# 統計熱力学 練習問題編

福島孝治 (東京大学大学院総合文化研究科)

Ver. 1.1:

## 1 統計力学の基礎的考え方

**問題 1-1 スターリングの公式 1：**

$N$ を十分大きいとして，スターリングの公式

$$\log N! = N \log N - N \tag{2.1}$$

が成り立つことを示せ．ここでは左辺を和に分解して，それを積分で近似して，評価せよ．また，実際に左辺と右辺をコンピューターで計算して，どの位の良さかを調べよ．

**問題 1-2 ガウス積分の公式：**

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-\beta)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \tag{2.2}$$

を以下のように示す．ただし，$\alpha > 0$ とする．

1. 極座標に変数変換することで，

$$I^2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-\beta)^2}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-\alpha(x-\beta)^2-\alpha(y-\beta)^2} \tag{2.3}$$

   を計算せよ．

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

**問題 1-3 ガウス分布：**

確率変数 $x$ が従う分布関数 $P(x)$ が

$$P(x) = A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2.4}$$

で表されるとする．$x_0$, $\sigma$ は定数であり，$A$ は規格化定数である．

1. 規格化定数 $A$ を求めよ．
2. $x$ の期待値を計算せよ．
3. $x^2$ の期待値を計算せよ．

4. $x^n$ の期待値を計算せよ.

5. 2 つの変数 $x_1$, $x_2$ がガウス分布しているときに，$y = x_1 + x_2$ が従う分布は?

**問題 1-4 スターリングの公式 2：** スターリングの公式再考.

ガンマ関数 $\Gamma(x)$ は以下のように定義される.

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt t^{x-1} e^{-t} \tag{2.5}$$

次の問いに答えよ.

1. 整数の $x$ に対して，$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ を示せ.
2. ガンマ関数を
$$\Gamma(x) = \int_0^\infty dt \exp(-f(t))$$
と表したときの，$f(t)$ を求めよ．その関数形を調べ，$x$ が大きいときの様子を考えよ (グラフに描いてみよ).
3. $f(t)$ を最小値 $t^*$ の周りで二次まで展開せよ.
4. その展開式を積分して，スターリングの公式を求めよ.

**問題 1-5 おはじき分配問題：**

1. $M$ 個のおはじきを $N$ 人で分配する場合の数 $W_M(N)$ は,
$$W_M(N) = \frac{(M+N-1)}{M!(N-1)!}$$
であることを示せ.
2. ある人が $x$ 個持っている確率を，$M, N$ が大きいとして,
$$P(x) = \frac{1}{1+m}\left(\frac{m}{1+m}\right)^x$$
となることを示せ．ただし，$m = M/N$ である.
3. 前問の $P(x)$ が規格化条件を満たしていることを確認せよ.
4. 次の恒等式が成り立つことを示せ.
$$\sum_{M_1=0}^{\infty} \frac{(M_1+N-1)!}{M_1!(N-1)!} y^{M_1} = (1-y)^{-N}$$
5. それぞれ $N_1$ 人と $N_2$ 人の二つのグループに分れたとき，$N_1$ 人が $M_1$ 個持つ確率 $P_{N_1}(M_1)$ を求めよ.

6. 人数とおはじきの数がともに十分大きいときに，$P_{N_1}(M_1)$ がガウス分布になることを示せ．
7. $N_1$ が大きいときの $P_{N_1}(M_1)$ をグラフに描いてみよ．

**問題 1-6 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，尤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. 確率 $P$ を規格化定数まで求めよ．
5. その分布関数について，期待値と分散を計算せよ．
6. 実際にコインを投げてみて，比較せよ．[1]

**問題 1-7 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 $\sigma$ 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．)

**問題 1-8 カノニカル分布の導出：**

大きな熱浴 (系 II) に接している系 I の統計力学はカノニカル分布で記述できることを以下の手順に従って示せ．各設問には答えだけでなく，その理由も明確に記すこと．

