

変分法とその応用 variation100803.tex

1 変分原理

物理学や工学の多くの分野において、ある関数を積分した量の極値を求めることにより、種々の法則が求められる。例：力学（解析力学）における作用積分とラグランジュ方程式ハミルトン方程式。電磁気学におけるポテンシャル積分とポアソン方程式。同時に、変分法は柔軟で実用的な近似法でもある。

1.1 関数をその積分が極値を与えるように求める一汎関数と変分

区間 $[A, B]$ においてある曲線を表わす関数 $f(x)$ を考える。その曲線の長さ L は微小区間 ds の A から B までの集合なので次のような線積分になる。

$$\begin{aligned}\text{曲線の長さ } L &= \int_{A \rightarrow B} ds \\ &= \int_a^b \sqrt{1 + (f'(x))^2} dx \equiv \text{汎関数 } I[f(x)].\end{aligned}\quad (1.1)$$

関数が $y = f(x)$ ($a \leq x \leq b$) で与えられる曲線の長さが L で、微小区間の長さ ds が次のように表されるためである：

$$\begin{aligned}ds &= \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} \\ &= dx \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2} \\ &= dx \sqrt{1 + (f'(x))^2}.\end{aligned}$$

これはある関数 $f(x)$ を与え、 x についての積分を行うと、ある 1 つの値 $L = I[f(x)]$ が決まると考えることができる。また、この場合の長さ L は与えられる $f(x)$ によって異なる。つまり、これまでのあるひとつの値 $x = a$ を与えると、関数の値 $f(a)$ が決定されることに対応して、 $I[f(x)]$ を関数 (function) の関数という意味で汎関数 (functional) と呼ばれる。

次に、 A と B を結ぶ最短の曲線を求めることを考えてみる。つまり、最小の $L = I[f(x)]$ を求めることを考える。

ここで、関数の最小値を与える点を求める方法を復習する。一般に最小値を与える点を直接決めるのは困難なので、まず、極値を与える点を探す。関数の極値

を探すときは、 x を少しだけ仮想的に動かして関数値の変化を検討する。つまり

$$\delta g(x) = g(x + \delta x) - g(x) \simeq \frac{dg(x)}{dx} \delta x \quad (1.2)$$

であるので、

$$\frac{dg(x)}{dx} \equiv g'(x) = 0 \quad (1.3)$$

を満たす点を求める。

同様の議論を汎関数について行う。つまり、最小値 $L = I[f(x)_{\min}]$ を直接求めるのは困難なので、関数 $f(x)$ を $\delta f(x)$ だけ仮想的に変化させたときの汎関数の仮想的な変化を考える

$$\delta I[f(x)] = I[f(x) + \delta f(x)] - I[f(x)] \quad (1.4)$$

$dg(x)$ を微分 (differential) と呼ぶことに対応して、この $\delta I[f(x)]$ を変分 (variation) と呼ぶ。

また、 $\delta g(x) = 0$ となる点を関数 $g(x)$ の極値と呼ぶことに対応して、 $\delta I[f(x)] = 0$ を与える関数を汎関数 $I[f(x)]$ の停留値を与える関数という。微分と変分の対応は次の通りである。

$$\begin{aligned} \text{関数 } g(x) &\iff \text{汎関数 } I[f(x)] \\ \text{独立変数 } x &\iff \text{独立関数 } f(x) \\ \text{微分 } dg(x) &\iff \text{変分 } \delta I[f(x)] \end{aligned}$$

1.2 条件付き変分法ーラグランジュの未定乗数法ー

変数 x, y の関数 $f(x, y)$ の極値問題とは任意の微小な仮想的な変化 (変分) $\delta x, \delta y$ に対する停留問題である。

$$\delta f \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \delta x + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \delta y \quad (1.5)$$

$$= 0. \quad (1.6)$$

二つの変分 $\delta x, \delta y$ が独立な場合には、上の式は

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (1.7)$$

という2つの式と等価である。

次に、2変数の間に関数 $g(x, y)$ で表されるような条件がある場合を考える。

$$g(x, y) = 0. \quad (1.8)$$

この場合、この条件の両辺の変分を考えると

$$\delta g = \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right) \delta x + \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right) \delta y = 0 \quad (1.9)$$

