

付録C 確率密度関数の操作

統計力学は、多数の基本粒子の振る舞いを大域的に取り扱う物理学である。大域的に取り扱うとは、平均値、分散だけでなく、どのような性質において分布が偏っているかを評価することも大切である。そのため、確率密度関数を取り扱うことは重要である。

C.1 確率密度と平均値・分散

観測によって得られるデータのように誤差を伴う値を取り扱う場合、誤差を確率過程として取り扱うことが有効である。そのとき、観測値 x がどれくらいの確率で得られるのかを評価することが重要である。それを表現するのが確率密度関数である。確率密度関数は、 $p(x)$ のように観測値についての関数として書く。この確率密度関数 $p(x)$ は、観測値が x から $x + dx$ の微小区間に含まれる確率が $p(x) dx$ である、という読み方をする。つまり、観測値が区間 $[x_1, x_2]$ に含まれる確率は、 $p(x)$ を区間 $[x_1, x_2]$ で積分した値となる。発生し得るすべての値に対する累積確率が1でなければならないという条件は、 $p(x)$ の積分を用いた解釈から、

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

なる規格化条件で表現できる。すなわち、確率密度関数はこの規格化条件を満足しなければならない。

観測値 x に確率密度 $p(x)$ によって重みづけして積分した値、すなわち、 x の1次モーメント:

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} xp(x) dx,$$

は観測値の平均値である。観測値に誤差を含む系において、観測される各データは平均値を中心にばらついていると考えられる。そのばらつきの大きさを評価するため、観測値と平均値の差の自乗 $(x - \mu)^2$ の平均を分散として定義する。分散を計算すると、

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 p(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 - 2\mu x + \mu^2) p(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx - 2\mu \int_{-\infty}^{\infty} xp(x) dx + \mu^2 \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx \end{aligned}$$

$$= \langle x^2 \rangle - 2\mu^2 + \mu^2 = \langle x^2 \rangle - \mu^2,$$

となる。なお、ブラケット ($\langle \rangle$) は平均値を与える。つまり、分散は自乗平均と平均値の自乗の差で計算できる。

異なる確率分布の平均値 異なる確率分布の間での平均値について考えよう。確率分布1の確率密度関数を $p_1(x)$ 、確率分布2の確率密度関数を $p_2(x)$ とする。それらの確率分布から、それぞれ、 x_1 と x_2 を抽出する確率は、条件付き確率の考え方から、 $p_1(x_1)p_2(x_2)$ である。二つの確率変数の和の平均値は、

$$\begin{aligned} \langle x_1 + x_2 \rangle &= \iint (x_1 + x_2) p_1(x_1) p_2(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \iint x_1 p_1(x_1) p_2(x_2) dx_1 dx_2 + \iint x_2 p_1(x_1) p_2(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 p_1(x_1) dx_1 + \int x_2 p_2(x_2) dx_2 = \langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

となる。つまり、確率密度関数に関わらず、異なる確率分布から抽出した確率変数の和を平均すると、各確率分布の確率変数を個別に平均して和をとった結果と一致する。

二つの確率変数の積の平均値 $\langle x_1 x_2 \rangle$ も同様である。確率密度関数で重みをつけて積分すると、

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 \rangle &= \iint x_1 x_2 p_1(x_1) p_2(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int x_1 p_1(x_1) dx_1 \cdot \int x_2 p_2(x_2) dx_2 = \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

となるので、確率密度関数に関わらず、異なる確率分布から抽出した確率変数の積を平均すると、各確率分布の確率変数を個別に平均して積をとった結果と一致する。この証明から容易に予想できるように、 x_1 と x_2 に関して個別に定義された関数の積 $f(x_1)g(x_2)$ についても、同様の法則:

$$\langle f(x_1)g(x_2) \rangle = \langle f(x_1) \rangle \langle g(x_2) \rangle,$$

が成立する。一方、商の平均値 $\langle x_1/x_2 \rangle$ は $\langle x_1 \rangle / \langle x_2 \rangle$ ではなく、 $\langle x_1/x_2 \rangle = \langle x_1 \rangle \langle 1/x_2 \rangle$ であることに注意が必要である。

異なる確率分布の分散 異なる二つの確率分布から得た確率変数から演算によって得られる新たな確率変数の分散について考えよう。まず、二つの確率変数の和の分散を計算すると、

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \langle (x_1 + x_2)^2 \rangle - \langle x_1 + x_2 \rangle^2 \\ &= \langle x_1^2 + 2x_1 x_2 + x_2^2 \rangle - (\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle)^2 \\ &= \langle x_1^2 \rangle + 2\langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2 - 2\langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2 \\ &= \langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2 + \langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

が得られる。つまり、独立な確率分布から抽出した確率変数の和で定義した新たな確率変数は、その分散が、各確率分布の分散の和に等しい。この規則性は、統計力学において頻繁に利用する関係である。

一方、二つの確率分布の確率変数の積について得られる分散は、それほど簡単ではない。手順を踏んで計算を実行すると、

$$\begin{aligned}
 \sigma^2 &= \langle (x_1 x_2)^2 \rangle - \langle x_1 x_2 \rangle^2 = \langle x_1^2 x_2^2 \rangle - \langle x_1 x_2 \rangle^2 \\
 &= \langle x_1^2 \rangle \langle x_2^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle^2 \\
 &= (\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2)(\langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2) + \langle x_1^2 \rangle \langle x_2 \rangle^2 + \langle x_1 \rangle^2 \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 \rangle^2 \langle x_2 \rangle^2 \\
 &= (\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2)(\langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2) + (\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2) \langle x_2 \rangle^2 + \langle x_1 \rangle^2 (\langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2) \\
 &= \sigma_1^2 \sigma_2^2 + \sigma_1^2 \mu_2^2 + \mu_1^2 \sigma_2^2,
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

