変分法談義

KENZOU

2013 年 1 月 19 日

目 次

第1話　変分法の基礎理論

1.1　変分法とはなんだ

- コニー：こんにちわ〜K さん。いよいよ冬本番で寒さが厳しくなってきたわね。ところで最近『粘菌による迷路シミュレーション』という記事が目に留まったので少し読んでみたの。この記事を要約するとアメーバ状の単細胞生物である粘菌を迷路の入り口に置き、迷路の出口に餌を置いておくと『迷路の最短ルートを解く』という複雑な作業を粘菌はいとも簡単にやってのける。どのようにやってのけるかというと

  1. **まず、粘菌は迷路のあらゆる通路に広がって餌にたどり着く。**
  2. **餌への最短経路以外に広がった粘菌部分を収縮させる。**
  3. **最終的に入り口から出口までの最短ルートの一本道に粘菌が通る。**

  というステップを踏むらしいわね。このことは 2000 年に理化学研究所・北海道大学の共同研究で世界で初めて発見されたのね。**自己組織化現象**というらしいのだけど、これって変分法そのものを地で行くようなものね。面白いなぁ〜っと感動したわけ、と同時に解析力学や量子力学で変分法を少し勉強したけど、あらためて変分法を再学習してみたいなぁ〜という気になって K さんを尋ねてきたわけなの。

- K氏：そうなんだ。ボクも以前『粘菌の迷路シュミレーション』の新聞記事を読んだことがある。脳や神経系を持たない単細胞生物の粘菌がナント迷路を最短ルートで解くという非常に高度なことをやってのける。生命の底深い力というか、そういうのに感心と感動を覚えるね。粘菌が最短ルートを見つけるやりかたはコニーが言ったように、まさに変分原理を地でいくような感じだ。ところで、粘菌に触発されて (笑い)、変分法を再学習したいということだね。まぁ何にでも触発されるのは結構なことだ。以前「変分小考」というレポートを UP していたけど、読んだかかな。それは兎も角として、まず変分法とは？という辺りから話をはじめようか。

- コニー：よろしくお願いします。

1.1.1　変分法とは

- K氏：変分というのは歴史的に見ると定積分の極値問題に端を発しているんだね。未知な関数 $y(x)$ とその導関数 $y'(x)$ を含む式、いまこれを $F(x,y,y')$ としよう。$y(x)$ は 2 回連続微分可能と仮定する。変分問題というのは、この関数の積分 $I[y(x)] = \displaystyle\int_{x_1}^{x_2} F(x,y,y')dx$ が**停留値**をとるような関数 $y(x)$ を求める問題のことをいう。停留値というのはいまのところ極値と考えておけばいい。

  $I[y(x)]$ は関数 $y(x)$ の関数だね。このような関数の関数を**汎関数**と呼んでいる。そして変数に相当する関数 $y(x)$ を**変関数**という。変関数 $y(x)$ をいろいろ変えてやるとそれに伴って $I[y(x)]$ の値も変化する。先ほどの粘菌の話で言えば、$I[y(x)]$ は出発点から出口までの距離で、$y(x)$ はそのルートと捉えればいいと思う。そしていろいろなルート $y(x)$ の中で $I[y(x)]$ を最短にするルート

$y(x)$ を見つけていこうというのが変分法の問題で、言い換えると**汎関数の極大値や極小値（停留値）を求める問題**ということだね。

- コニー：関数 $f(x)$ の場合 $x = x_0$ で極値をとるための必要条件は

$$\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_0} = f'(x_0) = 0 \tag{1.1.1}$$

だったけど、これだけでは $x = x_0$ で $f(x)$ が極大値をとるか極小値をとるかは分からない。もう一回微分した $f''(x_0)$ の値の符号で極大か極小かが分かる。$f''(x_0) = 0$ となればそれは変曲点になるということだったわね。

$$\begin{cases} f''(x_0) > 0 & : x = x_0 \text{で}\ f(x)\ \text{は極小値をとる} \\ f''(x_0) < 0 & : x = x_0 \text{で}\ f(x)\ \text{は極大値をとる} \\ f''(x_0) = 0 & : x = x_0 \text{は変曲点となる} \end{cases} \tag{1.1.2}$$

- K 氏：そうだね。関数 $f(x)$ が $x = x_0$ で極値をとるということは $x = x_0$ の近傍で局所的な最大値か最小値をとるということだ。微分の定義は

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = 0 \tag{1.1.3}$$

これは $x = x_0$ の無限小近傍 $x_0 + \Delta x$ では $f(x_0 + \Delta x) = f(x_0)$ となるということを意味しているわけだね。この場合関数は $x = x_0$ で**停留値**をもつという。$x = x_0$ の近傍での関数の値は変化しない、つまり値が停留している。そして汎関数 $I[y]$ に停留値を与える関数 $y(x)$ を**停留関数**という。