1. 全系 I+II は孤立しているものとして，そのミクロな状態には等重率を仮定する．また，簡単のためにエネルギー状態は離散的になっているとする．全系のエネルギー $E_{\mathrm{tot}}(= E_I + E_{II})$ の時の状態数を $W_{\mathrm{tot}}(E_{\mathrm{tot}})$ とする．また，熱浴の状態数を $W_{II}(E_{II})$ とすると，系 I のエネルギーが $E_I^\alpha$ のあるミクロ状態 $\alpha$ の実現する確率 $p_I^\alpha$ を $W_{\mathrm{tot}}$，$W_{II}$ を用いて表せ．

[1] $N$ 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．

2. 熱浴のエネルギーが，系 I のエネルギよりも十分大きい ($E_{\rm tot} \gg E_I$) として，確率 $p_I^\alpha$ が
$$p_I^\alpha \propto \exp\left(CE_I^\alpha\right)$$
となることを示せ．比例定数 $C$ も求めよ．
3. ミクロな状態数とエントロピーの関係 (Boltzmann の関係式)
$$S(E) = k_B \log W(E)$$
と熱力学関係式
$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$$
を用いて，カノニカル分布を導け．ここで，$T$ は温度，$k_B$ はボルツマン定数である．
4. 確率 $p_I^\alpha$ を規格化せよ．
5. 系 I のエネルギーのその分布に関する期待値と前問の規格化定数との関係を示せ．

**問題 1-9 統計力学的なエントロピーについて：**

1. 2 つの系 1，2 からなる結合系 (1+2) のエントロピーを考える．系 1 のエネルギーが $E_1$ のときのミクロな状態数を $W_1(E_1)$，同様に系 2 のエネルギーが $E_2$ のときのミクロな状態数を $W_2(E_2)$ とする．結合系 (1+2) のエントロピー $S_{1+2}$ を $W_1, W_2$ を用いて表せ．
2. 結合系 (1+2) のエントロピーは，2 つの系 1,2 のエントロピーの和で書けることを示せ．(ヒント：最も確からしいエネルギー分配を考えよ．)
3. 2 つの系 1，2 を最初離しておいて，温度の異なる別々の熱浴に接触させて，平衡状態に達しているとする．このときの温度はそれぞれ $T_1, T_2$ であったとする．この 2 つの系を接触させて，十分長い時間が経過した後で，2 つの温度は一致した．このとき，全系エントロピーは，最初の状態から増大していることを示せ．

**問題 1-10 コインの統計力学的なエントロピー：**
確率 $p$ で表を向くコインが $N$ 枚ある．この系の統計力学的エントロピーを求めよ．また，このエントロピーを最大にする $p$ はいくつか?

**問題 1-11 合成系の分配関数と自由エネルギー：**
ほぼ独立な系 A,B,C の分配関数を $Z_A, Z_B, Z_C$ とし，その自由エネルギーを $F_A, F_B, F_C$ とする．それらの合成系の分配関数 $Z_{A+B+C}$ と自由エネルギー $F_{A+B+C}$ がそれぞれ,
$$\begin{aligned} Z_{A+B+C} &= Z_A \cdot Z_B \cdot Z_C \\ F_{A+B+C} &= F_A + F_B + F_C \end{aligned}$$

# 統計熱力学 解答例編

福島孝治 (東京大学大学院総合文化研究科)
Ver. 1.1:

## 1　統計力学の基礎的考え方

### 問題 1-1 スターリングの公式 1：

和を積分で近似する．

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

数値の比較は後でする．

### 問題 1-2 ガウス積分の公式：

ガウス積分は統計力学の中ではたびたび出てくる計算である．これができないとことがはじまらない．多変数関数の積分は学部の冬学期にならうだろうか．どんな解析学の本あるいは物理数学の本にも載っているので勉強しておいて欲しい[6]．
(1) 元の積分変数 $(x, y)$ から極座標

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\cos\theta + \beta \\ r\sin\theta + \beta \end{pmatrix}, \quad dxdy = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{vmatrix} drd\theta = \begin{vmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{vmatrix} drd\theta = rdrd\theta$$

に変数変換する．積分領域は，$r = [0 : \infty], \theta = [0 : 2\pi]$

$$I^2 = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} rdrd\theta \exp\left(-\alpha r^2\right) = 2\pi \int_0^\infty rdre^{-\alpha r^2} = 2\pi \left(-\frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha r^2}\right)\Big|_0^\infty = \frac{\pi}{\alpha}$$

よって，$\boxed{I = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}$.

