

元の版では高次元の幾何学で考察していたが、無用なため削除した。このため「幾何学的確率」という意味が見えにくくなったが、超球面上での所定の微小部分の面積比から確率を求めるという意味である。

N 個の粒子から成る理想気体の $3N$ 次元運動量空間の**等エネルギー球面**、あるいは $3N$ 次元速度 $\{v_i = p_i/m\}$ で表した球面

$$\sum_{i=1}^{3N} v_i^2 = \frac{2E}{m} \quad (1)$$

の上に確率が一様に分布したミクロカノニカル分布から、 **μ 次元部分空間**への射影を考える。簡略化のため当面の間は $n = 3N$, $a^2 = 2E/m$ としておく。変数を 2 部分に分けて

$$v^2 = v_1^2 + v_2^2 + \cdots + v_\mu^2, \quad \bar{v}^2 = v_{\mu+1}^2 + v_{\mu+2}^2 + \cdots + v_n^2 \quad (2)$$

とする。等方性を考慮して、体積要素¹ を

$$dv_1 \cdots dv_\mu = d^\mu v = S_\mu(v) dv, \quad dv_{\mu+1} \cdots dv_n = S_{n-\mu}(\bar{v}) d\bar{v} \quad (3)$$

確率分布を $P_\mu(v) d^\mu v$ とすれば、 μ 次元空間への射影は残りの $n - \mu$ 個の $\bar{v}$ 変数を積分して

$$P_\mu(v) d^\mu v = \left(\int_0^{\sqrt{a^2 - v^2}} P_n(\sqrt{v^2 + \bar{v}^2}) S_{n-\mu}(\bar{v}) d\bar{v} \right) d^\mu v \quad (4)$$

で与えられる。半径 a の n 次元球の表面で一様な確率分布は、規格化を考慮して

$$P_n(v) d^n v = \frac{1}{S_n(a)} \delta(v - a) S_n(v) dv \quad (5)$$

である。 n 次元の v をあらためて $\sqrt{v^2 + \bar{v}^2}$ とおき、デルタ関数の公式² を用いれば、 $\bar{v}$ の関数として

$$P_n(\sqrt{v^2 + \bar{v}^2}) = \frac{1}{S_n(a)} \delta(\sqrt{v^2 + \bar{v}^2} - a) = \frac{a}{S_n(a)\sqrt{a^2 - v^2}} \delta(\bar{v} - \sqrt{a^2 - v^2}) \quad (6)$$

となる。以上より μ 次元へ射影された確率分布が得られる³：

$$P_\mu(v) d^\mu v = \frac{a}{S_n(a)\sqrt{a^2 - v^2}} S_{n-\mu}(\sqrt{a^2 - v^2}) d^\mu v = \frac{S_{n-\mu}(1)}{S_n(1)} \left(1 - \frac{v^2}{a^2}\right)^{(n-\mu-2)/2} \frac{d^\mu v}{a^\mu} \quad (7)$$

粒子数 N ($n = 3N$) は十分大きいとするから、(7) は $v = 0$ にピークをもつ、幅 (太さ) が $v/a \sim 1/\sqrt{n}$ 程度の急激に減少する関数である。 $\mu \ll n$ として係数の Γ 関数に Stirling の公式を適用し、

$$\frac{S_{n-\mu}(1)}{S_n(1)} = \Gamma\left(\frac{n}{2}\right) / \pi^{\mu/2} \Gamma\left(\frac{n-\mu}{2}\right) \simeq \left(\frac{n}{2\pi}\right)^{\mu/2} \quad (8)$$

さらに公式

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (1 - \epsilon)^{1/\epsilon} = e^{-1} \quad (\text{e は Napier 数}) \quad (9)$$

¹ 半径 r の n 次元球の**表面積**： $S_n(r) = 2\pi^{n/2} r^{n-1} / \Gamma(n/2)$, **体積**： $V_n(r) = 2\pi^{n/2} r^n / n \Gamma(n/2) = (r/n) S_n(r)$,
ガンマ関数の漸化公式： $(n/2)\Gamma(n/2) = \Gamma((n+2)/2)$