- コニー：なるほど。。。ところで、先ほどの汎関数 $I[y]$ が極値というか停留値を持つ必要条件は

$$\frac{dI[y]}{dy} = 0 \tag{1.1.4}$$

として、この式を解いて停留関数 $y(x)$ を求めるというのは駄目かしら？

- K 氏：うん、そのように考えたいところだけど、変分法の場合いろいろな関数（**比較関数**）をあてがって <u>$I[y]$ が停留値をとるような停留関数 $y(x)$ を見つける</u> ということなので、それでは駄目なんだ。関数の極値を求める微分法と汎関数の停留値を求める変分法の違いが次第に明らかになってくるので、今しばらく我慢して頂戴。もっとも関数 F が y' を含まない $F = F(x, y)$ の場合にはコニーが言ったようなステップになる。それは第 2 話の§2.1 ででてくる。

1.1.2　変分とは

- K 氏：さて、ということで具体的に

$$I[y] = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y, y')dx \tag{1.1.5}$$

が停留値を持つような停留関数 $y(x)$ を見つけていくことにしよう。その前に“ 変分とは何だ ”ということをあらためて再確認しておこう。関数 $y(x)$ は A(x_1, y_1)、B(x_2, y_2) 両端で固定されており、両端での y 値が次のように与えられていると仮定する。

$$y(x_1) = y_1, \quad y(x_2) = y_2 \tag{1.1.6}$$

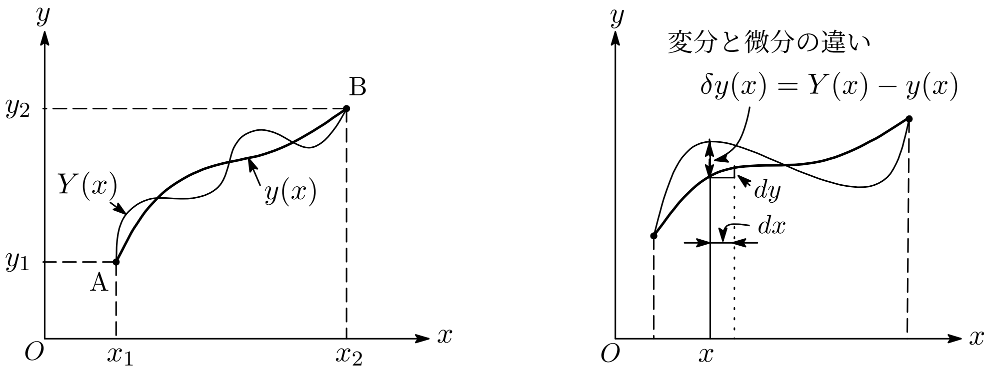
$I[y]$ の値は両端 A、B を結ぶ道筋、つまり比較関数によってその値が変わる。停留関数 $y(x)$ が一つ存在するための必要条件は、この関数からわずかに外れたもう一つの関数 $y = Y(x)$ による $I[Y]$ 値が $I[y] = I[Y]$ となることだ。そこでパラメータ ε を持つ次の新しい関数を考える。

$$Y(x, \varepsilon) = y(x) + \varepsilon\eta(x) \tag{1.1.7}$$

$\eta(x)$ は積分区間の両端で

$$\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0 \tag{1.1.8}$$

を満たす連続微分可能な関数であれば何でもよい。



積分区間内の任意の 1 点 x での $Y(x, \varepsilon)$ と $y(x)$ の差を関数 $y(x)$ の**変分**といい δy で表す。

$$\delta y = Y(x, \varepsilon) - y(x) = \varepsilon\eta(x) \tag{1.1.9}$$

パラメータ ε はゼロに近づけられるので変分は無限小の変化を表し、ε は任意に変化させてよいので δy は関数 $y(x)$ の**仮想的変化**となる。微分で登場する dy と変分 δy の違いを説明しておくと、dy というのは独立変数 x が dx だけ変化した際の、関数 $y(x)$ の実際の無限小変化を表すが、δy は独立変数 x の変化とは関係なく関数 $y(x)$ の無限小の変化を表し、言い換えると x の変化を止めた $y(x)$ の仮想的変化[1]ということで、常に $\delta x = 0$ だ。

このように、変分 δ と微分演算子 d/dx はもともと異なる操作なので**交換可能**だ。これは次のようなことからも分かる。点 x における関数 $Y(x, \varepsilon)$, $y(x)$ のそれぞれの微分の差を $\delta(dy/dx)$ とすると

$$\delta\left(\frac{dy}{dx}\right) = \frac{dY}{dx} - \frac{dy}{dx} = \frac{d}{dx}(Y - y) = \frac{d}{dx}(\delta y) \tag{1.1.10}$$

