間も同じになる. そして，お金持ちの期間は非常に短く，平均以上の期間でさえ，全体の$1/e$ ≒0.367 しかない. (平均のk 倍以上の期間は全体の $1/e^k$)

孤立系に於ける古典的粒子のシミュレーション

十分多い数の古典的粒子が，2つずつ衝突しエネルギーを交換する時，
そのエネルギー分布は Maxwell-Boltzman 分布になる

「破産した場合は相互作用の回数に入れない」などのルール変更があった場合でも，個数（人数)が多い場合は，やはりMaxwell-Boltzman 分布になる.

Maxwell-Boltzman.nb

§2.小正準集合の要素の数え上げ (前回の内容)

統計力学における集合

小正準集合 (micro canonical ensemble)
-孤立系. エネルギーが一定な微視状態の集合.

正準集合 (canonical ensemble)
-熱浴に接していて, 温度が一定な系の集合.

大正準集合 (grand canonical ensemble)
-熱浴, 粒子源と接し, 温度, μ が一定な系の集合.

先験的等重率の原理 (principle of equal a priori probabilities)
-同じエネルギーを持つ微視状態は 全て同じ確率で起こる-
(小正準集合の要素は 全て同じ確率で現れる)

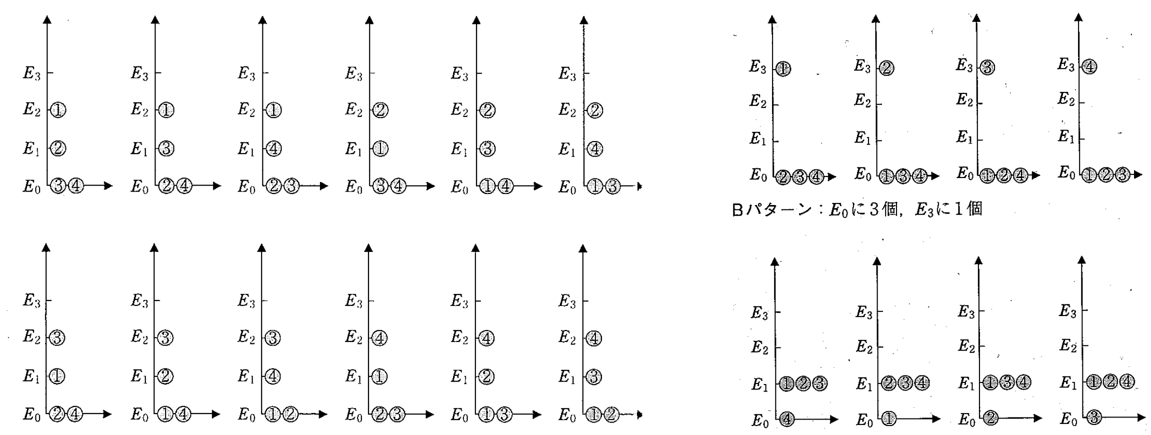
§ 2-1.「Maxwell-Boltzman 統計」の微視状態

$$\begin{cases}\text{違うエネルギー状態にある分子を入れ替え} \rightarrow \text{異なる微視状態}\\ \text{同じエネルギー状態にある分子の入れ替え} \rightarrow \text{同じ微視状態}\end{cases}$$

というルールで微視状態の数を数える.

例えば, 全エネルギー $E=3$, 全粒子数 $N=4$ のとき，微視状態の数は

$$\underbrace{\frac{4!}{2!1!1!}}_{\text{Aパターン}} + \underbrace{\frac{4!}{3!1!}}_{\text{Bパターン}} + \underbrace{\frac{4!}{3!1!}}_{\text{Cパターン}} = 12+4+4=20 \ \left(={}_4H_3\right)$$



Aパターン：E_0に2個，E_1に1個，E_2に1個

Bパターン：E_0に3個，E_3に1個

Cパターン：E_0に1個，E_1に3個

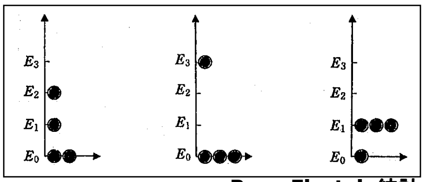
§ 2-2.「Bose-Einstein 統計」の微視状態

$$\left\{\begin{array}{l}\text{粒子は区別できない.}\\ \text{同一の量子状態に無数の粒子が入れる.}\end{array}\right.$$

というルールで微視状態の数を数える.

