Statistical Mechanics

Toshiya Tanaka

2022 年 3 月 4 日

概要

物理で Legendre 変換は解析力学の Lagrangian と Hamiltonian の関係や熱力学関数たちの関係として与えられる．物理では言及なしにある程度連続微分可能性を仮定するが，熱力学で相転移を扱うときは熱力学関数の微分微分不可能性が効いてくる．多くの教科書では $f^*(\alpha) = f(x(\alpha)) - \alpha x(\alpha)$ と微分を用いた定義をするが，相転移点も含めた熱力学を議論するとき，max, min [i.] で与える必要がある [Tas00, 付録 H], [Shi12, Chap.11].

1 Legendre 変換について

導出として，凸関数 f に対して，傾き α の線を引いたとき，f との交点を持った状態で直線の切片を最小にすることを考える．$x = x^*$ を通る直線を引くとき，直線の方程式は

$$y = \alpha x + f(x^*) - \alpha x^* \tag{1.1}$$

となり，各 α に対し，切片の最小値を対応させることを考えると次の定義に至る．

Definition 1.1 (Legendre 変換)
凸関数 $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対し，この Legendre 変換 f^* を

$$\begin{aligned} f^*(\alpha) &= -\min_{x\in\mathbb{R}} (f(x) - \alpha x) \qquad (1.2)\\ &= \max_{x\in\mathbb{R}} (\alpha x - f(x)) \qquad (1.3) \end{aligned}$$

と定める．

このとき，素直に考えると負符号はつかないように思うが，凸関数を凸関数に移す対称性を持たせるためにはこれが必要である．

Example 1.2
関数

$$f(x) = \begin{cases} \dfrac{x^3 + x}{4}, & (0 \le x \le 1) \\ x - \dfrac{1}{2}, & (1 \le x \le 2) \\ \dfrac{x^2}{2} - x + \dfrac{3}{2}, & (2 \le x) \end{cases} \tag{1.4}$$

の Legendre 変換は

$$f^*(p) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{4p-1}{3}\right)^{3/2}, & (1/4 < p < 1) \\ \dfrac{1}{2}\left(p^2 + 2p - 2\right), & (1 \le p) \end{cases} \tag{1.5}$$

となる．

---

i. 厳密には sup, inf で与えるが，存在は保証されるそうである https://mathlog.info/articles/829.

ii.

Figure. 1 の青い線部分が，Figure. 2 の一点に潰れていて，微分不可能点になっている．熱力学関数にこのようなことが起こるとき，相転移が起こっていることがわかる．

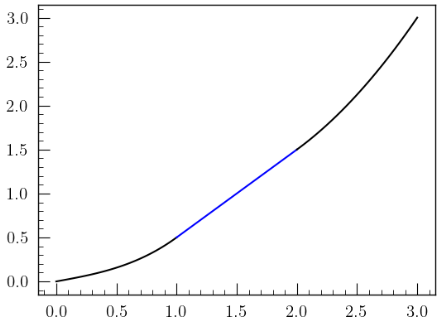

図 1　Legendre 変換前の関数 f.

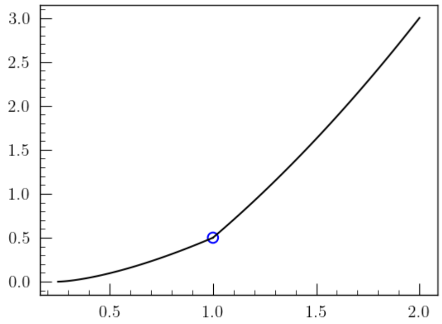

図 2　f を Legendre 変換した関数 f^*

参考文献

[Shi12]　A. Shimizu, **熱力学の基礎** $=$ *principles of thermodynamics*, 第 6 刷 ed., 東京大学出版会, 2012.

[Tas00]　H. Tasaki, **熱力学 : 現代的な視点から**, 新物理学シリーズ / 山内恭彦監修, no. 32, 培風館, 2000.

ii. この例は https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%AB%E3%82%B8%E3%83%A3%E3%83%B3%E3%83%89%E3%83%AB%E5%A4%89%E6%8F%9B による．