となるので、δ と d/dx は作用の順番を変えてもよい。あるいは次のようにも言える。(1.1.9) で見たように、関数 $y(x)$ の変分は新しい関数 $\varepsilon\eta(x)$ を定義する。変分の導関数を求めると

$$\frac{d}{dx}\delta y = \frac{d}{dx}\{Y(x, \varepsilon) - y(x)\} = \frac{d}{dx}\varepsilon\eta(x) = \varepsilon\eta'(x) \tag{1.1.11}$$

となり、一方、関数 $y(x)$ の導関数の変分は

$$\delta\left(\frac{dy}{dx}\right) = Y' - y' = (y'(x) + \varepsilon\eta'(x)) - y'(x) = \varepsilon\eta'(x) \tag{1.1.12}$$

となるので

$$\frac{d}{dx}\delta y = \delta\frac{d}{dx}y \tag{1.1.13}$$

[1] 変分記号の δ はその仮想的特長を強調するためにラグランジュが導入した。

これから 変分の導関数と導関数の変分は等しい ことが分かる。

変分 δ と微分演算子 d/dx は可換ということに加え、**変分と積分演算も可換**であることを示しておこう。定積分の変分は、新しい関数 $\mathcal{F}(x)$ を用いたときの定積分と元の関数 $F(x)$ を用いたときの定積分の差によって定義される。

$$\delta \int_a^b F(x)dx = \int_a^b \mathcal{F}(x)dx - \int_a^b F(x)dx \tag{1.1.14}$$

右辺は

$$\int_a^b \mathcal{F}(x)dx - \int_a^b F(x)dx = \int_a^b \{\mathcal{F}(x)dx - F(x)\}dx$$

となるので

$$\begin{aligned} &\delta \int_a^b F(x)dx = \int_a^b \{\mathcal{F}(x) - F(x)\}dx = \int_a^b \delta F(x)dx \\ &\therefore \quad \delta \int_a^b F(x)dx = \int_a^b \delta F(x)dx \end{aligned} \tag{1.1.15}$$

つまり、定積分の変分は変分の定積分に等しい。 以上で“ 変分 ”という概念がつかめただろうか。

- コニー：変分 δ は仮想的変化をとる操作ということね。K さんが解析力学のレポートに書かれていた「映画はフィルムのコマ送りで動いているように見えますね。ところでその中から 1 コマ取り出して、そこに写っているブツを少し動かしてやる。それが仮想変位というものです。」というフレーズを思い出したわ。

1.1.3　変分計算

- K 氏：お待たせしました、変分計算の話に入ろう。汎関数 $I[y]$ の変分を次式で定義する。

$$\delta I[y] = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx - \int_{x_1}^{x_2} F(x, y, y')dx \tag{1.1.16}$$

y をわずかにずらして $y+\varepsilon\eta$ としたとき、y' の方も $y'+\varepsilon\eta'$ とずれる、つまり y と y' はそれぞれ独立変数ではない。案外このことを見落としている場合があるので念のため注意しておこう[2]。

さて、右辺第 1 項をテーラー展開して整理すると

$$\begin{aligned} \delta I &= \varepsilon \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta + \frac{\partial F}{\partial y'}\eta' \right) dx + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}\eta^2 + 2\frac{\partial^2 F}{\partial y \partial y'}\eta\eta' + \frac{\partial^2 F}{\partial y'^2}\eta'^2 \right) dx + O(\varepsilon^3) \\ &= \varepsilon\delta^1 I + \varepsilon^2\delta^2 I + O(\varepsilon^3) \end{aligned} \tag{1.1.17}$$

となる。ただし、

$$\delta^1 I \equiv \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta + \frac{\partial F}{\partial y'}\eta' \right) dx、\quad \delta^2 I \equiv \frac{1}{2} \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}\eta^2 + 2\frac{\partial^2 F}{\partial y \partial y'}\eta\eta' + \frac{\partial^2 F}{\partial y'^2}\eta'^2 \right) dx \tag{1.1.18}$$

$\delta^1 I$ を第 1 変分、$\delta^2 I$ を第 2 変分という。第 2 変分以上の高次の項は $\varepsilon \to 0$ のとき無視できるので、第 1 変分だけを考えればよい。したがって、第 1 変分がゼロ

$$\delta^1 I = 0 \tag{1.1.19}$$

[2] 解析力学では q と $\dot{q}$ を独立変数とみなす !?