(2) ガウス関数は偶関数なので奇数次の平均は 0 である．偶数次はやはり微分して求めるのがよい．

$$\frac{d}{d\alpha} I = \frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(x-\beta)^2} dx = -\int (x-\beta)^2 e^{-\alpha(x-\beta)^2} dx$$

[6] ちょっと冷たい言い方かも知れないが，自分で勉強する楽しみも学んで欲しいと思うのである．

左辺は前問の結果から直接微分して求め，右辺についてはひとつひとつ計算すると，

$$-\frac{1}{2}\pi^{1/2}\alpha^{-3/2} \quad = \quad -\int dx x^2 e^{-\alpha(x-\beta)^2} + \beta^2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

より，

$$\boxed{\int dx x^2 e^{-\alpha(x-\beta)^2} = \left(\frac{1}{2\alpha} + \beta^2\right)\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}$$

が求まる．

**問題 1-3 ガウス分布：**

(1) 規格化条件は，$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x)$ である．前問の結果より，

$$1 = \int dx A \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right\} = A\sqrt{2\sigma^2\pi}$$

であるから，$\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}}$ である．

(2) 確率分布は $x_0$ に対して，対称である：

$$0 = \int dx(x-x_0)P(x) = \overline{x} - x_0$$

ゆえに，$\boxed{\overline{x} = x_0}$.

(3) 前問 (2) より，$\boxed{\overline{x^2} = x_0^2 + \sigma^2}$.

(4) 前問の別解にもなるが，期待値の計算では特性関数を計算するのが便利である．特性関数は，

$$Q(y) \equiv \int dx e^{xy} P(x)$$

で定義される．一般の $n$ 次モーメントの期待値は，

$$\langle x^n \rangle = \int dx x^n P(x) = \left(\frac{d}{dy}\right)^n Q(y)\bigg|_{y=0}$$

と表される．ガウス分布の特性関数は，

$$Q(y) \quad = \quad \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma} + xy\right] = \exp\left[-\frac{x_0^2}{2\sigma^2} + \frac{(x_0+\sigma^2 y)^2}{2\sigma^2}\right] \tag{5.1}$$

である．例えば，一次の期待値は，

$$\langle x \rangle = \frac{d}{dy}Q(y)\bigg|_{y=0} = \exp\left[-\frac{x_0^2}{2\sigma^2}\right](\sigma^2 y + x_0)\exp\left[\frac{(x_0+\sigma^2 y)^2}{2\sigma^2}\right]\bigg|_{y=0} = x_0$$

であることが確かめられる．一般の $n$ については...

(5) $y$ の従う分布関数は，Dirac のデルタ関数を用いて，

$$P(y) = \int dx_1 dx_2 P(x_1)P(x_2)\delta(y - x_1 - x_2)$$

であるが，これを計算するとガウス分布になることがわかる．

$$\begin{aligned}
P(y) &= \frac{1}{2\pi\sigma^2}\int dx_1 dx_2 \exp\left(-\frac{(x_1-x_0)^2}{2\sigma^2}-\frac{(x_2-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)\delta(y-x_1-x_2) \\
&= \frac{1}{2\pi\sigma^2}\int dx_1 \exp\left(-\frac{(x_1-x_0)^2}{2\sigma^2}-\frac{(y-x_1-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= \frac{1}{2\pi\sigma^2}\int dx_1 \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left(2\left(x_1-\frac{y}{2}\right)^2+\frac{1}{2}(y-2x_0)^2\right)\right) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{1}{4\sigma^2}(y-2x_0)^2\right) \qquad (5.2)
\end{aligned}$$