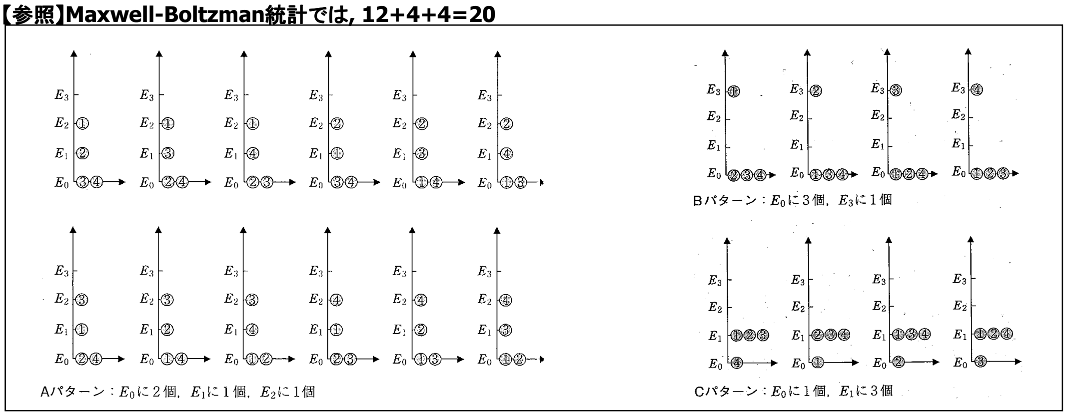
例えば, 全エネルギー $E=3$, 全粒子数 $N=4$
のとき，微視状態の数は

$$1 + 1 + 1 = 3$$



Bose-Einstein統計

【参照】Maxwell-Boltzman統計では, 12+4+4=20

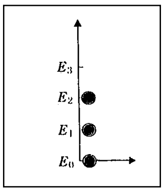


§ 2-3.「Fermi-Dirac 統計」の微視状態

$\left\{\begin{array}{l}\text{粒子は区別できない.}\\ \text{同一の量子状態には 1 個の粒子しか入れない.}\end{array}\right.$

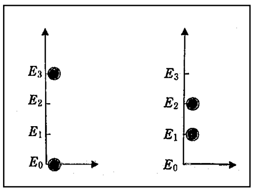
というルールで微視状態の数を数える.

(例1) 全エネルギー $E=3$, 全粒子数 $N=3$
のとき，微視状態の数は　1

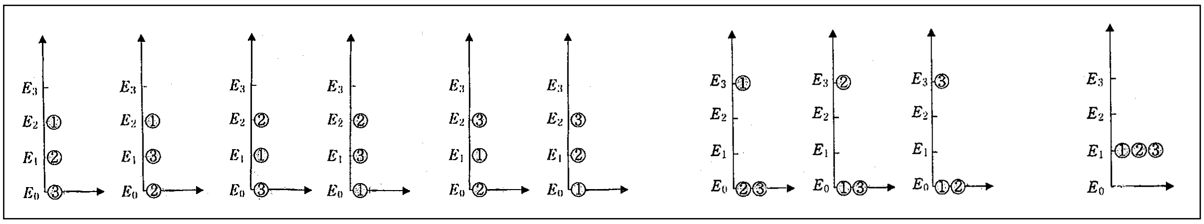


$\left(\begin{array}{l}\text{MB統計では, 微視状態の数は } 6+3+1=10 \text{ 個}\\ \text{BE統計では, 微視状態の数は } 1+1+1=3 \text{ 個}\end{array}\right)$

(例2) 全エネルギー $E=3$, 全粒子数 $N=2$
のとき，微視状態の数は　2



【参照】(例1)のMaxwell-Boltzman統計



§2-4. 分布関数 (distribution function)

「**大正準集合**」を利用すると，Maxwell-Boltzman(MB), Bose-Einstein(BE), Fermi-Dirac(FD) 統計における粒子数の分布は, 次の様になる.(注) 即ち,

T = 一定の時，エネルギー準位が e の 1 つの状態にある粒子の数 $f(e)$ は

$$\boxed{f(e) = \begin{cases} \dfrac{N}{\Xi} e^{-\beta(e-\mu)} \propto e^{-\beta e} & \text{(MB統計)} \\[2ex] \dfrac{1}{e^{\beta(e-\mu)}-1} = \dfrac{1}{Ce^{\beta e}-1} & \text{(BE統計)} \\[2ex] \dfrac{1}{e^{\beta(e-\mu)}+1} = \dfrac{1}{Ce^{\beta e}+1} & \text{(FD統計)} \end{cases}}$$

$$\left(\begin{array}{l} T \text{ は温度, } N \text{ は総粒子数, } \Xi \text{ は 大分配関数, } \beta = \dfrac{1}{k_B T} (k_B \text{はボルツマン定数}) \\ C = e^{-\beta\mu}, \quad \mu = (\text{化学ポテンシャル}) \equiv \left(\dfrac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V \text{ 一定}} = \left(\dfrac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V \text{ 一定}} = \dfrac{G}{N} \end{array} \right)$$

【注】通常は大正準集合を使って証明されるが，縮重度 >>1 の場合は 小正準集合を利用しても証明できる.（ 広島大の先生による証明.pdf ）しかし，縮重度 =1 の場合は難しそう.