が得られる。このように、確率変数の積で定義される確率変数の分散は、もとの確率分布の平均値も含まれる数式で計算される。特別な場合として、平均値がゼロの確率分布から新たな確率変数を生成した場合に限り、新たな確率分布の分散がもとの分散の積と等しくなる。

C.2 正規分布

本書の本文で導出したように、熱平衡状態ではカルテシアン座標における気体分子の速度成分が正規分布にしたがう。正規分布は確率分布の中で基本的な分布であり、いかなる確率分布の確率変数でも多数加算すれば正規分布を形成する。

確率変数を x とする正規分布の確率密度関数は、

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\mu)^2/\sigma^2},$$

で与えられる。この数式の中に含まれるパラメータは、 μ が平均値、 σ^2 が分散である。このように、正規分布の確率密度関数は平均値と分散が明示的に含まれているのが特徴である。実際に計算して検証してみると、平均値は、

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-(x-\mu)^2/2\sigma} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi + \mu) e^{-\xi^2/2\sigma} d\xi \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \xi e^{-\xi^2/2\sigma} d\xi + \frac{\mu}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2\sigma} d\xi = \mu,
 \end{aligned}$$

となる。第1行目では $\xi \equiv x - \mu$ の置き換えを適用した。第2行目の第1項の積分は、被積分関数が奇関数であるのでゼロとなる。第2項の積分は、確率密度関数の積分の μ 倍と等しいので、 μ となる。これで、平均値が μ と等しいことが示された。

分散については、定義どおり $(x - \mu)^2$ に確率密度関数で重みをかけて積分すればよい。積分を実行すると、

$$\begin{aligned}\langle (x - \mu)^2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2/2\sigma^2} d\xi \\ &= \left[-\frac{\sigma\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\xi^2/2\sigma^2} \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2\sigma^2} = \sigma^2,\end{aligned}$$

のように計算できる。第2行目への数式変形は $\xi \equiv x - \mu$ なる置き換えを適用した。第3行目では部分積分を実行した。その第2項目の積分は確率密度関数の積分の σ^2 倍であるので、分散が σ^2 であることが導かれる。

分散が μ を中心とした2次モーメントと考えると、3次モーメントや4次モーメントがどのようになるか興味があるだろう。一般性のため n 次のモーメント:

$$\langle (x - \mu)^n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^n e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} dx$$

を計算しよう。上と同様に $\xi \equiv x - \mu$ なる置き換えをすると、次数 n が奇数のとき、被積分関数が奇関数であるので、明らかに積分結果はゼロとなる。次数 n が偶数の場合、部分積分によって、

$$\langle (x - \mu)^n \rangle = \frac{(n-1)\sigma^2}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^{n-2} e^{-\xi^2/2\sigma^2} d\xi = (n-1)\sigma^2 \langle (x - \mu)^{n-2} \rangle,$$

なる漸化式が得られる。したがって、正規分布の n 次のモーメントは、

$$\langle (x - \mu)^n \rangle = \begin{cases} 0 & \text{if } n \text{ is odd,} \\ 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (n-1) \sigma^n & \text{if } n \text{ is even,} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

のように表すことができる。

C.3 確率密度関数の操作

本節では、確率変数を数学変換する手段と、複数の確率変数を演算する手段によって新たな確率変数を定義したときの確率密度関数の導出法を考察する。物理学や工学において、ばらつく複数の観測値から別の観測値が得られるとき、新たな観測値の確率を議論するときには本節の内容が役に立つはずである。

C.3.1 確率変数の変換

確率変数を変換して新たな確率密度関数を生成することができる。例えば、平均値がゼロで分散が σ の正規分布にしたがう確率変数 x が与えられたとき、その自乗 $y \equiv x^2$ の分布を y の関数として与える問題がそれにあたる。確率変数を変換して得られる新たな確率変数の分布を知ることは、確率的に得られる現象に起因する結果がどのような確率分布を形成するかを導くことができるのである。

変数変換した確率変数についての確率密度関数を得る手法は難しくはない。確率変数 x についての確率密度関数が $p(x)$ であるとしよう。確率変数を x から y に変換し、その新たな確率変数についての確率密度関数が $p(y)$ であるとする。確率変数が x から $x + dx$ の微小区間に含まれる確率は、 $p(x) dx$ となるはずである。ここで、確率変数を変換したとき、 $x \mapsto y$, $x + dx \mapsto y + dy$ のように変換されたとする。変数変換をしても、もともと同じ区間だった領域に確率変数が含まれる確率は不変であるので、

$$p(x) dx = p(y) dy,$$

が成立しなければならない。したがって、新たな確率変数 y について確率密度関数を書けば、

$$p(y) = p(x) \frac{dx}{dy}, \quad (\text{C.7})$$

で計算できるはずである。この公式を用いれば変数変換で得られた新たな確率変数について確率密度関数をつくることができる。

一例として、振動する物体の存在確率を考えよう。ある物体が $y = A \sin(\omega t + \phi)$ で振動しているとする。任意の時刻 t において、場所 y で物体が存在する確率が知りたい。振幅 A がわかっているが、振動が速すぎて角速度 ω も初期位相 ϕ も特定できないので、いきあたりばったりで物体を探そうという状況である。ということは、振動の位相 $x \equiv \omega t + \phi$ は一樣に分布する乱数だと考える。位相 x として、 $[-\pi/2, \pi/2]$ の範囲を考えれば、空間的な振動の範囲 $-A \leq y \leq A$ を網羅できるので、位相 x に関する確率密度関数は、

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \quad (-\pi/2 \leq x \leq \pi/2),$$

である。確率変数の変換を $y = A \sin x$ として、上で示した確率密度関数の変換公式を利用すると、

$$p(y) = p(x) \frac{dx}{dy} = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{A \cos x} = \frac{1}{\pi \sqrt{A^2 - y^2}}, \quad (\text{C.8})$$