**問題 1-4 スターリングの公式 2：** スターリングの公式再考.

ガンマ関数の漸近評価から階乗を評価してみる．
(1) ガンマ関数の定義から一度部分積分をすればよい．

$$\Gamma(x+1)=\int_0^\infty dt t^x e^{-t} = \left|-t^x e^{-t}\right|_0^\infty + \int_0^\infty dt x t^{x-1}e^{-t} = x\Gamma(x) \qquad (5.3)$$

(2) 全ての指数関数の肩に乗せる．例えば，$x=\exp(\log x)$ である．

$$f(t)=t-x\log t \qquad (5.4)$$

(3) $x \gg 1$ の場合に鞍点で積分を評価する．

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

(4) ここで，$f'(x^*)=0$ より，$t^*=x$ となり，

$$x! = e^{x\log x - x}\int_0^\infty dt \exp\left(-\frac{1}{2x}(t-x)^2+\cdots\right) \simeq e^{x\log x-x}\sqrt{2x\pi} \qquad (5.5)$$

最後の変形では $x$ が大きいとして積分領域を下限を $-\infty$ にした[7]．両辺の log をとると，

$$\log x! = x\log x - x + \log\sqrt{2\pi x} \qquad (5.6)$$

となり，これはスターリングの公式である．問題 2-1 の和を積分で置き換えた近似と比較すると，ガウス積分が次の補正項を与えていることがわかる．具体的に数値を計算した結果を図 1 に示す.

**問題 1-5 おはじき分配問題：**

[7] これを有限に留めると，ガウスの誤差関数と呼ばれるものになる．その漸近評価は次の補正項を与える．

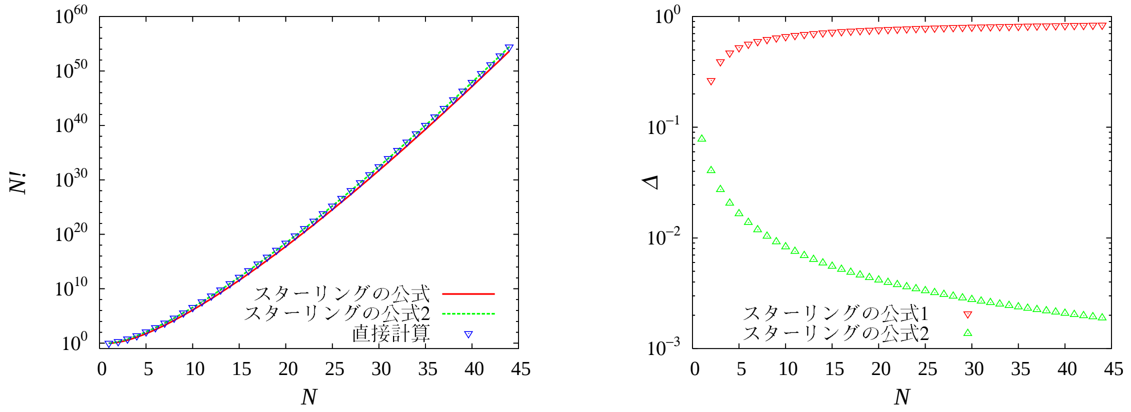


図 1: 階乗 $N!$ の値を正確な計算とスターリングの公式を比べた．左図は $N!$ の値と，スターリングの公式と補正項付きの公式 (公式 2) を $N$ の関数として示した．右図は，2 つの公式と $N!$ との相対誤差を $N$ の関数として示した．補正項付きの方が真の値に近く，その相対誤差は $N$ の増大とともに減少していくことがわかる．

これは講義の復習問題である．講義のときに省略した計算の部分でもある．

(1) これは $M$ 個の名前のないボールを，やはり名前のない $N-1$ 枚の仕切り板で区切る場合の数と同じである．ボールと仕切り板の総数は $M+N-1$ であり，左から並べるときの場合の数は，$(M+N-1)!$ である．ボールと仕切り板にはそれぞれ名前がないので数えすぎている分を割ると，与式が出てくる．