² $f(x_0) = 0$ として、 $\delta(f(x)) = [(df/dx)^{-1}]_{x_0} \delta(x - x_0)$

³ $\mu = n - 2$ では、 $S_n(1) = 2\pi V_{n-2}(1)$, $S_2(1) = 2\pi$ より、 $P_{n-2}(v) = 1/V_{n-2}(a) = \text{constant}$ となる。現に、(4) で $P_n(v) = 1/V_n(a)$ ($v \leq a$) とすれば、デルタ関数など必要なく積分は簡単で、(7) で n を $n+2$ としたのと同じ結果が得られる。つまり、 $n \gg 1$ のときには**球内一様分布**から出発してもあとの結論は同じになることが分かる。

を用いれば, $\mu \ll n$ のとき

$$P_\mu(v) d^\mu v \simeq \left(\frac{n}{2\pi a^2} \right)^{\mu/2} \exp \left(-\frac{nv^2}{2a^2} \right) d^\mu v \quad (10)$$

と評価される。(2) を代入すれば各成分の確率の積の形になり, μ 個の成分は**確率的に独立**とみなせる。

$\mu = 3$ のとき, $n = 3N$, $a^2 = 2E/m$ にもどして 1 粒子の運動エネルギーの平均値を計算すれば

$$\frac{\overline{mv^2}}{2} = \frac{E}{N} \quad (11)$$

であり, 気体分子運動論による圧力の表現とボイル-シャルルの法則

$$\text{圧力 } P = \frac{N}{V} \overline{p_x v_x} = \frac{Nm}{3V} \overline{v^2}, \quad PV = NkT \quad (12)$$

により $E/N = 3kT/2$ と決まる。以上より個々の粒子の速度に関する **Maxwell 分布**が得られる：

$$f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = \frac{N}{V} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT} \right) dv_x dv_y dv_z \quad (13)$$

逆に, マクスウェル分布 (指数分布) がすべての v_i に適用できるとして

$$H = \frac{m}{2} (v_1^2 + v_2^2 + \cdots + v_n^2) = \frac{mv^2}{2} \quad (14)$$

の確率分布を考える。熱浴と同様に, さらに大きな粒子数 N とエネルギー $\mathcal{E}$, $A^2 = 2\mathcal{E}/m$ のミクロカノニカル分布から, $N (\ll N)$ 粒子部分空間への射影を考え, $\mu = n$ として (10) を適用すればよい。ただし, (10) の中の n/a^2 は今の場合 $3N/A^2$ であるが, 新たに パラメータ $E = (N/N)\mathcal{E}$ を導入して

$$\frac{3N}{A^2} = \frac{nm}{2E} \quad (15)$$

とすればよい。体積要素は H で表せば

$$d^n v = S_n(v) dv = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \left(\frac{2H}{m} \right)^{(n-2)/2} \frac{dH}{m} \quad (16)$$

であるから,

$$\begin{aligned} P(H) dH &= \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \left(\frac{nm}{4\pi E} \right)^{n/2} e^{-nH/2E} \left(\frac{2H}{m} \right)^{(n-2)/2} \frac{dH}{m} \\ &= \frac{(n/2)^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \underbrace{e^{-nH/2E} \left(\frac{H}{E} \right)^{(n-2)/2}}_{(*)} \frac{dH}{E} \end{aligned} \quad (17)$$

となる。すなわち, $n = 3N$, $E/N = 3kT/2$ とおけば (自明のことながら) **カノニカル分布**である。

急激に減少する指数関数と, 急激に増大するべき関数の積の形であり, $H/E = 1 - (2/n)$ で最大になる。実際, 係数を除く部分 (*) の対数を取り, $H/E = 1 + \xi$ とおけば, n がじゅうぶん大きいとき

$$\log (*) = -\frac{n}{2}(1 + \xi) + \frac{n-2}{2} \log(1 + \xi) \simeq -\frac{n}{2} - \frac{n\xi^2}{4}, \quad (*) \simeq e^{-n/2} e^{-n\xi^2/4} \quad (18)$$

と近似される。主要部分は $|\xi| \sim 1/\sqrt{n}$ までだから, ξ についての展開は最低次でじゅうぶんである。

ここで Stirling の公式

$$z \Gamma(z) = \Gamma(z+1) \simeq \sqrt{2\pi z} \left(\frac{z}{e}\right)^z \quad (19)$$

を用いれば、係数は $z = n/2$ として

$$\frac{(n/2)^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \simeq \sqrt{\frac{n}{4\pi}} e^{n/2} \quad (20)$$