が得られる。図 C.1 に示すように、この確率密度関数は振動の中心($y = 0$)で最小であり、振動の両端($y = \pm A$)で無限大である。つまり、振動の端で物体を見出す確率が高いことを意味している。例えば、ジグザグ飛行で逃げる戦闘機を撃墜するには、ジグザグ経路の

端を狙うと命中しやすくなるのだ。また、計算過程を示さないが、検算として確率密度関数 $p(y)$ を区間 $[-A, A]$ で積分すると1が得られることから、 $p(y)$ が確率密度関数としての条件を満たすことも容易に確認できる。

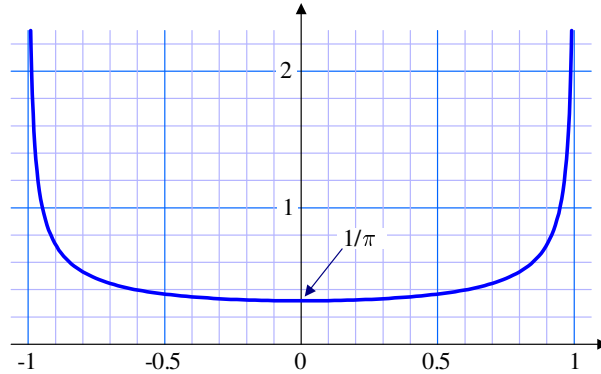


図 C.1: 乱数位相による正弦関数の確率密度関数 ($A = 1$)

もう一つの例として、正規乱数の自乗が形成する確率密度関数を計算しよう。正規乱数は、統計力学では気体分子の速度成分の分布など様々な場面に現れる。正規乱数 x が形成する分布の確率密度関数が、

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-x^2/2\sigma^2},$$

であるとする。このとき、 $y \equiv x^2$ で定義される新たな確率変数について確率密度関数を書き直す。上で得られた公式を用いると、

$$\begin{aligned} p(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-x^2/2\sigma^2} \cdot \frac{dx}{dy} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \frac{1}{2x} e^{-x^2/2\sigma^2} = \frac{1}{\sqrt{8\pi y}\sigma} e^{-y/2\sigma^2}, \end{aligned}$$

のように確率密度関数が計算できる。公式を用いた結果としてはこれで正解なのだが、実は罣がある。変換された確率変数 y は自乗数なので、 $y \geq 0$ である。しかし、区間 $[0, \infty]$ で得られた確率密度関数を積分しても、結果は $1/2$ にしかない。容易に予想がつくように、 $y = a$ になるような x は、 $x = \pm\sqrt{a}$ のように二つの解が存在する。そのうちの一つの解しか確率密度関数の変換につかいていなかったから確率密度関数の積分が $1/2$ にしかなかった。つまり、正しい確率密度関数は得られた関数を2倍する必要がある、

$$p_{\chi^2}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi y}\sigma} e^{-y/2\sigma^2}, \quad (\text{C.9})$$

が必要としていた確率密度関数である。正規乱数の自乗が形成するこの確率分布はカイ自乗 χ^2 分布と呼ばれる。厳密に言うならば、自由度1のカイ自乗分布である。自由度が何を意味するかは次の節で明らかになる。

C.3.2 確率変数の和

二つの独立な確率変数 x と y が与えられたとする。これらの確率変数は、それぞれ、確率密度関数 $p_x(x)$ と $p_y(y)$ にしたがうものとする。そのとき、二つの確率変数の和 $z \equiv x + y$ がしたがう確率分布を考えよう。

最初の確率変数が x から $x + dx$ の範囲に含まれ、もう一方の確率変数が y から $y + dy$ の範囲に含まれるとき、これが同時に成立する確率は、条件付き確率の考え方から、

$$d^2p = p_x(x) p_y(y) dx dy,$$

のように、二つ確率の積で与えられる。この確率を、 $z = x + y$ の条件を満たすすべての組み合わせについて和をとるならば、

$$\begin{aligned} p_{x+y}(z) &= \iint p_x(x) p_y(y) \delta(z - (x + y)) dx dy \\ &= \iint p_x(x) p_y(y) \delta(y - (z - x)) dy dx \\ &= \int p_x(x) p_y(z - x) dx, \end{aligned}$$

が得られる。得られた結果は $x + y = z$ に対応する確率密度を与えている。しかも、得られた数式は $p_x(x)$ と $p_y(y)$ の畳み込み積分である。したがって、二つの独立な確率変数の和が形成する分布の確率密度関数は、独立な確率変数の確率密度関数の畳み込み積分で計算できる。

例として、カイ自乗分布の確率変数の和を考えよう。前節で導出したカイ自乗分布にしたがう確率変数を二つ取り出し、それらの和をとった場合を想定しよう。その和 z の確率密度関数は、

$$\begin{aligned} p_{\chi_2^2}(z) &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_0^z \frac{e^{-x/2\sigma^2} e^{-(z-x)/2\sigma^2}}{\sqrt{x(z-x)}} dx \\ &= \frac{e^{-z/2\sigma^2}}{2\pi\sigma^2} \int_0^z \frac{dz}{\sqrt{z^2/4 - (x-z/2)^2}} = \frac{1}{2\sigma^2} e^{-z/2\sigma^2}, \end{aligned}$$

が得られる。ここで、カイ自乗分布の確率変数が正の実数のみであることから、積分範囲が区間 $[0, z]$ に限定されることに注意が必要である。新たに得られた確率密度関数 $p_{\chi_2^2}(z)$ に対応する確率分布は自由度 2 のカイ自乗分布である。