(2) ある人が $x$ 個持っている場合の数は，$N-1$ 人で $M-x$ 個のおはじきを分配する場合の数に等しい．よって，求めたい確率は，

$$P(x) = \frac{W_{N-1}(M-x)}{W_N(M)} = \frac{(M-x+N-2)!}{(M-x)!(N-2)!}\frac{M!(N-1)!}{(M+N-1)!}$$

である．$M, N$ が大きいとして，スターリングの公式を使って，

$$\begin{aligned} P(x) &\simeq \frac{(M+N)^{M-x+N-2}}{M^{M-x}N^{N-2}}\frac{M^M N^{N-1}}{(M+N)^{M+N-1}} = M^x N (M+N)^{-x-1} \\ &= \frac{N}{N+M}\left(\frac{M}{M+N}\right)^x = \frac{1}{1+m}\left(\frac{m}{1+m}\right)^x \end{aligned} \tag{5.7}$$

となる．

(3) ここで，$x$ のとり得る値は，1 から $M$ までであるが，近似的に無限大までとることにする．このときに規格化条件が満たされていることを見る．

$$\sum_{x=1}^{\infty} P(x) = \sum_{x=1}^{\infty}\frac{1}{1+m}\left(\frac{m}{1+m}\right)^x = \frac{1}{1+m}\cdot\frac{1}{1-\frac{m}{1+m}} = 1. \tag{5.8}$$

(4) 文字どおりこの式が成り立つことを示す．まず，右辺の式を Taylor 展開すると，

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{m=0}^{\infty} x^m \tag{5.9}$$

であることがわかる[8]．このことから，示すべきは

$$\sum_{M_1=0}^{\infty}\frac{(M_1+N-1)!}{M_1!(N-1)!}y^{M_1}=\left(\sum_{m=0}^{\infty}y^m\right)^N \tag{5.10}$$

となるが，これは数学的帰納法で示せる．$N=1$ のとき，自明に成立するので，式 (5.10) を用いて，$N+1$ の式を導けばよい．

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{m=0}^{\infty}y^m\right)^{N+1} &= \left(\sum_{m_1=0}^{\infty}y^{m_1}\right)^N\left(\sum_{m_2=0}^{\infty}y^{m_2}\right)=\left(\sum_{M_1=0}^{\infty}\frac{(M_1+N-1)!}{M_1!(N-1)!}y^{M_1}\right)\left(\sum_{M_2=0}^{\infty}y^{M_2}\right)\\
&= \sum_{M_1=0}^{\infty}\sum_{M_2=0}^{\infty}\frac{(M_1+N-1)!}{M_1!(N-1)!}y^{M_1+M_2}\\
&= \sum_{M=0}^{\infty}\left(\sum_{m=0}^{M}\frac{(m+N-1)!}{m!(N-1)!}\right)y^M\\
&\downarrow \left[\sum_{m=0}^{M}\frac{(m+N-1)!}{m!(N-1)!}=\frac{(M+N)!}{M!N!}\text{であることに注意をすると,[9]}\right]\\
&= \sum_{M=0}^{\infty}\frac{(M+N)!}{M!N!}y^M
\end{aligned}$$

よって，上の恒等式は成立することが示された．

(5) 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,

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

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

---

[8]等比級数の和だと思っても良い．

[9]これは順番に足して行けば示せるし，意味は，最初の一人が $x$ 個持っていて，残りの $M-x$ 個のおはじきを $N$ 人で分割する場合の数を $x$ について和をとっているので，結局 $M$ 個のおはじきを $N+1$ 人で分割する場合の数に等しいという式である．

