統計力学　演習 A　問題 2-4　答案

19B01395 藤井淳太朗

提出日時 (最終更新日)
2021 年 4 月 14 日

1　問題 a

ガウス分布の性質について

確率密度関数を

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{1}$$

とすると、$\langle x \rangle = \mu, \left\langle x^2 \right\rangle = \mu^2 + \sigma^2$ となる。

期待値は

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \left\langle \hat{x}^{(k)} \right\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} x_0 = x_0 \tag{2}$$

となる。変数の二乗の期待値は

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{x^2} \right\rangle &= \left\langle \left(\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \hat{x}^{(k)} \right) \right\rangle & (3) \\ &= \frac{1}{N^2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} \left\langle \hat{x}^{(k)}\hat{x}^{(l)} \right\rangle & (4) \end{aligned}$$

ここで、$k = l$ のとき、

$$\left\langle \hat{x}^{(k)}\hat{x}^{(l)} \right\rangle = \left\langle \hat{x}^{(k)2} \right\rangle = \sigma^2 + x_0^2 \tag{5}$$

$k \neq l$ のとき、各変数が独立であることを用いて、

$$\left\langle \hat{x}^{(k)}\hat{x}^{(l)} \right\rangle = \left\langle \hat{x}^{(k)} \right\rangle \left\langle \hat{x}^{(l)} \right\rangle = x_0^2 \tag{6}$$

と計算される。また $k = l$ は N 個、$k \neq l$ は $N^2 - N$ 個となるから、

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle &= \frac{1}{N^2}(N(\sigma^2 + x_0^2) + (N^2 - N)x_0^2) & (7) \\ &= \frac{1}{N}(\sigma^2 + x_0^2 + Nx_0^2 - x_0^2) & (8) \\ &= x_0^2 + \frac{\sigma^2}{N} & (9) \end{aligned}$$

したがって、分散 $\dfrac{\sigma^2}{N}$, 期待値 x_0 となる。

2　問題 b

初めに以下の命題を証明する。

命題

分布 $p(x,y)$ があるとき、$u=x+y$ の分布 $\varphi(u)$ は

$$\varphi(u)=\int_{-\infty}^{\infty}p(u-v,v)dv \tag{10}$$

で与えられ、特に x,y が独立ならば、x の分布を $q(x)$、y の分布を $r(y)$ として、

$$\varphi(u)=(q*r)(u)=\int_{-\infty}^{\infty}q(u-v)r(v)dv \tag{11}$$

で与えられる。

Proof. $u=x+y, v=y$ と $(x,y)\to(u,v)$ の変数変換をすると $\varphi(u)$ は v の周辺分布になる。

$$\varphi(u)=\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{p}(u,v)dv \tag{12}$$

一方で、変数変換のヤコビアンは

$$\left|\frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)}\right|=1 \tag{13}$$

となるから、$\tilde{p}(u,v)=p(x,y)=p(u-v,v)$ とでき、

$$\varphi(u)=\int_{-\infty}^{\infty}p(u-v,v)dv \tag{14}$$

特に、独立な場合、$p(x,y)=q(x)r(y)$ とできるから、

$$\varphi(u)=\int_{-\infty}^{\infty}q(u-v)r(v)dv=(q*r)(u) \tag{15}$$

□

$\hat{y}=x^{(1)}+x^{(2)}$ について、確率密度関数 $\rho'(y)$ は、$x^{(i)}$ の確率密度関数を $\rho^{(i)}(x)$ として、

$$\rho'(y)=(\rho^{(1)}*\rho^{(2)})(x) \tag{16}$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\rho^{(1)}(x-t)\rho^{(2)}(t)dt \tag{17}$$

$$\tag{18}$$

ここで $\rho^{(i)}(x)$ は期待値 x_0, 分散 σ^2 のガウス分布であるから、

$$\rho'(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\{(x-t-x_0)^2 + (t-x_0)^2\}\right] dt \tag{19}$$

$$= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\left\{2\left(t-\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}(x-2x_0)^2\right\}\right] dt \tag{20}$$

$$= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \mathrm{e}^{-\frac{1}{4\sigma^2}(x-2x_0)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{\left(t-\frac{x}{2}\right)^2}{\sigma^2}} dt \tag{21}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi\sigma^2}} \mathrm{e}^{-\frac{\left(x^2-x_0\right)^2}{4\sigma^2}} \tag{22}$$