三つの正規乱数の自乗和が形成する分布は自由度 3 のカイ自乗分布である。自由度 3 のカイ自乗分布の確率密度関数は、自由度 2 と自由度 1 の確率密度関数の畳み込み積分であるので、

$$p_{\chi_3^2}(z) = \frac{e^{-z/2\sigma^2}}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} \int_0^z \frac{dx}{\sqrt{z-x}} = \frac{\sqrt{z}}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} e^{-z/2\sigma^2}$$

が得られる。さらに高い自由度のカイ自乗分布も同様である。高い自由度のカイ自乗分布を計算するには、 $(z-x)^{n/2}/\sqrt{x}$ を x について積分しておくといよい。その積分は、

$$\int_0^z \frac{(z-x)^{n/2}}{\sqrt{x}} dx = 2z^{(n+1)/2} \int_0^{\pi/2} \cos^{n+1} \theta d\theta$$

$$= \begin{cases} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots n}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (n+1)} \pi z^{(n+1)/2} & (\text{if } n \text{ is odd}), \\ \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots n}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (n+1)} \cdot 2z^{(n+1)/2} & (\text{if } n \text{ is even}), \end{cases}$$

のように計算される。この積分の実行にたり、 $x \equiv \sqrt{z} \sin^2 \theta$ の置き換えを、さらに、 $\cos^{n+1} \theta$ の積分にはウォリスの公式を用いた。ガンマ関数の性質 $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, $\Gamma(1) = 1$, $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ を利用すると、この積分は、

$$\int_0^z \frac{(z-x)^{n/2}}{\sqrt{x}} dx = \frac{\Gamma((n+2)/2)}{\Gamma((n+3)/2)} \pi^{1/2} z^{(n+1)/2},$$

のように偶数と奇数に分けなくても書けることがわかる。この積分をヒントに自由度3までのカイ自乗分布の確率密度関数を見ると、自由度 n のカイ自乗分布の確率密度関数は、

$$p_{\chi_n^2}(z) = \frac{z^{n/2-1}}{2^{n/2} \Gamma(n/2) \sigma^n} e^{-z/2\sigma^2}, \quad (\text{C.10})$$

と書けそうである。この推測が正しいことは数学的帰納法で証明すればよい。確率密度関数 (C.10) が正しいと仮定して、自由度 $n+1$ の確率密度関数を計算すると、

$$\begin{aligned} p_{\chi_{n+1}^2}(z) &= \frac{e^{-z/2\sigma^2}}{2^{(n+1)/2} \sqrt{\pi} \Gamma(n/2) \sigma^{n+1}} \int_0^z \frac{(z-x)^{n/2-1}}{\sqrt{x}} dx \\ &= \frac{e^{-z/2\sigma^2}}{2^{(n+1)/2} \sqrt{\pi} \Gamma(n/2) \sigma^{n+1}} \cdot \frac{\Gamma(n/2)}{\Gamma((n+1)/2)} \pi^{1/2} z^{(n-1)/2} \\ &= \frac{z^{(n+1)/2-1}}{2^{(n+1)/2} \Gamma((n+1)/2) \sigma^{n+1}} e^{-z/2\sigma^2}, \end{aligned}$$

が得られ、(C.10) と矛盾しない。したがって、予想どおり、自由度 n のカイ自乗分布の確率密度関数は、(C.10) である。カイ自乗分布の確率密度関数は図 C.2 に示すカーブを描く。自由度1のとき $z=0$ で確率密度関数が発散するが、自由度が2以上では $x=0$ での確率密度関数はゼロになる。

特別な例として、自由度2のカイ自乗分布の確率変数の平方根を確率変数とする確率分布はレイリー分布と呼ばれる。レイリー分布は、言い換えると、二つの正規乱数 x と y をカルテシアン座標系のベクトルとしたときのベクトルの大きさに相当する。レイリー分布の確率密度関数を得るには、自由度2のカイ自乗分布の確率変数を x としたとき、 $z \equiv \sqrt{x}$ なる変数変換を適用すればよいので、

$$p_{\chi_2}(z) = \frac{1}{2\sigma^2} e^{-x/2\sigma^2} \cdot 2\sqrt{z} = \frac{z}{\sigma^2} e^{-z^2/2\sigma^2},$$

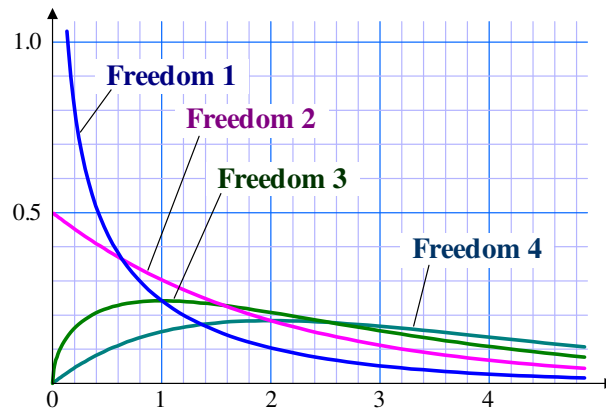


図 C.2: カイ自乗分布の確率密度関数

が得られる。改めて書くと、レイリー分布の確率密度関数は、

$$p_{\chi^2}(z) = \frac{z}{\sigma^2} e^{-z^2/2\sigma^2}, \quad (\text{C.11})$$

となる。この確率密度関数は図 C.3 に示す曲線を描く。同一の分散をもつ二つの正規乱数 x と y を与えたとき、レイリー分布は $z = \sqrt{x^2 + y^2}$ を確率変数とする分布である。つまり、

$$x = z \cos \theta, \quad y = z \sin \theta,$$

と書くことができる。後に証明するが、位相 θ は一様乱数となる。計算機では、この性質を利用して正規乱数を生成している。レイリー分布は累積確率を解析的に記述することができ、

$$P_r(z) = \frac{1}{\sigma^2} \int_0^z \xi e^{-\xi^2/2\sigma^2} d\xi = 1 - e^{-z^2/2},$$