(6) まず，確率分布 $P_{N_1}(M_1)$ の最も大きな値を持つ $M_1$ を求める．

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

極値の条件から

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

さらに，$f(M_1)$ を尤もらしい値 $M_1^*$ の近傍で 2 次まで展開してみる．

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

となり，尤もらしい値 $M_1^*$ のまわりのガウス分布

$$
P_{N_1}(M_1) \propto \exp\left(-\frac{(M_1-M_1^*)^2}{2N_1(1+m)m}\right) = \exp\left[-\frac{N_1(m_1-m)^2}{2m(1+m)}\right] \tag{5.11}
$$

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．
(7) 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．

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．

### 問題 1-6 コイン投げ問題：

おはじき問題と同じようにコインを振る回数が多くなると，中心極限定理に従うことを確認する．
(1) 表と裏の確率は同じなので，全ての可能性のうちに表が $n$ 枚出る場合の数の割合が求める確率 $P_N(n)$ である:

$$
P_N(n) = \frac{{}_N C_n}{2^N} = \frac{N!}{(N-n)!n!}\frac{1}{2^N} \tag{5.12}
$$

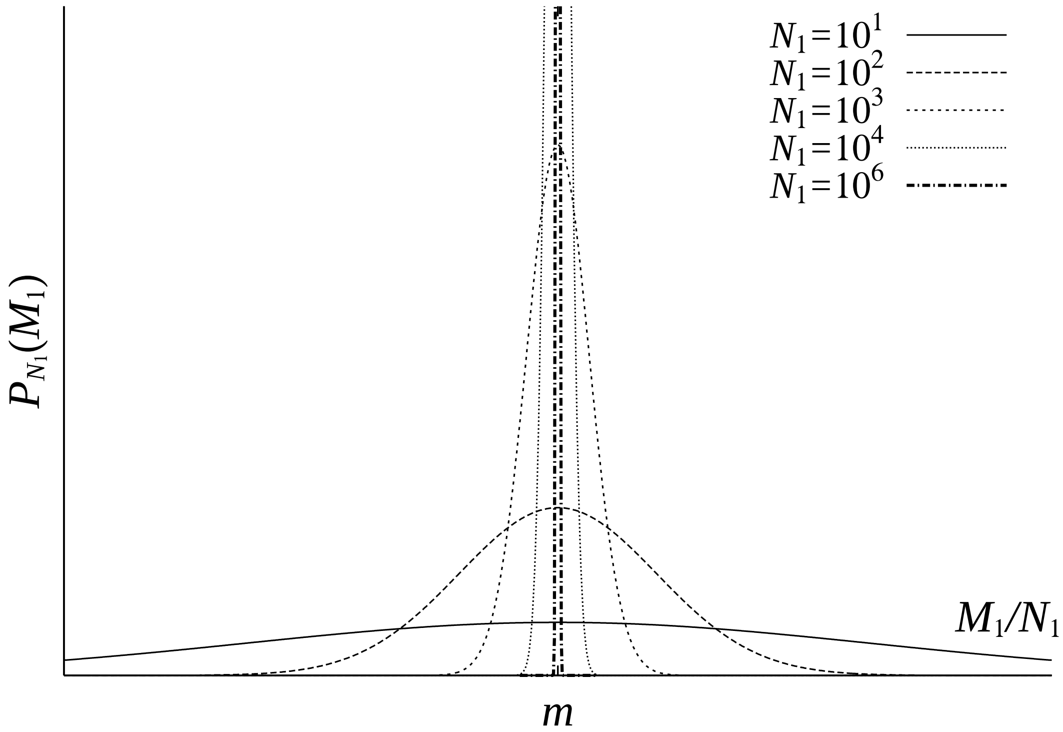


図 2: $P(M_1)$ を $m = M_1/N$ の関数として描く.