ということが積分 I が停留値を持つ必要条件となる。以後第1変分の上付き添え字は省略する。

$$
\begin{aligned}
\delta I &= \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial F}{\partial y}\eta dx + \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial F}{\partial y'}\eta' dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial F}{\partial y}\eta dx + \left[\frac{\partial F}{\partial y'}\eta\right]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx \\
&= \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial F}{\partial y}\eta dx - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx = \int_{x_1}^{x_2} \left\{\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\right\}\eta dx
\end{aligned}
\tag{1.1.20}
$$

この展開は部分積分と両端固定の境界条件を使った。$\eta(x)$ は任意の関数なので $\delta I = 0$ が成り立つためには

$$
\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \tag{1.1.21}
$$

でなければならない。(1.1.21) はオイラー・ラグランジュ（以下 EL と記す）の方程式と呼ばれる。

尚、EL の方程式を導くやり方として別の方法もある。

$$
I[Y] = \int_{x_1}^{x_2} F(x, Y, Y')dx = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx, \quad Y = y + \varepsilon\eta \tag{1.1.22}
$$

とおいて、汎関数 $I[Y]$ をパラメータ ε の普通の関数とみなす。そこで $I(\varepsilon)$ を ε で微分したものを0とおいて $I(\varepsilon)$ の極値を求め、$\varepsilon = 0$ とすれば停留関数 $y(x)$ が満たす方程式がでてくる。

$$
\left.\frac{d}{d\varepsilon} I(y+\varepsilon\eta)\right|_{\varepsilon=0} = \left.\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial\varepsilon} F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx\right|_{\varepsilon=0} = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta + \frac{\partial F}{\partial y'}\eta'\right)dx = 0 \tag{1.1.23}
$$

最後の式は (1.1.18) ででてきた第1変分と同じ式だね。あとは部分積分と境界条件より求める EL の式がでてくる。

- コニー：$\delta I = 0$ から停留値が求まるけど、この値は最小値か最大値かは分からない。第2変分の符号をチェックする必要はないのかしら。
- K氏：確かに、コニーが指摘したように停留値が最小化どうかの判定は第2変分 $\delta^2 I$ の符号でなされる。$\delta^2 I \geq 0$ であれば最小値となり[3]、$\delta^2 I < 0$ であれば最大値となるわけだ。しかし、大抵は物理的考察により最小値の存在が予想されるので、あえて第2変分の符号までは普通考慮しないんだ。必要があれば第2変分の符号をチェックすればいい。
- コニー：なるほど、現実的な話ね。
- K氏：さて、ここらで第1話はお開きとしよう。話の締めくくりとして、復習をかねて次の問題をやっておこう。

• **Ex-1：** 平面内の2点間の最短距離は直線であることを証明せよ。

• **ans-1：** 線素を ds とすると $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = \sqrt{1 + y'^2}\, dx$ なので2点間の距離 s は

$$
s = \int_{x_1}^{x_2} ds = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + y'^2} dx
$$

$\delta s = 0$ となる停留関数 $y(x)$ は次の EL 方程式を解いて得られる。$F = \sqrt{1 + y'^2}$ とおけば

$$
\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) = \frac{d}{dx}\left(\frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}}\right) = 0, \quad \therefore\ \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = c, \quad y' = \pm\frac{c}{\sqrt{1 - c^2}}
$$

[3] ルジャンドルの判定条件と呼ばれる。

y' は定数値をとり、これから直線の式

$$y = Ax + B \qquad (A, B\text{：定数})$$

を得る。定数 A、B は両端固定の境界条件より決まる。

第2話　オイラー・ラグランジュ方程式

- K氏：第2話に入ったね。ここでは EL 方程式を解いていくに際して、関数 F の形によって効率的に処理できる方法を紹介していく。 EL 方程式を具体的に解いていく場合、(1.1.21) を真正面から取っ組んでもいいのだけど、計算が結構面倒になる場合が多いんだ。関数 $F(x,y,y')$ が具体的にどのような形をしているのか、それに応じた EL 方程式を整理しておくと、のちのち大変重宝する。例えば「最速降下線の問題」は EL 方程式 (1.1.21) を解けばいいのだが、実際やってみると結構面倒な計算になる。このような場合にこのセクションの話が生きてくる。それでは早速はじめよう。

2.1　$F(x,y,y')$ がいろいろな場合

- K氏：まず、F として独立変数が1個で、1次の導関数を含む $F=F(x,y,y')$ の場合を考える。EL 方程式の各項は

$$
\begin{aligned}
d\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)dx + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)dy + \frac{\partial}{\partial y'}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)dy' \\
\therefore\quad \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)y' + \frac{\partial}{\partial y'}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)y'' \\
&= F_{xy'} + F_{yy'}y' + F_{y'y'}y''
\end{aligned}
\tag{2.1.1}
$$