が得られる。この数式はレイリー分布にしたがう乱数 (レイリー乱数) z が、最下位からどれくらいの割合に位置するかを表している。これを上位からの割合 $\alpha \equiv 1 - P_r(z)$ に変換すると、レイリー乱数 z は、

$$z = \sqrt{-2 \log \alpha}, \quad (\text{C.12})$$

となる。この数式は、 $[0, 1)$ の値をとる一様乱数 α からレイリー乱数を得る公式である。レイリー乱数に $\cos \theta$ と $\sin \theta$ を乗じれば、二つの正規乱数を得られる。上で述べたように、 θ は一様である。ただし、計算機で使う乱数は $[0, 1)$ の値をとる一様乱数が多いので、 $[0, 1)$ の値をとる一様乱数 β を用いて、

$$x = \sqrt{-2 \log \alpha} \cos 2\pi\beta, \quad y = \sqrt{-2 \log \alpha} \sin 2\pi\beta, \quad (\text{C.13})$$

なる公式によって正規乱数を得られる。計算機で雑音を与える場合など、この公式が利用される。この公式を利用した正規乱数の生成方法はボックス・ミュラーのアルゴリズムと呼ばれる。

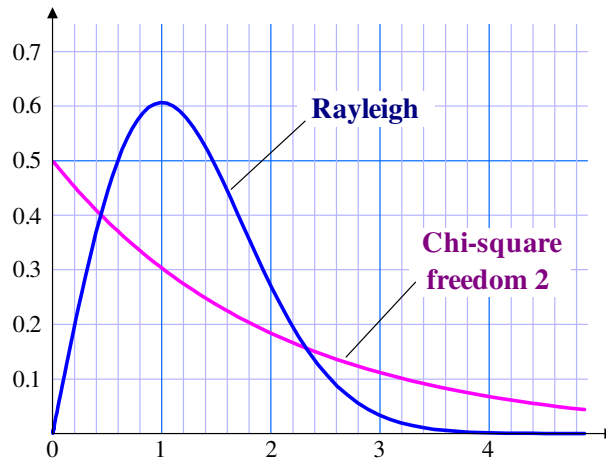


図 C.3: レイリー分布の確率密度関数

二つの正規乱数 x と y が与えられたとき, $x = z \cos \theta$, $y = z \sin \theta$ を満たす θ は一様乱数である。その事実を証明しよう。位相 θ は, $\theta = \arctan(y/x)$ のように書き直すことができる。この変数変換を用いて θ に関する確率密度関数を計算する。ただし, $(-y)/(-x) = y/x$ が成立するので, θ の定義式は 1 価関数ではない。そこで, θ を 1 価関数にするため, $x \geq 0$ に限定する。すると, x はゼロを中心とする正規分布において, 正の確率変数のみで形成される分布であり, y はゼロを中心とする正規分布である。すなわち, x と y の確率密度関数 $p_x(x)$ と $p_y(y)$ は,

$$p_x(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad p_y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-y^2/2\sigma^2},$$

である。まず, $z = y/x$ となる確率を計算すると,

$$\begin{aligned} p_z(z) &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_0^{\infty} dx e^{-(x^2+y^2)/2\sigma^2} \delta(y/x - z) \\ &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_0^{\infty} x e^{-(z^2+1)x^2/2\sigma^2} dx = \frac{1}{\pi(z^2+1)}, \end{aligned}$$

が得られる。続いて, $\theta = \arctan z$ であることを利用して確率密度関数を変換すると,

$$p_\theta(\theta) = p_z(z) \frac{dz}{d\theta} = (z^2+1) p_z(z) = \frac{1}{\pi},$$

が導かれる。一方, $x < 0$ の場合についても同様の手順で計算すると $p_\theta(\theta) = 1/\pi$ が得られる。ところで, 本来, $x > 0$ のとき $|\theta| < \pi/2$ であり, $x < 0$ のとき $\pi/2 < |\theta| \leq \pi$ であるように変換式を調整すべきであるので, $x > 0$ と $x < 0$ の場合を統合すると, 確率密度関数は,

$$p_\theta(\theta) = \frac{1}{2\pi},$$

となる。したがって, θ は一様乱数である。この性質があるので, 一様乱数を与えて, ボックス・ミュラーのアルゴリズムで正規乱数を生成することができる。

C.3.3 特性関数

確率変数の和が形成する確率分布の確率密度は、確率密度関数の畳み込み積分であることが前節で示された。畳み込み積分はフーリエ変換と密接な関係があり、フーリエ変換を利用すると便利ことが多い。確率密度関数のフーリエ変換は特性関数と呼ばれる。

平均値が μ で分散が σ^2 の正規分布の特性関数を計算しよう。特性関数は確率密度関数のフーリエ変換であるから、

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2 - ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2\sigma^2 - ik(\xi+\mu)} d\xi \\ &= \frac{e^{-ik\mu}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\xi + ik\sigma^2)^2 - \frac{k^2\sigma^2}{2}\right] d\xi \\ &= \frac{e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi + ik\sigma^2)^2/2\sigma^2} d\xi, \end{aligned}$$

のように計算できる。ここから計算を進めるには複素関数における留数定理を利用する。ここでの被積分関数を積分するには、図 C.4 に示す積分経路を考えるのが便利である。被積分関数は複素平面全体で正則であるので、周回積分をするとゼロになる。積分変数の実部を一定に保つ積分路 C_R と C_{-R} に沿った積分は、 $R \rightarrow \infty$ の極限でゼロとなる。したがって、

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{C_0} e^{-(z+ik\sigma^2)^2/2\sigma^2} dz \\ &= -\frac{e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{C_-} e^{-(z+ik\sigma^2)^2/2\sigma^2} dz \\ &= -\frac{e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{\infty}^{-\infty} e^{-\xi^2/2\sigma^2} d\xi \\ &= \frac{e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2\sigma^2} d\xi = e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}, \end{aligned}$$