を満たす、すなわち、二つの変分 $\delta x, \delta y$ は独立ではなくなり、変分 δy は

$$\delta y = - \frac{\left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)} \delta x \quad (1.10)$$

のように、変分 δx により決まる。この式を式 (1.5) に代入すると、次のように、偏微分係数の比が x, y に依存しない定数となるので、その値を λ とおくと

$$\begin{aligned} 0 &= \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \frac{\left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)} \right] \delta x \\ \rightarrow \quad \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)} &= \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)} \equiv \lambda \end{aligned} \quad (1.11)$$

が得られる。これより、二つの条件

$$0 = \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) - \lambda \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right) \right], \quad 0 = \left[\left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) - \lambda \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right) \right] \quad (1.12)$$

が得られる。この式 (1.12) を、条件のない場合の極値条件 (1.14) と比較すると、次のように修正された関数

$$F(x, y) \equiv f(x, y) - \lambda g(x, y) \quad (1.13)$$

を用いれば、あたかも二つの変分 $\delta x, \delta y$ が独立であるかのように取り扱うことができる。すなわち、

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial y} = 0 \quad (1.14)$$

が成立する。この方法をラグランジュ未定乗数法という。以上の議論は3つ以上の変数がある場合にも直ちに拡張できる。

2 量子力学における変分法 1

ハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値の変分はシュレディンガー方程式と等価であることが以下のようにして分かる。

まず、変分関数 ϕ (波動関数) が規格化条件を満たしつつ、 $\hat{H}$ の期待値が停留値を取ることを考える。

$$\int \phi^* \phi dx = 1 \quad (2.1)$$

$$\delta \left(\int \phi^* \hat{H} \phi dx \right) = 0 \quad (2.2)$$

となる。このような条件付き変分問題はラグランジュの未定乗数法により、次の関数 (演算子の期待値) の変分と等価である。

$$\delta \left(\int \phi^* \hat{H} \phi dx - E \int \phi^* \phi dx \right) = 0 \quad (2.3)$$

ただし、

$$E \equiv \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi dx}{\int \phi^* \phi dx} \equiv \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \rightarrow E \langle \phi | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \quad (2.4)$$

である。ここで ϕ についての変分を考えると

$$\begin{aligned} \delta(E \langle \phi | \phi \rangle) &= \delta(\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle) \\ \rightarrow \delta E \langle \phi | \phi \rangle + E \delta \langle \phi | \phi \rangle &= \langle \delta \phi | \hat{H} | \phi \rangle + \langle \phi | \hat{H} | \delta \phi \rangle \\ \rightarrow \langle \delta \phi | \hat{H} - E | \phi \rangle + \langle \phi | \hat{H} - E | \delta \phi \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

となる。量子力学において、波動関数 ϕ は一般に複素量であるので $\langle \delta \phi |$ と $|\delta \phi \rangle$ は独立であると考えてよい (つまり、 ϕ^* と ϕ を別の独立関数であるとする)。

$$\langle \delta \phi | \hat{H} - E | \phi \rangle = 0, \quad \langle \phi | \hat{H} - E | \delta \phi \rangle = 0 \quad (2.6)$$

$\langle \delta \phi |$ と $|\delta \phi \rangle$ はともに任意であり、 $\hat{H}$ はエルミート演算子なので、

$$(\hat{H} - E) |\delta \phi \rangle = 0 \rightarrow \hat{H} |\phi \rangle = E |\phi \rangle \quad (2.7)$$

となり、シュレディンガー方程式が導かれる。

3 量子力学における変分法 2

ハミルトニアン $\hat{H}$ をの真の基底状態におけるエネルギー固有値 E_0 、それに対応する波動関数を ψ_0 とする。ここで、試行関数を φ_0 として規格化条件

$$\int \varphi_0^* \varphi_0 dx = 1 \quad (3.1)$$

を満足しているとする、その近似的なエネルギー固有値は関数 φ_0 の汎関数として

$$I[\varphi_0] \equiv \int \varphi_0^* \hat{H} \varphi_0 dx \geq E_0 \quad (3.2)$$