確率密度関数 $\rho_2(x)$ と $\rho'(y)$ は

$$\rho_2(x)dx = \rho'(y)dy \tag{23}$$

であり、$y = 2x$ で結ばれるから

$$\rho_2(x) = \rho'(y)\frac{dy}{dx} = 2\rho'(2x) \tag{24}$$

となる。したがって

$$\rho_2(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right] \tag{25}$$

3　問題 c

問題 b における命題は N 変数に拡張することができる。すなわち独立な確率変数の和で構成された確率変数 $\hat{y} = \sum_{i=1}^{N} x^{(i)}$ の確率密度関数 $\rho(y)$ は

$$\rho(y) = (\rho^{(1)} * \rho^{(2)} * \cdots \rho^{(N)})(y) \tag{26}$$

で与えられる。畳み込みを具体的に書き下すと、

$$\rho(y) = \int dx^{(1)} \cdots dx^{(N)} \rho^{(1)}(x^{(1)}) \cdots \rho^{(N-1)}(x^{(N-1)}) \rho^{(N)}(y - \sum_{i=1}^{N-1} x^{(i)}) \tag{27}$$

またデルタ関数を用いると、

$$\rho^{(N)}(y - \sum_{i=1}^{N-1} x^{(i)}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx^{(N)} \rho^{(N)}(x^{(N)}) \delta(y - \sum_{i=1}^{N} x^{(i)}) \tag{28}$$

となる。さらに $\rho_N(x) = N\rho(y)$ であるから、

$$f(x, x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(N)}) = N \prod_{i=1}^{N} \rho^{(i)}(x^{(i)}) \delta(x - \sum_{i=1}^{N} x^{(i)}) \tag{29}$$

$$= \frac{N}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{N}{2}}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} (x^i - x_0)^2\right] \delta(x - \sum_{i=1}^{N} x^{(i)}) \tag{30}$$

4　問題 d

畳み込みのフーリエ変換

フーリエ変換を

$$\mathcal{F}[f(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \mathrm{e}^{ikx} \tag{31}$$

と定義する。$\tilde{f}(k), \tilde{g}(k)$ を $f(x)$,$g(x)$ のフーリエ変換として、

$$\mathcal{F}[(f * g)(x)] = \tilde{f}(k)\tilde{g}(k) \tag{32}$$

Proof.

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}[(f * g)(x)] &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(x')g(x-x')dx'\right] \mathrm{e}^{ikx} dx & (33)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \left[\int_{-\infty}^{\infty} g(x-x_0)\mathrm{e}^{ik(x-x')}dx\right] \mathrm{e}^{ikx'} dx' & (34)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} g(y)\mathrm{e}^{iky} dy \int_{-\infty}^{\infty} f(x')\mathrm{e}^{ikx'} dx' \quad (y = x - x') & (35)\\
&= \tilde{f}(k)\tilde{g}(k) & (36)
\end{aligned}$$

□

　したがって、26 式をフーリエ変換すると、ガウス分布の特性関数を $\tilde{\rho}_G(k)$

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}[\rho'(y)] &= \tilde{\rho}^{(1)}(k^{(1)}) \cdots \tilde{\rho}^{(N)}(k^{(N)}) & (37)\\
&= (\tilde{\rho}_G(k))^N & (38)
\end{aligned}$$

とできる。ガウス分布の特性関数を求めと

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}_G(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho^2}} \mathrm{e}^{-\frac{(x-x_0)}{2\sigma^2}} \mathrm{e}^{ikx} & (39)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(x-(x_0+ik\sigma^2))^2 + ikx_0 - \frac{\sigma^2 k^2}{2}\right] & (40)\\
&= exp\left[x_0 ik - \frac{\sigma^2 k^2}{2}\right] & (41)
\end{aligned}$$

となるから、

$$\begin{aligned}
\rho'(y) &= \mathcal{F}^{-1}\left[\exp\left\{N\left(x_0 ik - \frac{\sigma^2 k^2}{2}\right)\right\}\right] & (42)\\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left[-\frac{N\sigma^2}{2}\left(t - \frac{Nx_0 - x}{N\sigma^2} i\right)^2 - \frac{(x_0 N - x)^2}{2N\sigma^2}\right] & (43)\\
&= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2\pi}{N\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x_0 N - x)^2}{2N\sigma^2}\right] & (44)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma^2}} exp\left[-\frac{(x_0 N - x)^2}{2N\sigma^2}\right] & (45)
\end{aligned}$$

また $\rho_N(x) = N\rho'(y) = N\rho(Nx)$ より、

$$\rho_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\left(\frac{\sigma^2}{N}\right)}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\left(\frac{\sigma^2}{N}\right)}\right] \tag{46}$$

となる。これは期待値 x_0、分散 $\dfrac{\sigma^2}{N}$ のガウス分布となっている。確かに問題 a の結果と一致している。