

§2 確率論の基礎

統計力学では多粒子系・多自由度系を確率論的に扱う。そこで、以下に確率論の主要概念をまとめておく。

(a) 事象のとりうる状態とその確率 p_ν

ある確率事象を考え、そのとりうる状態が $\nu = 1, 2, \dots, N_\nu$ 個あるとし、おのこの状態の出現確率を p_ν で表す。例えば、均質な物質でできた正方形のさいころを振る場合、とりうる状態は $\nu = 1, 2, \dots, 6$ の6種類の目で区別され、それらの出現確率は相等しく $p_\nu = \frac{1}{6}$ である。

(b) 状態 ν に付随した量 g_ν

状態 ν に付随したある量を g_ν で表す。例えばさいころの場合、 g_ν としては、出る目の数 $\nu = 1, 2, \dots, 6$ やその二乗 ν^2 など考えることができる。

(c) g_ν の期待値 (平均値) $\langle g \rangle$

g_ν の期待値 (平均値) を $\langle g \rangle$ もしくは \bar{g} で表し、次式で定義する。

$$\langle g \rangle \equiv \sum_{\nu} p_{\nu} g_{\nu}. \quad (1)$$

例えばさいころの場合、出る目の数の期待値は

$$\langle \nu \rangle = \sum_{\nu=1}^6 \frac{1}{6} \nu = \frac{1}{6} \cdot \frac{6 \cdot 7}{2} = \frac{7}{2} = 3.5$$

と計算される。

(d) 標準偏差 σ_g

g_ν の標準偏差を σ_g で表し、次式で定義する。

$$\sigma_g \equiv \sqrt{\sum_{\nu} p_{\nu} (g_{\nu} - \langle g \rangle)^2}. \quad (2a)$$

定義から明らかなように、 σ_g は、 g_ν の分布が平均値を中心としてどの程度広がっているかの目安を与える。(2a) 式に別表現を与えるため、根号の中を以下のように変形する。

$$\sum_{\nu} p_{\nu} (g_{\nu} - \langle g \rangle)^2 = \sum_{\nu} p_{\nu} (g_{\nu}^2 - 2g_{\nu} \langle g \rangle + \langle g \rangle^2) = \sum_{\nu} p_{\nu} g_{\nu}^2 - 2 \langle g \rangle \sum_{\nu} p_{\nu} g_{\nu} + \langle g \rangle^2 = \langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2.$$

従って、 σ_g は以下のようにも表せる。

$$\sigma_g = \sqrt{\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2}. \quad (2b)$$

標準偏差は統計力学において「ゆらぎ」と呼ばれる。

例としてさいころの場合、目の数の二乗の期待値は、

$$\langle \nu^2 \rangle = \sum_{\nu=1}^6 \frac{1}{6} \nu^2 = \frac{1}{6} \cdot \frac{6 \cdot 7 \cdot 13}{6} = \frac{91}{6}$$

と計算される。従って、標準偏差 σ_v は

$$\sigma_v = \sqrt{\frac{91}{6} - 3.5^2} \approx 1.7$$

となることがわかる。

(e) 独立事象

二つのさいころを同時に投げるとき、ある一つのさいころが特定の目の数をとる確率は、他のさいころがどのような目を取るかに依存しないことは明らかである。この現象を一般化して、「独立事象」を以下のように定義する。

二つの事象 $j = 1, 2$ があり、それらの取りうる状態数を $N_v^{(j)}$ で、また事象 j において状態 v が実現される確率を $p_v^{(j)}$ で表す。次に、これら二つの事象からなる合成事象 $1+2$ を考え、その状態が、事象 1 の状態 v_1 と事象 2 の状態 v_2 で完全に指定されるものとし、その出現確率を $p_{v_1 v_2}^{(1+2)}$ で表す。条件

$$p_{v_1 v_2}^{(1+2)} = p_{v_1}^{(1)} p_{v_2}^{(2)} \quad (3)$$

が成立するとき、事象 1 と事象 2 を独立事象と呼ぶ。

(f) 連続変数の場合

ここでは上記の考察を連続変数の場合に拡張する。事象の状態を指定する変数を x ($-\infty < x < \infty$) とし、その確率密度を $p(x)$ で表す。 $p(x)$ は以下のように規格化されているものとする。

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1.$$

この $p(x)$ を用いると、 x が $a \leq x \leq b$ を満たす値を取る確率 $\text{Prob}[a \leq x \leq b]$ は

$$\text{Prob}[a \leq x \leq b] = \int_a^b p(x) dx \quad (4)$$

と書ける。状態 x に関する物理量を $g(x)$ で表す。すると、 $g(x)$ の期待値 $\langle g \rangle$ は

$$\langle g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) p(x) dx \quad (5)$$

と表せる。また、 $g(x)$ の標準偏差は、この期待値の定義を用いて、(2b) 式で与えられる。