となり、 $n \gg 1$ のとき

$$P(H) dH = \sqrt{\frac{n}{4\pi}} \exp \left[-\frac{n}{4} \left(\frac{H}{E} - 1 \right)^2 \right] \frac{dH}{E} \quad (21)$$

が得られる。これは、 $H = E$ に鋭いピーク（平均値 E に相対的な幅が $\sqrt{2/n}$ の程度）をもち、積分が 1 に規格化された関数だから、 $n \rightarrow \infty$ のとき、全エネルギーについて**ミクロカノニカル分布**となる：

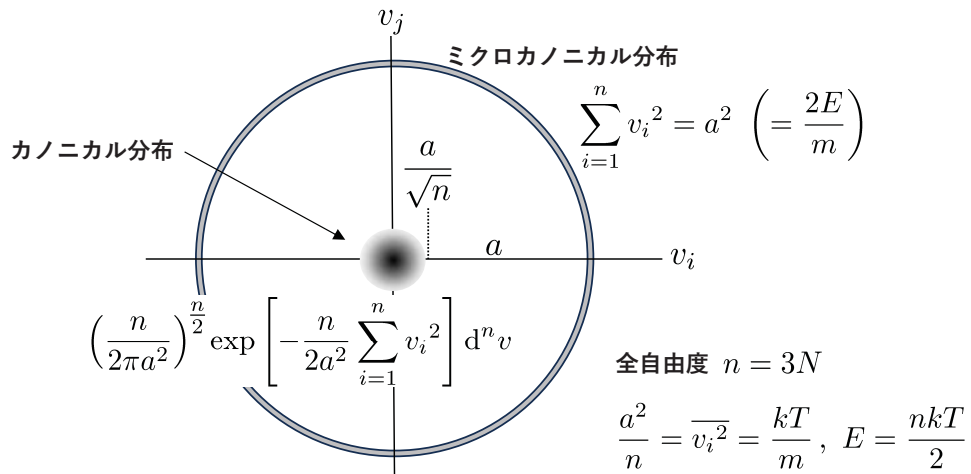
$$P(H) dH = \delta(H - E) dH \quad (22)$$

これを n 次元速度の大きさ $v = \sqrt{2H/m}$ について書けば、 $a = \sqrt{2E/m}$ として確率分布は

$$P(v) dv = \left(\frac{n}{\pi a^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{n}{a^2} (v - a)^2 \right] dv \simeq \delta(v - a) dv \quad (23)$$

となる。これは必ずしも n 次元速度空間で半径 a の球面上の一様分布⁴になることを意味するのではない。ここでは v の正規分布と v^{n-1} の積が、 $n \gg 1$ で「 $v = a$ の位置で幅が $n^{-1/2}a \ll a$ のピーク」となり、 v の関数として ほぼデルタ関数とみなせるということである。3 変数正規分布であるマクスウェル分布 (13) を速度の大きさの関数として描けば、0 ではない有限位置にピークをもつ、 $v^2 e^{-\beta v^2}$ の形になるのと同様である。

ミクロカノニカル分布は、位相空間（ n 次元運動量空間： $n = 3N$ ）では **n 次元球面上の一様分布**であって、等方的なため各成分は相関関数の意味での相関はないが拘束があり、決して独立ではない⁵。 $\mu \ll n$ の次元に射影して初めて確率的に独立とみなせるようになる。一方、カノニカル分布は、原点が中心の**等方的多変量正規分布**（有意な半径が上の n 次元球面の半径 a の $1/\sqrt{n}$ 程度であって、球面との重なりはほとんどない！）で各成分は最初から確率的に独立であり、全く様相が異なる。しかしながら $n \gg 1$ のときには、粒子の個性を考慮しない全エネルギー H の確率分布や 3 次元速度空間での**速度分布**（Maxwell 分布）を考えると、実際上、両者は統計的に等価である。



⁴ その場合は、(5) のように v^{n-1} を掛ける前からデルタ関数になっており、(23) の特別なケースである。

⁵ たとえ変数の一つを消去して残りの $n-1$ 個の独立変数で表現しても、半径 a の $n-1$ 次元球内で $P_{n-1}(v) = 2a/S_n(a)\sqrt{a^2 - v^2}$ であり、確率的には独立ではない。