が導かれる。第1行目から第2行目への数式変形は、複素平面上での周回積分がゼロであることを利用した。第3行目へは積分経路 C_- を $z \equiv \xi - ik\sigma^2$ とおいて積分変数を複素数 z から実数 ξ に置き換えた。最終行では、積分が正規分布の確率密度関数の積分に変形されている。結果を改めて書くと、平均値が μ で分散が σ^2 の正規分布の特性関数は、

$$F(k) = e^{-k^2\sigma^2/2 - ik\mu}, \quad (\text{C.14})$$

である。この特性関数から正規分布に関する面白い性質が導かれる。その性質とは、平均値と分散が異なる正規分布の確率密度変数の和は、正規分布を形成するということだ。平

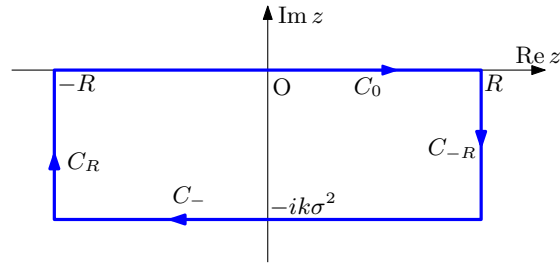


図 C.4: 正規分布の特性関数のための積分路

均値が μ_1 で分散が σ_1^2 の正規分布 1 と、平均値が μ_2 で分散が σ_2^2 の正規分布 2 を仮定しよう。それら二つの正規分布の確率変数の和が形成する確率分布は、二つの正規分布の確率密度関数の畳み込み積分である。または、特性関数が二つの正規分布の特性関数の積であると考えてもよい。つまり、新たに得られる確率分布の特性関数は、

$$F_{12}(k) = \exp \left[-\frac{k^2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{2} - ik(\mu_1 + \mu_2) \right],$$

である。言うまでもなく、この特性関数を逆フーリエ変換すると、

$$p_{12}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}} e^{-(x-\mu_1-\mu_2)^2/2(\sigma_1^2+\sigma_2^2)},$$

なる確率密度関数が得られる。この関数は二つの正規分布の確率変数の和が形成する確率分布の確率密度関数であり、その確率分布の平均値が $\mu_1 + \mu_2$ で分散が $\sigma_1^2 + \sigma_2^2$ であることを意味している。この性質は、正規分布の確率変数を N 個加算しても同様に、その確率密度関数は、

$$p_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2},$$

$$\text{where } \mu = \sum_{n=1}^N \mu_n, \quad \sigma^2 = \sum_{n=1}^N \sigma_n^2,$$

となる。この性質の特別な場合として、同一の正規分布の確率変数 N 個の平均をとる場合を考えよう。取り出す確率変数を x_1, x_2, \dots, x_N とする。平均をとるということは、

$$x \equiv \frac{x_1}{N} + \frac{x_2}{N} + \dots + \frac{x_N}{N},$$

を取り扱うということだ。つまり、平均値が μ で分散が σ^2 の正規分布から抽出した N 個の確率変数の平均をとる操作は、平均値が μ/N で分散が σ^2/N^2 の正規分布から抽出した N 個の確率変数の和をとる操作と同じである。したがって、平均値が示す確率分布は、平均値が ν で分散が σ^2/N の正規分布となる。これは、平均化することで分散が小さくなることを意味している。この事実は、誤差がある測定値に対して、測定回数を稼いで平均をとることで誤差が減らせるという経験則と合致する。

C.3.4 確率変数の積の分布

二つの確率分布の積が形成する確率分布を導出しよう。独立な二つの確率分布を x と y とし、それらが形成する確率分布の確率密度関数を、それぞれ、 $p_x(x)$ と $p_y(y)$ とする。確率変数の積 $z \equiv xy$ が生成する確率分布の確率密度関数は、

$$p_z(z) = \iint p_x(x) p_y(y) \delta(xy - z) dx dy,$$

で計算できる。デルタ関数の積分公式を利用し、 y についての積分を実行すると、

$$p_z(z) = \int p_x(x) p_y(z/x) \frac{dx}{|x|}, \quad (\text{C.15})$$

が得られる。この数式が確率変数の積が形成する確率分布を与える公式である。

一様に分布する確率変数の積 第1の例として、0 から N までを一様に分布する実数を二つ選び、積をとったときの分布を導出しよう。公式 (C.15) の適用にあたり、 $p_x(x) = p_y(y) = 1/N$ とする。確率変数の定義域が $[0, \infty)$ であるので、積の確率密度関数は、

$$p_z(z) = \frac{1}{N^2} \int_{z/N}^N \frac{dx}{x} = \frac{1}{N^2} \log \frac{N^2}{z},$$

のように計算できる。ここで、 x と y の一方の最大値が N であるから、もう一方の最小値が z/N であることに注意して積分範囲を決めた。その結果、確率密度関数が対数関数であることが導かれた。

正規乱数の積 第2の例として、正規乱数を二つ選び積をとったときの分布を導出しよう。もとの正規乱数が平均値がゼロで分散が σ^2 であるとする。公式 (C.15) を適用すると、

$$p_z(z) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \left(x^2 + \frac{z^2}{x^2}\right)\right] \frac{dx}{|x|},$$

で計算できるはずだ。この数式の被積分関数が偶関数であることに注意すると、確率密度関数は、

$$\begin{aligned} p_z(z) &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \left(x^2 + \frac{z^2}{x^2}\right)\right] \frac{dx}{x} \\ &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{z}{2\sigma^2} \left(\frac{x^2}{z} + \frac{z}{x^2}\right)\right] \frac{dx}{x} \\ &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{z}{2\sigma^2} (e^{2\xi-\phi} + e^{-2\xi-\phi})\right] d\xi \\ &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z/\sigma^2) \cosh(2\xi-\phi)} d\xi = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z/\sigma^2) \cosh \eta} d\eta \\ &= \frac{1}{\pi\sigma^2} \int_0^{\infty} e^{-(z/\sigma^2) \cosh \eta} d\eta = \frac{1}{\pi\sigma^2} K_0\left(\frac{z}{\sigma^2}\right), \end{aligned}$$