となる。ただし、上式で等号が成立するのは、 $\varphi_0 = \psi_0$ の場合に限る。

「状態の重ね合わせの原理」：関数 ψ_λ と関数 ψ_μ が共に演算子 $\hat{P}$ の固有関数である場合、その任意の 1 次結合 ($C_\lambda \psi_\lambda + C_\mu \psi_\mu$) もまた $\hat{P}$ の固有関数である。

(証明)

$\hat{H}$ の真の固有値と波動関数の組を $E_i, \psi_i, (i = 1, 2, \dots)$ として、 φ_0 を ψ_i で展開すると

$$\varphi_0 = C_0 \psi_0 + C_1 \psi_1 + \dots \equiv \sum_i C_i \psi_i, \quad (3.3)$$

$$\sum_i |C_i|^2 = 1 \quad (3.4)$$

となる。ここで、

$$\hat{H} \psi_i = E_i \psi_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.5)$$

である。また、 $\{\psi_i\}$ の直交規格性

$$\int \psi_i^* \psi_j dx = \delta_{ij} \quad (3.6)$$

を用いて

$$\begin{aligned} I[\varphi_0] = \int \varphi_0^* \hat{H} \varphi_0 dx &= \int \left(\sum_i C_i^* \psi_i^* \right) \hat{H} \left(\sum_j C_j \psi_j \right) dx \\ &= \sum_{ij} C_i^* C_j E_j \delta_{ij} = \sum_i |C_i|^2 E_i \end{aligned} \quad (3.7)$$

となる。ここで、 $E_1, E_2, \dots \geq E_0$ なので

$$I[\varphi_0] = \sum_i |C_i|^2 E_i \geq \sum_i |C_i|^2 E_0 = E_0 \quad (3.8)$$

となる。以上より、 φ_0 が E_0 に対応する真の固有関数 ψ_0 と一致するときに限り積分

$$I[\varphi_0] = \int \varphi_0^* \hat{H} \varphi_0 dx$$

が最小値 E_0 を与える。

また、試行関数 φ_0 が規格化されていない場合、式 (3.2) は次のようになる。

$$I[\varphi_0] = \frac{\int \varphi_0^* \hat{H} \varphi_0 dx}{\int \varphi_0^* \varphi_0 dx} \geq E_0 \quad (3.9)$$

4 変分法の適用手順

量子力学の問題には少数の場合を除いて、解析的に厳密な解は見つかっていない。ここでは、変分原理を用いてハミルトニアン $\hat{H}$ の最低固有値とその固有関数を近似的に求める。まず、量子力学の問題に対する変分法の適用方法について具体的なイメージを把握するために、大体の適用の手順を示す。

1. まず、あるパラメタ α を含む試行的な波動関数 (変分関数) $\phi_\alpha(x)$ を適当に選ぶ。
2. その $\phi_\alpha(x)$ を用いてエネルギー期待値

$$E(\alpha) \equiv \frac{\int \phi_\alpha^*(x) \hat{H} \phi_\alpha(x) dx}{\int \phi_\alpha^*(x) \phi_\alpha(x) dx} \quad (4.1)$$

を計算する。

3. パラメタ α について、求められた $E(\alpha)$ の変分を行い停留値をとる。つまり

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0 \quad (4.2)$$

を計算する。

4. 停留問題で得られた値や式などの結果を $E(\alpha)$ に代入することで、真のエネルギー期待値 E の近似値を求めることができる。また、そのときの $\phi_\alpha(x)$ は真の波動関数 $\psi(x)$ の近似的な波動関数になる。

試行関数の選び方

1. 正しい波動関数 $\psi(x)$ の性質をできるだけ反映すること
2. ハミルトニアンの期待値を求める計算が解析的に得られるくらいに単純な形であることが望ましい。