と展開できる。したがって EL の式は

$$
\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \quad\longrightarrow\quad F_y - F_{xy'} - F_{yy'}y' - F_{y'y'}y'' = 0 \tag{2.1.2}
$$

となる。尚、2つ以上の添え字については

$$
F_{xy'} \equiv \frac{\partial}{\partial x}F_{y'} \equiv \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right),\ \texttt{etc} \tag{2.1.3}
$$

を表すものとする。
(2.1.2) より、具体的な関数形に対応した EL 方程式は次のようになる。

$$
\begin{cases}
(\quad) F = F(x,y) & : \ F_y = 0 & F = \texttt{const} \\
(\quad) F = F(x,y') & : \ \dfrac{d}{dx}F_{y'} = 0 & F_{y'} = \texttt{const} \\
(\quad) F = F(y') & : \ F_{y'y'}y'' = 0 & F_{y'y'} = 0 \ \texttt{or}\ y'' = 0 \longrightarrow y = Ax + B \\
(\quad) F = F(y,y') & : \ \dfrac{d}{dx}(F - y'F_{y'}) = 0 & F - y'F_{y'} = \texttt{const}
\end{cases}
\tag{2.1.4}
$$

(　)、(　)、(　) は明らかなので、(　) を証明しておく。x を陽に含まないので (2.1.2) の第2項は0となり

$$
F_y - F_{yy'}y' - F_{y'y'}y'' = 0 \tag{2.1.5}
$$

一方、$F-y'F_{y'}$ を x で微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}(F-y'F_{y'}) &= \frac{d}{dx}F(y,y') - \frac{d}{dx}\{y'F_{y'}(y,y')\} \\ &= F_y y' + F_{y'}y'' - y''F_{y'} - F_{yy'}y'^2 - F_{y'y'}y'y'' \\ &= y'(F_y - F_{yy'}y' - F_{y'y'}y'')\end{aligned} \tag{2.1.6}$$

これは (2.1.5) より 0 となる。したがって EL の式は

$$\frac{d}{dx}(F-y'F_{y'}) = 0 \longrightarrow F-y'F_{y'} = \texttt{const}$$

となる。

- コニー：具体的な問題に適用すればどうなるのかしら。
- K 氏：うん、(　) のケースは第 1 話の最後でやった **Ex-1** がそれに当たる。(　) のケースとして最速降下線の問題をとりあげよう。

• **Ex-2：** x 軸を水平方向、y 軸を鉛直方向に取った座標系で、質点が滑らかな曲線に沿って原点 $O(0,0)$ から A 点 (a,b) まで滑り落ちるとする。最小の時間で降下する曲線の形を見出せ。

• **ans-2：** 質点の質量を m、速さを v、重力加速度を g とする。エネルギー保存則より

$$\frac{1}{2}mv^2 = mgy, \quad \therefore\ v = \sqrt{2gy}$$

$$v = \frac{ds}{dt} = \frac{\sqrt{dx^2+dy^2}}{dt}, \quad \therefore\ dt = \frac{\sqrt{dx^2+dy^2}}{v} = \sqrt{\frac{1+y'^2}{2gy}}dx$$

原点から A 点まで滑り落ちるに要する時間を t とすると

$$t = \int_0^t dt = \frac{1}{\sqrt{2g}}\int_0^a \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}}dx \equiv \frac{1}{\sqrt{2g}}\int_0^a F(y,y')dx, \quad F(y,y') = \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} \tag{2.1.7}$$

この関数形は (　) のケースに当たるので、EL 方程式は

$$F-y'F_{y'} = \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{y}} - \frac{y'^2}{\sqrt{y(1+y'^2)}} = c, \quad \therefore\ \frac{1}{\sqrt{y(1+y'^2)}} = \texttt{const}$$

となる[1]。両辺を 2 乗して整理すると

$$y(1+y'^2) = c_1 \quad (c_1: \text{定数}) \tag{2.1.8}$$

パラメータ α を使って

$$y' = \frac{dy}{dx} = \cot\alpha \tag{2.1.9}$$

と置くと (2.1.8) は

$$y = \frac{c_1}{1+\cot^2\alpha} = c_1\sin^2\alpha = \frac{1}{2}c_1(1-\cos 2\alpha), \quad \therefore \quad dy = 2c_1\sin\alpha\cos\alpha d\alpha \tag{2.1.10}$$

[1] 試しに (1.1.21) から計算してみられたし。大変厄介な計算になる。ここでのやり方の有難味が分かる。

(2.1.9),(2.1.10) より

$$dx = \frac{dy}{\cot\alpha} = 2c_1 \sin^2\alpha d\alpha = c_1(1-\cos 2\alpha)d\alpha \tag{2.1.11}$$

