計算ノート (統計力学)
福島孝治 (東大院総合文化)
2005.10.21

おはじき分配の問題

- N 人のクラスに M ヶのおはじきを与える.
- 各人は相互におはじきを交換できる.

2 つのグループに分けた場合

- グループ 1 の人数を N_1, グループ 2 の人数を N_2 とする. 総人数は N なので, $N = N_1 + N_2$ である. 但し, グループ 1 はマイナーなグループだとする. すなわち, $N_1 \ll N_2$ である状況を考える.
- グループ 1 に M_1 ヶ, グループ 2 に $M_2 (= M - M_1)$ ヶ分配する時のミクロな状態の数は, $W_{N_1}(M_1) W_{N_2}(M_2)$ となる.

等重率の仮定をすることで, グループ 1 に M_1 ヶ分配する確率 $P_{N_1}(M_1)$ は,

$$
\begin{aligned}
P_{N_1}(M_1) &= \frac{W_{N_1}(M_1) W_{N_2}(M_2)}{W_{N_1+N_2}(M_1+M_2)} \\
&= W_{N_1}(M_1) \underline{\frac{W_{N-N_1}(M-M_1)}{W_N(M)}} \\
&\downarrow \quad (N_1 \ll N_2, M_1 \ll M_2) \\
&\downarrow \quad \left(\underline{\text{下線部}} = \frac{N^{N_1} M^{M_1}}{(M+N)^{M_1+N_1}} = \frac{N^{N_1}}{(M+N)^{N_1}} \left(\frac{M}{M+N} \right)^{M_1} \right) \\
&\simeq W_{N_1}(M_1) \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \left(\frac{m}{1+m} \right)^{M_1} = W_{N_1}(M_1) \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \exp(-\beta M_1) \qquad (1)
\end{aligned}
$$

ここで, $m = M/N$ は均一分割の数, $\beta \equiv -\log\left(\frac{m}{1+m}\right) > 0$.

- $W_{N_1}(M_1)$: グループ 1 に M_1 ヶ分配する場合の数
- $\dfrac{1}{(1+m)^{N_1}} \left(\dfrac{m}{1+m} \right)^{M_1}$: グループ 1 が M_1 をもつ**あるミクロな状態**[1]の実現する確率は, M_1 に依存している. M_1 の単調減少関数[2].

  $\Rightarrow$ $\boxed{\text{異なる } M_1 \text{ に対するミクロな状態の相対確率, } \exp(-\beta M_1) \text{ に比例する}}$

- この結果は, $N_1 = 1$ とすると, $W_{N_1=1}(M_1) = 1$ となり, 前の例と同じ.

[1]もちろん, 等重率の仮定から同じように M_1 をもつミクロな状態はすべて同じ確率になる.
[2]マイナーグループ 1 がおはじきを独占する確率は極めて小さい.

ミクロな状態に対する確率が求まったので，平均値を求めてみる．

M_1 **の期待値**

$$
\begin{aligned}
\overline{M_1} &\equiv \sum_{M_1=0}^{\infty} M_1 P_{N_1}(M_1) = \sum_{M_1=0}^{\infty} M_1 W_{N_1}(M_1) \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \left(\frac{m}{1+m}\right)^{M_1} \\
&\downarrow \left(y = \frac{m}{1+m} \text{とおく} \right) \\
&= \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \sum_{M_1} \underline{\left(y \frac{d}{dy} \right)} \frac{(M_1+N_1-1)!}{M_1!(N_1-1)!} y^{M_1} \\
&\quad \underline{\text{下線部}} \text{ と和を入れ換えるとこの和はとることができる．} \\
&\quad \left(\sum_{M_1=0}^{\infty} \frac{(M_1+N_1-1)!}{M_1!(N_1-1)!} y^{M_1} = (1-y)^{-N_1} \right)^3 \\
&= \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \left(y \frac{d}{dy} \right) (1-y)^{-N_1} = \frac{1}{(1+m)^{N_1}} y N_1 (1-y)^{-N_1-1} \\
&= \frac{N_1}{(1+m)^{N_1}} \frac{m}{1+m} \left(\frac{1}{1+m} \right)^{-N_1-1} = N_1 m \qquad (2)
\end{aligned}
$$