のように計算できる。第3行目への数式変形では、 $x \equiv e^\xi$ なる置き換えを適用した。同時に、 $z \equiv e^\phi$ とおいた。第4行目では $\eta \equiv 2\xi - \phi$ なる置き換えを適用し、第5行目への数式変形で被積分関数が偶関数であることを利用した。最終的に導出された関数 K_0 はゼロ次の第2種変形ベッセル関数である。この確率密度関数は、図C.5に示す曲線を描く。また、(C.3)と(C.5)を用いると、この確率分布は平均値がゼロで分散が σ^4 であることがわかる。

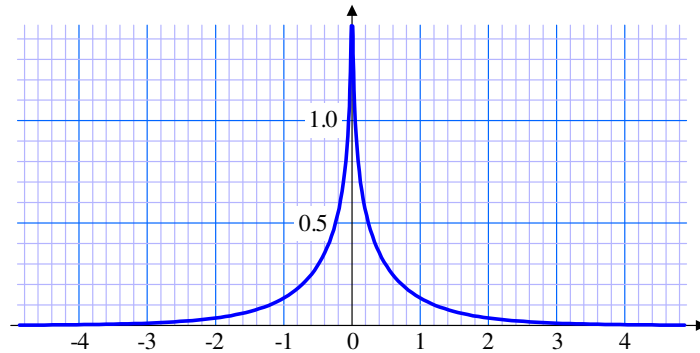


図 C.5: 正規乱数の積の確率密度関数

正規乱数と正弦関数の積 平均値がゼロの正規乱数と正弦関数の積はさらに異なる確率分布を形成する。具体的には、正規乱数 $n(x)$ が与えられたとき、 $n(x) \cos \theta$ の確率密度関数を求めたいのである。その確率密度関数は、正規乱数どうしの積と類似し、第2種の変形ベッセル関数を用いた数式で表現できる。

平均値がゼロで標準偏差が σ の確率密度関数を $p_x(x)$ 、正弦関数 $\cos \theta$ の確率密度関数を $p_y(y)$ とする。ただし、位相 θ は一様に選ばれるとする。そのとき、

$$p_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad p_y(y) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-y^2}},$$

となる。確率密度関数の積に対する確率密度関数の公式を適用すると、

$$\begin{aligned} p_z(z) &= \left(\int_{-\infty}^{-z} + \int_z^{\infty} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-x^2/2\sigma^2} \cdot \frac{1}{\pi\sqrt{1-(z/x)^2}} \frac{dx}{|x|} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}\sigma} \int_z^{\infty} \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{x\sqrt{1-(z/x)^2}} dx = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}\sigma} \int_z^{\infty} \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{x^2-z^2}} dx \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}\sigma} \int_0^{\infty} e^{-z^2 \cosh^2 \xi / 2\sigma^2} d\xi = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}\sigma} \int_0^{\infty} e^{-z^2 (\cosh 2\xi + 1) / 4\sigma^2} d\xi \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\sigma} e^{-z^2/4\sigma^2} \int_0^{\infty} e^{-z^2 \cosh \eta} d\eta = \frac{K_0(z^2/4\sigma^2)}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\sigma} e^{-z^2/4\sigma^2}, \end{aligned}$$

が得られる。なお、第3行目への数式変形では $x \equiv z \cosh \xi$ の置き換えを、第4行目への数式変形では $\eta \equiv 2\xi$ の置き換えを適用した。得られた確率密度関数をグラフに描くと図C.6

のようになる。グラフの形状は二つの正規分布の積の確率密度関数に類似しているが、この関数の方が分散が小さい。図 C.5 に示す確率分布の分散が 1 であるのに対し、図 C.6 に示す確率分布の分散は $1/2$ である。

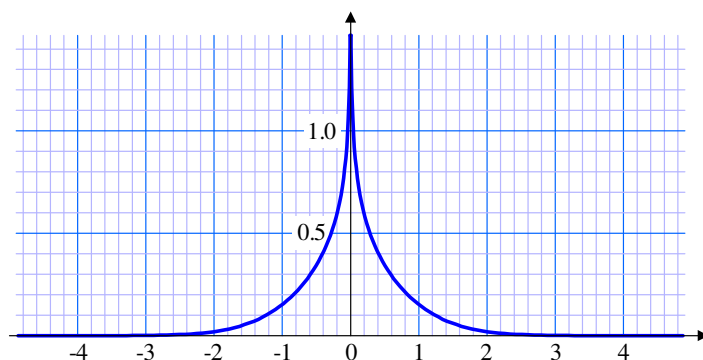


図 C.6: 正規乱数と正弦関数の積の確率密度関数 ($\sigma = 1$)

二つの正規乱数を生成し、一方に余弦関数を、もう一方に正弦関数を乗じ、得られた二つの積を加算すると、その和は正規乱数になる。これは次のように証明することができる。二つの正規乱数を x と y とする。既に示したように、二つの正規乱数の自乗和の平方根 $r \equiv \sqrt{x^2 + y^2}$ はレイリー分布となる。このとき、

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta,$$

と書いたとすると、位相 θ が一様乱数となることは既に説明した。次に、 x に余弦関数を y に正弦関数を乗じて和をとると、

$$\begin{aligned} x \cos \phi + y \sin \phi &= r (\cos \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi) \\ &= r \cos(\theta - \phi), \end{aligned}$$

