학습 보고서

활동날짜	
활동장소	
스터디 참석자	
학습주제	리우비 정리(Liouville theorem) 앙상블에 대한 이해 + (고전역학 리뷰)

학습내용

1. 리우비의 정리 (Liouville theorem)

위상공간(phase space) 위의 점들 P(qi,pi)들은 시간에 따라서 Hamilton's equation에 의해 이리저리 움직인다. 그러나 그 과정에서 기존의 것이 사라지거나 새로운 것이 생기지 않는다. 따라서 점 P(qi,pi)가 빽빽하게 모여 있는 정도(위상밀도 ρ)의 시간변화량은 표면에서 흘러나간 양과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_w \rho dw = -\int_\sigma \rho(\vec{v}\cdot\hat{n})d\sigma$$

이것은 곧 gauss theorem에 의해

$$-\int_\sigma \rho(\vec{v}\cdot\hat{n})d\sigma = -\int_w \nabla\cdot(\rho\vec{v})dw$$

즉,

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_w \rho dw = -\int_\sigma \rho(\vec{v}\cdot\hat{n})d\sigma = -\int_w \nabla\cdot(\rho\vec{v})dw$$

따라서 다음의 방정식이 성립한다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{v}) = 0$$

위 식은 전자기학에서 연속방정식으로도 불린다.

여기서 Divergence 부분을 계산해보자.

$$\vec{v} = (\dot{q}_i, \cdots, \dot{p}_i, \cdots)$$

이므로,

$$\nabla\cdot(\rho\vec{v}) = \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial q_i}(\rho\dot{q}_i) + \frac{\partial}{\partial p_i}(\rho\dot{p}_i)\right] = \sum_i \left[\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\dot{p}_i + \rho\left(\frac{\partial\dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial\dot{p}_i}{\partial p_i}\right)\right]$$

Hamiltion's equation에 의하면

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

따라서 다음과 같이 바꿀 수 있다.

$$\sum_i \left[\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} + \rho\left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i}\right)\right]$$

3번째와 4번째 term이 0이 되는 것은 당연한 일은 아니지만 이 경우 0이 된다. 이 term들을 지우고 정리하면 나오는 것은,

$$\sum_i \left[\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right]$$

한편, 푸아송의 괄호(Poisson brackets)는 다음과 같이 정의하는 연산이다.

$$\{F, G\} = \sum_i \left[\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right]$$

따라서

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = \sum_i \left[\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] = \{\rho, H\}$$

이므로 연속방정식을 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$$

밀도함수가 시간에 무관하다면 {ρ,H}가 0을 만족하게 될 것이다. ρ와 H의 Poisson bracket이 0이 되는 경우는 각각

ρ(q,p)=상수 이거나 (Microcanonical ensemble)

ρ(q,p)=ρ(H) 로 밀도함수가 Hamiltonian의 explicit한 함수일 때 이다. (Canonical ensemble)

2. 앙상블 (ensemble)에 대한 이해

앙상블은 크게 다음의 세 가지 경우로 나누어진다.

Microcanonical ensemble (N,V,E 불변)-고립계

Canonical ensemble (N,V,T 불변)-닫힌계

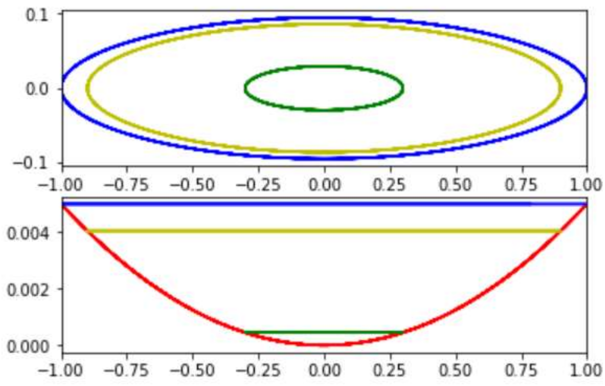
Macrocanonical ensemble (μ,V,T 불변)-열린계

거시적인 조건이 달라지면 ensemble은 달라진다.

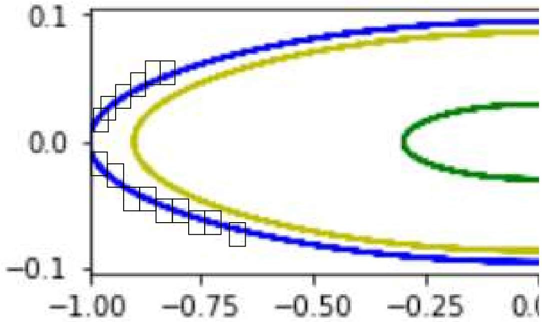
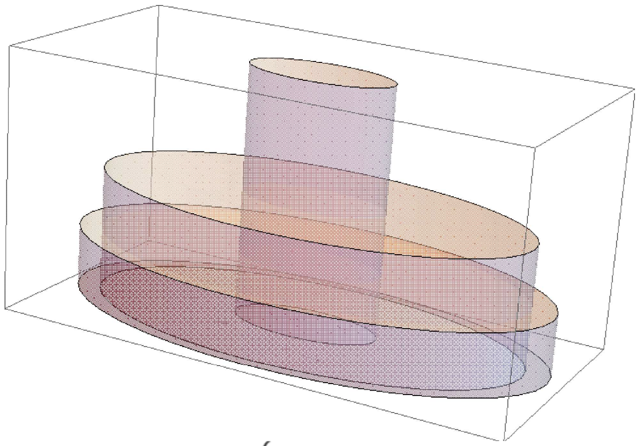
이 중에서 microcanonical ensemble은 ρ(q,p)가 상수일 때, 즉 모든 가능한 미시상태가 똑같은 확률로 가능할 때를 말한다. 확률밀도함수의 정의에 따라 어떤 확률은 다음과 같음을 기억하자!

$$probability = \int_{condition} \rho d\sigma$$

ρ(q,p)가 상수라면 probability가 전부 똑같게 나올 것이다. 이해를 돕기 위해 1차원 Harmonic oscillation potential 속에 놓인 세 입자들을 소개하겠다.



위의 그림은 phase space안에서 세 입자의 궤적(trajectory)를 나타낸 것이고, 아래 그림은 각각 입자들의 위치에 따른 에너지를 보인 것이다. 그림에서 볼 수 있듯, 각각의 trajectory는 에너지에 따라서 동심원상으로 존재한다. 이제 이 계들이 microcanonical ensemble을 이루고 있다고 생각해보자.

	 각각의 trajectory의 미소요소를 고려할 것이다. microcanonical ensemble에서는 에너지가 같을 때, 각각의 표면요소 안에 들어있는 계의 수 n_i가 전부 같다. 따라서 주어진 1-dim harmonic oscillator model의 세 입자에 대한 probability density의 모양은 다음과 같이 나타날 것이다.  $p_i = \frac{n_i*}{\tilde{N}} = \begin{cases} const. & \text{when } H = E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$ 에너지 표면의 궤적을 따라 각각의 probability density를 적분하면 모두 1이 나와야 한다. 따라서 위와 같이 중심으로 갈수록 높아지는 원뿔모양일 것이다. "밀도함수가 앙상블 이론의 핵심이고 엔트로피로부터 열역학적 물리량을 계산할 수 있다. ``
활동성찰	이번 단원부터는 새로 나오는 개념이 많아서 오늘 스터디 시간에는 문제 풀이보다는 중요한 개념들을 하나하나 브리핑을 하고 그 의미들을 곱씹어 보았다. 같이 공부할 땐 같은 주제를 다양한 시각으로 이해할 수 있다는 점이 분명히 좋다.