これはまたしても，自明な結果を得た．つまり，期待値としてはグループ 1 の N_1 人に均一平均個数 m を分配する結果となる．一般に n 次のモーメントも同様に求めることができる．

$$
\overline{M_1^n} = \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \left(y \frac{d}{dy} \right)^n (1-y)^{-N_1} \qquad (3)
$$

尤もらしい値： 確率分布 $P_{N_1}(M_1)$ が最も大きな値を持つ M_1 はどこか?

$$
\begin{aligned}
f(M_1) &\equiv \log P_{N_1}(M_1) = \log \left[\frac{(M_1+N_1-1)!}{M_1!(N_1-1)!} \left(\frac{m}{1+m} \right)^{M_1} \right] \\
&\simeq (M_1+N_1)\log(M_1+N_1) - M_1 \log M_1 + M_1 \log \frac{m}{1+m} + \text{const.} \\
&= (M_1+N_1)\log(M_1+N_1) - M_1 \log M_1 - \beta M_1 + \text{const.}
\end{aligned}
$$

極値の条件から

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial M_1} f(M_1) = \log(M_1+N_1) + 1 - \log M_1 - 1 - \beta = \log \frac{M_1+N_1}{M_1} - \beta \\
&\Rightarrow \frac{M_1^*+N_1}{M_1^*} \frac{m}{1+m} = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{M_1^* = N_1 m}
\end{aligned}
$$

最もらしい値が期待値と一致している．

[3] これは二項定理に他ならない．ちなみに，この和が規格化定数の計算にもなっている．

$$
(1-y)^{-N_1} = \left(1 - \frac{m}{1+m} \right)^{-N_1} = (1+m)^{N_1}
$$

であり，前に出している部分とキャンセルして，ちゃんと 1 になっていることがわかる．

確率分布 $P_{N_1}(M_1)$ の形

尤もらしい値 M_1^* の近傍で 2 次まで展開してみる．

$$
\begin{aligned}
f(M_1) &= f(M_1^*) + \frac{\partial}{\partial M_1} f(M_1)\bigg|_{M_1^*} (M_1 - M_1) + \frac{1}{2!}\,\frac{\partial^2}{\partial M_1^2} f(M_1)\bigg|_{M_1^*} (M_1 - M_1^*)^2 + \cdots \\
&\quad \frac{\partial^2}{\partial M_1^2} f(M_1)\bigg|_{M_1^*} = \frac{1}{M_1 + N_1} - \frac{1}{M_1}\bigg|_{M_1^*} = -\frac{1}{N_1(1+m)m}
\end{aligned}
$$

となり，尤もらしい値 M_1^* のまわりのガウス分布

$$
P_{N_1}(M_1) \propto \exp\left(-\frac{(M_1 - M_1^*)^2}{2N_1(1+m)m}\right) = \exp\left[-\frac{N_1(m_1 - m)^2}{2m(1+m)}\right] \tag{4}
$$

であることがわかる．ここで，$m_1 = M_1/N_1$ である．分布の幅は期待値に対する不定性を表すが，それは $1/\sqrt{N_1}$ に比例して，N_1 の増加とともに減少することがわかる．

ここで，グループの数 N_1 がアボガドロ数ほどの大きな数を考えると，分布の幅は大変小さく，確率的にだが，**実質的に決定論的な予言**を与えている．

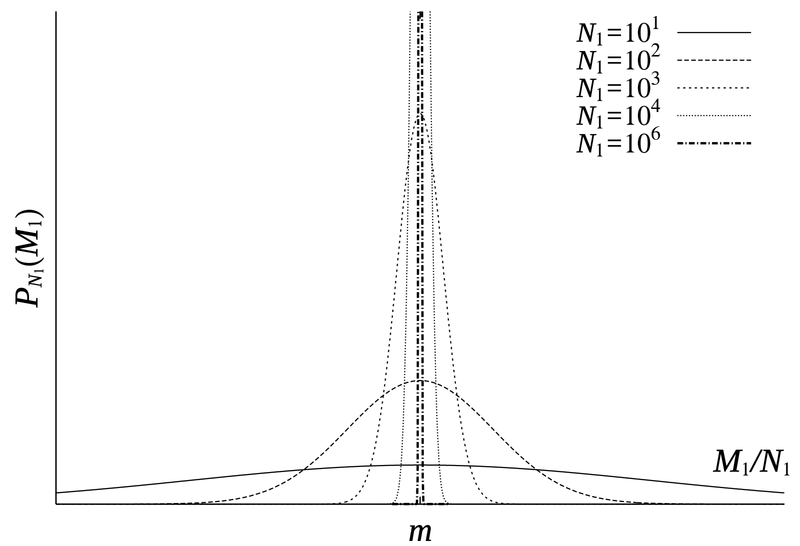

図 1: 適当なパラメータで N_1 を増加する様子を描いてみる．N_1 の増加とともに，とても鋭いピークになることがみてとれる．

先週の宿題の解答例

問題：Stirlingの公式 $\log N! \sim N\log N - N$ を示す.