となる。位相 ϕ が一様に選んだ位相であれば、 $\theta - \phi$ は一様乱数となる。つまり、得られた和はレイリー分布を形成する確率密度関数に一様に選んだ角度の正弦関数を乗じた積であるので、正規乱数である。

C.4 中心極限定理

同一の確率分布から多数の確率変数を抽出し、それらの平均値を新たな確率変数をする、その確率分布は正規分布に近づく。もとの確率変数の平均値と分散を、それぞれ、 μ と σ^2 とすると、新たな確率分布の平均値と分散は、それぞれ、 μ と σ^2/N である。これが中心極限定理である。

ある確率変数 x が確率密度 $p(x)$ の確率分布を形成し、その平均値と分散を、それぞれ、 μ と σ^2 であるとする。これを数式で書くと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx = \mu, \quad \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 p(x) dx = \sigma^2,$$

となる。確率密度関数 $p(x)$ で表現される確率分布から N 個の確率変数を抽出し、それらの平均値:

$$X \equiv \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \cdots + x_N}{N},$$

を新たな確率変数として定義しよう。新たな確率変数の定義は、

$$X \equiv \frac{x_1}{N} + \frac{x_2}{N} + \frac{x_3}{N} + \cdots + \frac{x_N}{N},$$

のように書き換えることができる。既に示したように、複数の確率変数の和がつくる確率分布は、確率密度関数の畳み込み積分で表される。畳み込み積分は、特性関数の積を逆フーリエ変換することによっても得られる。そこで、確率変数 X が形成する確率分布の確率密度関数を次の手順によって導出する。

1. 確率変数 x/N が形成する確率分布の確率密度関数 $p_N(x)$ としたとき、その特性関数 $P_N(k)$ を導出する。
2. 特性関数 $P_N(k)$ の N 乗、すなわち、 $[P_N(k)]^N$ を導出する。
3. 特性関数の N 乗 $[P_N(k)]^N$ を逆フーリエ変換し、目的の確率密度関数を導出する。

手順1として、まず、上で述べたように x/N がしたがう確率密度関数を $p_n(x)$ とする。そのとき、確率変数 x のモーメントは、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} p_N(x) dx &= 1, & \int_{-\infty}^{\infty} x p_N(x) dx &= \frac{\mu}{N}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \left(x - \frac{\mu}{N}\right)^2 p_N(x) dx &= \frac{\sigma^2}{N^2}, \end{aligned} \tag{C.16}$$

なる数式で表される。確率密度関数 $p_n(x)$ の特性関数は、

$$P_N(k) = \int_{-\infty}^{\infty} p_N(x) e^{-ikx} dx,$$

のように定義される¹。後の計算の便宜をはかり、この特性関数を、

$$P_N(k) = e^{-ik\mu/N} \int_{-\infty}^{\infty} p_N(x) e^{-ik(x-\mu/N)} dx,$$

¹確率統計のテキストでは、 k の符号が本書とは逆である。本書は、確率密度関数のフーリエ変換として定義するので、 k に負の符号を付している。

のように変形しておく。さらに、ここで、 N が十分大きいと仮定すると、この確率分布の確率変数は十分に小さいと仮定できる。特性関数の計算において、 $e^{-ik(x-\mu/N)}$ がマクローリン級数の2次近似で十分に近似できる範囲内に確率変数のほとんどが存在できるくらい確率変数 $x - \mu/N$ が小さいと仮定するのだ。すると、特性関数は、

$$\begin{aligned} P_N(k) &\simeq e^{-ik\mu/N} \int_{-\infty}^{\infty} p_N(x) \left[1 - ik \left(x - \frac{\mu}{N} \right) - \frac{1}{2} k^2 \left(x - \frac{\mu}{N} \right)^2 \right] dx \\ &= e^{-ik\mu/N} \left(1 - \frac{k^2 \sigma^2}{2N^2} \right), \end{aligned}$$

のように計算される。第1行目から第2行目への数式変形のために(C.16)に注意した。第1行目の被積分関数において $x - \mu/N$ の1次の項の積分はゼロになり、ゼロ次と2次の項の積分のみが残っている。

手順2では、特性関数 $P_N(k)$ を N 乗する。ただし、 $N \rightarrow \infty$ の極限で考えると、特性関数の N 乗は、

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} [P_N(k)]^N &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[e^{-ik\mu/N} \left(1 - \frac{k^2 \sigma^2}{2N^2} \right) \right]^N \\ &= e^{-ik\mu} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{k^2 \sigma^2}{2N^2} \right)^N = \exp \left(-ik\mu - \frac{k^2 \sigma^2}{2N} \right), \end{aligned}$$

のように計算される。ここで、 $N \rightarrow \infty$ の極限で $(1 + x/N)^N \rightarrow e^x$ となる性質を利用した。この関数が、 N 個の確率変数の平均値でつくった新たな確率変数 X の確率分布関数の特性関数である。この特性関数を $\bar{P}_N(k)$ とし、対応する確率密度関数を $\bar{p}_N(X)$ としておこう。

手順3として、特性関数 $\bar{P}_N(k)$ を逆フーリエ変換して確率密度関数 $\bar{p}_N(X)$ を得る。しかし、 $\bar{P}_N(k)$ が平均 μ 、分散 σ^2/N の正規分布の特性関数になっていることに気づけば、実際に逆フーリエ変換を計算するまでもなく、

$$\bar{p}_N(X) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-N(X-\mu)^2/2\sigma^2},$$

が導かれある。この証明で仮定したもともとの確率密度関数 $p(x)$ は特に規定がない任意の関数である。関係式(C.16)さえ満足すれば $N \rightarrow \infty$ の極限で同一の結果が得られるのである。つまり、いかなる確率分布からでも十分に多数の確率変数を選び、それらの平均を新たな確率変数とすれば、その新たな確率変数は正規分布に近くなるのだ。