これを積分して

$$x = c_1\left(\alpha - \frac{1}{2}\sin 2\alpha\right) + c_2 = \frac{1}{2}c_1\left(2\alpha - \sin 2\alpha\right) + c_2 \quad (c_2 : \text{定数}) \tag{2.1.12}$$

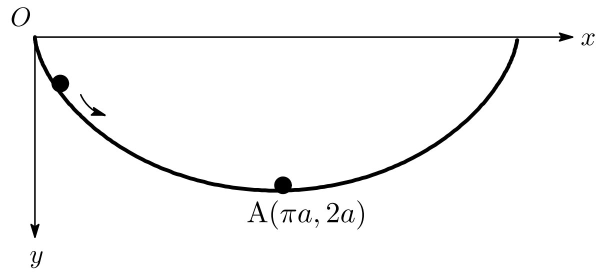
得られた結果を整理すると

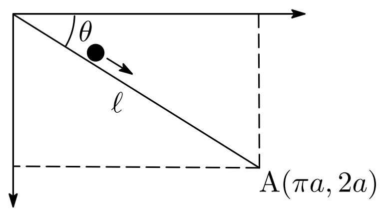
$$\begin{cases} x = \dfrac{1}{2}c_1\left(2\alpha - \sin 2\alpha\right) + c_2 \\ y = \dfrac{1}{2}c_1(1-\cos 2\alpha) \end{cases} \tag{2.1.13}$$

質点は原点 $(0,0)$ を通ることから原点では $\alpha = 0$ となり、上式の第 1 式より $c_2 = 0$。$p = 2\alpha$ とおくと、求める停留関数は

$$\begin{cases} x = \dfrac{1}{2}c_1(p - \sin p) \\ y = \dfrac{1}{2}c_1(1-\cos p) \end{cases} \tag{2.1.14}$$

これはサイクロイド曲線を表す。





- K氏：折角だから原点から初速度 0 で最落下点 $\mathrm{A}(\pi a, 2a)$ まで降下に要する時間を計算してみよう。(2.1.7) より

$$t = \frac{1}{\sqrt{2g}}\int_0^{\pi a}\sqrt{\frac{1+y'^2}{y}}dx = \sqrt{\frac{a}{g}}\int_0^{\pi a}\frac{1}{y}dx \tag{2.1.15}$$

また、$dx = a(1-\cos p)dp = ydp$ なので、上式に代入すると

$$t = \sqrt{\frac{a}{g}}\int_0^{\pi}dp = \pi\sqrt{\frac{a}{g}} \tag{2.1.16}$$

を得る。一方、原点と A を結ぶ斜面上を滑り落ちる所要時間を T とすると $\ell = \frac{1}{2}\alpha T^2, (\alpha = g\sin\theta)$ より

$$T = \sqrt{\frac{2\ell}{\alpha}} = \frac{2}{\sin\theta}\sqrt{\frac{a}{g}} = \sqrt{\pi^2+2^2}\sqrt{\frac{a}{g}} \tag{2.1.17}$$

$t/T \doteqdot 0.84$ となるので、サイクロイド曲線に沿って滑ったほうが斜面を滑るより約 16%程度早く滑り落ちることになる。

2.2 高次導関数を含む場合

- K氏：次に汎関数が高次導関数を含んでいる場合を考えよう。まず、2 次導関数 y'' までを含んだ場合を考える。汎関数として

$$I[y]=\int_{x_1}^{x_2}F(x,y,y',y'')dx \tag{2.2.1}$$

を取りあげよう。変分計算のやり方は第 1 話の 1.1.3 変分計算でやったのと同じで、境界条件として

$$\begin{cases} y(x_1)=y_1, \quad y'(x_1)=y'_1 \\ y(x_2)=y_2, \quad y'(x_2)=y'_2 \end{cases} \tag{2.2.2}$$

としておく。I の変分は

$$\begin{aligned}\delta I&=\int_{x_1}^{x_2}F(x,y+\varepsilon\eta,y'+\varepsilon\eta',y''+\varepsilon\eta'')dx-\int_{x_1}^{x_2}F(x,y,y',y'')dx\\&=\varepsilon\int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta+\frac{\partial F}{\partial y'}\eta'+\frac{\partial F}{\partial y''}\eta''\right)dx\\&+\frac{1}{2}\varepsilon^2\int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}\eta^2+\frac{\partial^2 F}{\partial y'^2}\eta'^2+\frac{\partial^2 F}{\partial y''^2}\eta''^2+2\frac{\partial^2 F}{\partial y\partial y'}\eta\eta'+2\frac{\partial^2 F}{\partial y'\partial y''}\eta'\eta''+2\frac{\partial^2 F}{\partial y\partial y''}\eta\eta''\right)dx\\&+O(\varepsilon^3)\\&=\varepsilon\delta^1 I+\varepsilon^2\delta^2 I+O(\varepsilon^3)\end{aligned} \tag{2.2.3}$$