(2) $N \gg 1$ として，スターリングの公式 $\log(N!) \simeq N \log N - N$ より，

$$\begin{aligned}
\log(P_N(n)) &= -N\log 2 + \log N! - \log((N-n)!) - \log n! \\
&\simeq -N\log 2 + N\log N - N - (N-n)\log(N-n) + (N-n) - n\log n + n \\
&= -N\log 2 + N\log N - (N-n)\log(N-n) - n\log n
\end{aligned} \tag{5.13}$$

ここで，尤もらしい条件は，$\dfrac{d\log P_N(n)}{dn} = 0$ である.

$$\frac{d\log P_N(n)}{dn} = \log(N-n) - (N-n)\frac{-1}{N-n} - \log n - 1 = \log\left(\frac{N-n}{n}\right)$$

よって，尤もらしい $n^*$ は $\dfrac{N-n^*}{n^*} = 1$ より，$\boxed{n^* = \dfrac{N}{2}}$

(3) 問題では $P_N(n)$ をテイラー展開で二次まで求めよとなっているが，ここでは $\log P_N(n)$ を展開する.

$$\log P_N(n) = \log P_N(n^*) + \frac{1}{2!}\frac{d^2}{dn^2}\log P_N(n)\bigg|_{n=n^*}(n-n^*)^2 + O((n-n^*)^3)$$

$$\downarrow \quad \frac{d^2}{dn^2}\log P_N(n) = \frac{d}{dn}\log\left(\frac{N-n}{n}\right) = \frac{-1}{N-n} - \frac{1}{n}$$

$$
\begin{aligned}
&\simeq \log P_N(N/2) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{N-N/2}+\frac{1}{N/2}\right)(n-n^*)^2 \\
&= -\frac{2}{N}(n-N/2)^2 + \text{const.}
\end{aligned}
$$

よって，定数 C を用いて，

$$
P_N(n) = C\exp\left(-\frac{2}{N}\left(n-\frac{N}{2}\right)^2\right) \tag{5.14}
$$

となる．これはガウス関数である．

(4) 規格化定数は，$C\int P_N(n)dn = 1$ より決まる．ガウス積分の公式より，積分領域が正であることに注意すると，$C\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2/N}} = 1$ より，$C = 2\sqrt{\frac{2}{N\pi}}$ となり，

$$
P_N(n) = 2\sqrt{\frac{2}{N\pi}}\exp\left(-\frac{2}{N}(n-N/2)^2\right)
$$

である．

(5) 期待値と分散 ($\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2$) はそれぞれ，

$$
\begin{aligned}
\langle n\rangle &= \int dn n P_N(n) = \frac{N}{2} \qquad (5.15)\\
\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 &= \int dn n^2 P_N(n) - \frac{N^2}{4} = \left(\frac{N}{4}+\frac{N^2}{4}\right) - \frac{N^2}{4} = \frac{N}{4} \qquad (5.16)
\end{aligned}
$$

となる．

(6) スターリングの公式を使って，ガウス分布を出したが，それがどの程度の $N$ からよく合っているのかを見てみたいということや，期待値とその分散によるゆらぎの効果が $N$ とともにどうなっているのかを見たいというのが，題意である．是非，一度実験してみて欲しいところである．

**おまけ**

この問題の確率分布 (5.12) は二項分布と呼ばれている．$N$ を大きくないとしたときの平均値を見ておこう．平均値の計算には母関数を使うのが便利である．ここで母関数 $Q(z)$ を

$$
Q(z) \equiv \sum_n z^n P_N(n) = \sum_n z^n \frac{N!}{(N-n)!n!}\frac{1}{2^N} = \frac{1}{2^N}(1+z)^N
$$

と定義する．この母関数を用いると，平均値は

$$
\begin{aligned}
\langle n\rangle &= \sum_n nP_N(n) = \sum_n \frac{d}{dz}z^n P_N(n)\bigg|_{z=1} = \frac{d}{dz}Q(z=1) = \frac{N}{2}\\
\langle n^2\rangle &= \sum_n n^2 P_N(n) = \sum_n \left(\frac{d^2}{dz^2}+\frac{d}{dz}\right)z^n P_N(n)\bigg|_{z=1} = \left(\frac{d^2}{dz^2}+\frac{d}{dz}\right)Q(z=1) = \frac{N(N-1)}{4}+\frac{N}{2}
\end{aligned}
$$

となり，$N$ が大きいとしたときの評価と同じになっている．