解答例1 積分で近似する.

$$\begin{aligned}\log N! &= \log N + \log(N-1) + \cdots + \log 1 = \sum_{x=1}^{N}\log x \\ &\simeq \int_1^N dx \log x = x\log x|_1^N - \int_1^N dx 1 = N\log N - N + 1\end{aligned}$$

解答例2 ガンマ関数の漸近評価．階乗はガンマ関数を使って表すことができる.

$$\Gamma(x+1) = x!$$

．一方で，積分表示では,

$$x! = \Gamma(x+1) = \int_0^\infty dt t^x e^{-t} = \int dt \exp\left(-f(t)\right)$$

となり，ここで，$f(t) = t - x\log t$ である．$x \gg 1$ の場合に鞍点で積分を評価する.

$$f(t) = f(t^*) + \frac{1}{2!}\left.\frac{d^2}{dt^2}f(t)\right|_{t=t^*}(t-t^*)^2 + \cdots.$$

ここで，$f'(x^*) = 0$ より，$t^* = x$ となり,

$$x! = e^{x\log x - x}\int_0^\infty dt \exp\left(-\frac{1}{2x}(t-x)^2 + \cdots\right) \tag{5}$$

ガウス積分が次の補正項を与えている．この計算は次の練習問題として出してみたので，答えはもう少し先まで.

練習問題 1 「コイン投げ問題」：

コインを無作意に投げて，表がでるか裏がでるかは 1/2 の確率であるとする．同じ種類のコインを同時に N 枚投げたとする．

1. N 枚なげたコインのうち n 枚が表になる確率 $P_N(n)$ を求めよ．
2. N が大きいとして，スターリングの公式を用いて，もっともらしい枚数を求めよ．
3. 確率 $P_N(n)$ をもっともらしい値から 2 次までのテイラー展開をすることにより，$P_N(n)$ がガウス関数になることを示せ．
4. ガウス積分の公式

$$I \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-\beta)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \tag{1}$$

を以下のように示す．ただし，$\alpha > 0$ とする．

(a) 極座標に変数変換することで，

$$I^2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-\beta)^2}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dxdy e^{-\alpha(x-\beta)^2-\alpha(y-\beta)^2} \tag{2}$$

を計算せよ．

(b) ついでに，$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\alpha(x-\beta)^2}$ を計算せよ．ヒント，($\frac{d}{d\alpha}I =??$)

5. 問い 3．確率 P を規格化定数まで求めよ．
6. その分布関数について，期待値と分散を計算せよ．
7. 実際にコインを投げてみて，比較せよ[4]．

練習問題 2 「気体分子の分布 (ポアソン分布の例)」：

気体粒子 N 個の入った体積 V の容器の中に体積 $v(\gg V)$ の領域を考える．各粒子の存在確率は容器中に一様であるとして，以下の問題を考えよ．

1. 領域 v に入っている粒子の数が n である確率 $P_N(n)$ を求めよ．
2. この領域にある気体粒子の平均数 $\bar{n}$ と分散 σ を求めよ．
3. N/V を一定に保ちながら，$V, N \to \infty$ の極限をとったとき，$P_N(n)$ は Poisson 分布

$$P(n) = \frac{\bar{n}^n e^{-\bar{n}}}{n!}$$

4. この $P_N(n)$ も n,$\bar{n}$ が大きいときに，ガウス分布になることを示せ．(前問と同様に尤もらしい値の周りでテイラー展開せよ．)

[4] N をどうするか?何回投げるか?何を比較するかは，各自設定されよ．

練習問題 3 「D 次元球の体積・表面積」：

D 次元空間における半径 R の球の体積 V_D と表面積 S_D を求めよ[5]．また，その答えを数学的帰納法を用いて証明せよ．

[5]ちょっと文脈はないが，たびたび出てくる計算でかつ，雑学的な要素もある問題．当然，D=3 では…