となり、これから第 1 変分は

$$\delta I=\int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta+\frac{\partial F}{\partial y'}\eta'+\frac{\partial F}{\partial y''}\eta''\right)dx \tag{2.2.4}$$

となる。右辺第 2 項を部分積分すると、$\eta(x_2)=\eta(x_1)=0$ に注意して

$$\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y'}\eta' dx=\left[\frac{\partial F}{\partial y'}\eta\right]_{x_1}^{x_2}-\int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx=-\int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx \tag{2.2.5}$$

次に第 3 項を部分積分すると、$\eta'(x_2)=\eta'(x_1)=0$ に注意して

$$\begin{aligned}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y''}\eta'' dx&=\left[\frac{\partial F}{\partial y''}\eta'\right]_{x_1}^{x_2}-\int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)\eta' dx=-\int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)\eta' dx\\&=-\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)\eta\right]_{x_1}^{x_2}+\int_{x_1}^{x_2}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)\eta dx=\int_{x_1}^{x_2}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)\eta dx\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

となる。以上の結果から第 1 変分は

$$\delta I=\int_{x_1}^{x_2}\left\{\frac{\partial F}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)+\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)\right\}\eta dx \tag{2.2.7}$$

と表される。η は任意の関数なので $\delta I=0$ となるには

$$\frac{\partial F}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)+\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right)=0 \tag{2.2.8}$$

でなければならない。これが EL 方程式だね。

　それでは n 次導関数を含む $F=F(x,y,y',y'',\cdots,y^{(n)})$ の場合の EL 方程式はどうなるか、コニーやってみるかい。

- コニー：そうね、いまの議論から類推して、n 次導関数を含む $F = F(x, y, y', y'', \cdots, y^{(n)})$ の場合に拡張すれば、第 1 変分は

$$\delta^1 I = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta + \frac{\partial F}{\partial y'}\eta' + \frac{\partial F}{\partial y''}\eta'' + \cdots + \frac{\partial F}{\partial y^{(n)}}\eta^{(n)} \right) dx \tag{2.2.9}$$

となる。任意の関数 $\eta(x)$ とその高次導関数は両端 A、B で 0 という条件で部分積分を繰り返していくと第 1 変分として

$$\delta I = \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) + \frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right) - \cdots + (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}\left(\frac{\partial F}{\partial y^{(n)}}\right) \right\} \eta dx \tag{2.2.10}$$

が得られる。汎関数 I が停留値を持つ ($\delta I = 0$) 必要条件は上式の { } 内を 0 とおけばよいので、EL 方程式として

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) + \frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{\partial F}{\partial y''}\right) - \cdots + (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}\left(\frac{\partial F}{\partial y^{(n)}}\right) = 0 \tag{2.2.11}$$

が得られる。この微分方程式の境界条件は

$$\begin{cases} y(x_1) = y_1, \quad y'(x_1) = y'_1, \quad \cdots, \quad y^{(n)}(x_1) = y_1^{(n)} \\ y(x_2) = y_2, \quad y'(x_2) = y'_2, \quad \cdots, \quad y^{(n)}(x_2) = y_2^{(n)} \end{cases} \tag{2.2.12}$$

とおくのね。

- K 氏：その通りだ。

2.3　多従属変数を含む場合

- K 氏：次に独立変数 x は 1 個で多くの従属変数（関数 $y_i(x)$ を従属変数として取り扱う) を含む

$$I = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y_1, y_2, \cdots, y_n, y'_1, y'_2, \cdots, y'_n) dx \tag{2.3.1}$$

の場合を考えよう。適当な一つの変数 y_k を選び、残りの変数は一定に保ちながらこの変数を少し動かした場合の変分を $\delta_k I$ としよう。具体的には

$$Y_k(x, \varepsilon) = y_k(x) + \varepsilon\eta_k(x) \tag{2.3.2}$$

と置くわけだね。$\eta_k(x)$ は両端 A、B で $\eta_k(x_1) = \eta_k(x_2) = 0$ を満たす連続微分可能な任意の関数で、添え字の異なる $\eta_k(x)$ は互いに独立とする。そうすると $\delta I_k = 0$ より、EL 方程式として

$$\frac{\partial F}{\partial y_k} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'_k}\right) = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, n) \tag{2.3.3}$$

