

# 情報科学概論 レポート課題

## 問題 2. 2 準位有限系のエントロピーと温度の数値計算

### 課題の目的

プログラミングスキルは、物理学分野においても、今後多くの学生にとって不可欠な能力となると考えられる。効率的な数値計算の実行、厳密解が得られない問題に対する近似解の導出、可視化を通じた現象理解、さらには多次元データの相関解析など、プログラミングは多様な場面で有用である。どのような場面で、どのように計算手法を選択し、結果を解釈・活用するかは、学生自身の理解力と応用力が問われる点である。

本課題では、統計力学的なモデルを題材として、数値計算および可視化といった情報科学的手法を Python により実装し、その結果をもとに物理的考察を行う。

### 問題設定

独立な  $N$  個の粒子からなる系を考える。各粒子は 2 準位を持ち、エネルギーは

$$0, \varepsilon \quad (1)$$

のいずれかをとる。

$M$  個の粒子が励起状態（エネルギー  $\varepsilon$ ）にあるとき、系の全エネルギーは

$$E = M\varepsilon \quad (2)$$

で与えられる。最大エネルギーを

$$E_0 = N\varepsilon \quad (3)$$

とする。

以下では  $\varepsilon = 1$ ,  $k_B = 1$  とし、Python による数値計算と可視化を行う。

### 実行条件

粒子数は

$$N = 20, 50, 100 \quad (4)$$

の 3 通りを用いる。励起数  $M$  は

$$M = 0, 1, 2, \dots, N \quad (5)$$

とする。

## 問 1：エントロピーの数値計算

エネルギー  $E = M$  に対する微視状態数は

$$W(M) = \binom{N}{M} \quad (6)$$

で与えられる。エントロピーを

$$S(M) = \ln W(M) \quad (7)$$

と定義する。

本課題では、組合せ数を巨大な整数として直接計算せず、以下の式を用いて対数を先に計算する方法を用いること：

$$\boxed{\ln \binom{N}{M} = \sum_{k=1}^M \ln(N - k + 1) - \sum_{k=1}^M \ln k} \quad (8)$$

この式を用いて、各  $N$  に対し、全ての  $M$  について  $S(M)$  を数値計算せよ（導出を示す必要はない）。

## 問 2：エントロピー $S(E)$ のプロット

問 1 で得た  $S(M)$  を用い、以下をプロットせよ。

- 横軸：  $x = E/E_0 = M/N$
- 縦軸：  $s = S/N$

$N = 20, 50, 100$  の結果が比較できるように描画すること。

## 問 3：熱力学極限（Stirling 近似）との比較

Stirling 近似に基づき、粒子数  $N \rightarrow \infty$  の極限（熱力学極限）で得られるエントロピー密度は

$$s_{\text{approx}}(x) = -[x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)] \quad (0 < x < 1) \quad (9)$$

で与えられる。この近似曲線を計算し、問 2 の数値計算結果と同一の図に重ねて描画せよ。粒子数  $N$  を大きくしたときの振る舞いを確認すること。

## 問 4：温度の数値計算

温度を

$$\frac{1}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_N \quad (10)$$

で定義する。離散データに対して、中央差分

$$\frac{1}{T(M)} \approx \frac{S(M+1) - S(M-1)}{E(M+1) - E(M-1)} \quad (11)$$

を用いて  $T(M)$  を計算せよ（端点  $M = 0, N$  は除外してよい）。

## 問 5：熱力学極限（Stirling 近似）で得られる温度との比較

Stirling 近似に基づき、粒子数  $N \rightarrow \infty$  の極限（熱力学極限）で得られる温度は

$$T_{\text{th}}(x) = \left[ \ln \left( \frac{1-x}{x} \right) \right]^{-1} \quad (12)$$

で与えられる。前問の数値微分によって得た温度と、熱力学極限（Stirling 近似）で得られる温度を同一の図に重ねてプロットし、有限粒子数の結果がこの極限にどのように漸近するかを確認せよ。得られた温度について、以下の量を用いてプロットを行うこと。

- 横軸：  $x = E/E_0 = M/N$
- 縦軸： 温度  $T$

## 問 6：考察

作成した図をもとに、以下について考察せよ。文章は簡潔かつ論理的にまとめること。

- エントロピーが最大値を取るエネルギーを予想し、その理由を述べよ。
- エントロピーが最大となるエネルギー付近で、温度が正か負かを述べよ。
- 本レポートの問題設定において、温度が負となる理由を考察せよ。また、正の温度と負の温度の大小関係について論ぜよ。
- 実際の自然現象において、負の温度を示す実例が少ない理由を考察せよ。

## 提出物

- 各問についての説明や考察を TeX で記述し、図を挿入して作成したレポート（PDF 形式）。
- 使用した Python スクリプト（テキスト形式で、拡張子は .py）。
- Jupyter Notebook 上で作成した Python スクリプトは、.pynb という拡張子のファイルとして保存されているので、第 6 回講義資料 3.3 を参考に .py 形式に変換する。