が得られる。すべての変数 y_k について同時に変分をとったときの合計は、各変分の合計で表される。

$$\delta I = \delta_1 I + \delta_2 I + \cdots + \delta_n I = \int_{x_1}^{x_2} \sum_{k=1}^{n} \left\{ \frac{\partial F}{\partial y_k} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'_k}\right) \right\} \eta_k dx \tag{2.3.4}$$

したがって、I が停留値をとるためには (2.3.3) の n 個の微分方程式が同時に成り立つことが必要条件となる。

- **Ex-3：** n 個の質点系の運動エネルギーと位置エネルギーをそれぞれ

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i,j} a_{jk}\dot{q}_j\dot{q}_k, \quad V = V(t, q_1, q_2 \cdots, q_n)$$

とするとき、運動は

$$\int_0^t (T-V)dt = \int_0^t L dt$$

が停留値をとるように起こる。

$$\delta \int_0^t L dt = 0$$

これをハミルトンの原理という。EL の方程式を導出せよ。

- **ans-3：**

$$L = L(t, q_1, q_2, \cdots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_n)$$

なので、EL 方程式は (2.3.3) で $x \to t,\ y_k \to q_k$ に置き換えると次の n 個の連立微分方程式となる。

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, n) \tag{2.3.5}$$

2.4　多独立変数を含む場合

- K氏：独立変数を多数含んだ場合を考えよう。$y = y(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ として

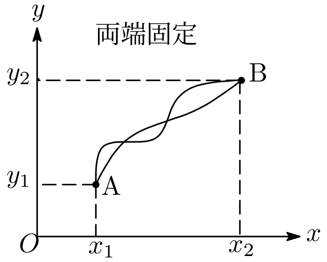
$$I = \int\int_D \cdots \int F\left(x_1, x_2, \cdots, x_n, y, \frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \cdots \frac{\partial y}{\partial x_n}\right) dx_1 dx_2 \cdots dx_n \tag{2.4.1}$$

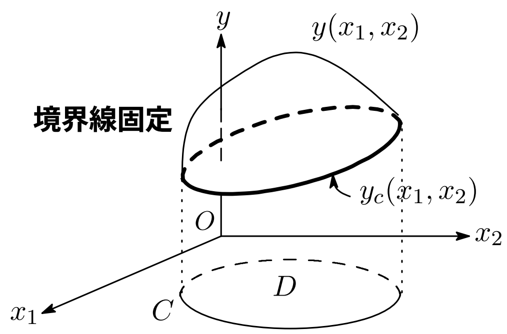
の場合を考えよう。まず独立変数が 2 個の場合を考える。

$$I = \iint_D F\left(x_1, x_2, y, \frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}\right) dx_1 dx_2, \quad y = y(x_1, x_2) \tag{2.4.2}$$

$y(x_1, x_2)$ は 2 階連続微分可能とする。なお、積分領域 D の境界線を C とし $y(x_1, x_2)$ はその上で定められた固定値をとるものとする。

$$y(x_1, x_2) = y_c(x_1, x_2) \tag{2.4.3}$$





- コニー：比較関数のイメージとしてリングに張られたシャボン玉の石鹸膜を思い浮かべればいいわね。シャボン玉の膜はいろいろ形を変えるけど、その中で I が停留値をとる膜の形が求める停留関数となるわけね。

- K 氏：そうだね。さて、例によって比較関数として

$$Y(x_1, x_2, \varepsilon) = y(x_1, x_2) + \varepsilon\eta(x_1, x_2) \tag{2.4.4}$$

とおく。境界線界 C 上では

$$\eta(x_1, x_2) = 0 \tag{2.4.5}$$

とする。(2.4.2) の y を Y で置き換えると

$$I = \iint_D F\left(x_1, x_2, y + \varepsilon\eta, y_{x_1} + \varepsilon\eta_{x_1}, y_{x_2} + \varepsilon\eta_{x_2}\right) dx_1 dx_2 \qquad \left(y_{x_k} \equiv \frac{\partial y}{\partial x_k}\right) \tag{2.4.6}$$

となる。したがって第 1 変分は

$$\delta I = \iint_D \left(F_y\eta + F_1\frac{\partial\eta}{\partial x_1} + F_2\frac{\partial\eta}{\partial x_2}\right) dx_1 dx_2, \quad \text{ただし、} F_k \equiv \frac{\partial F}{\partial y_{x_k}} \quad (k = 1, 2) \tag{2.4.7}$$

となるね。ここで次の関係式

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(F_k\eta) = \frac{\partial F_k}{\partial x_k}\eta + F_k\frac{\partial\eta}{\partial x_k}, \quad \therefore\ F_k\frac{\partial\eta}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}(F_k\eta) - \frac{\partial F_k}{\partial x_k}\eta \tag{2.4.8}$$

を使えば (2.4.7) の右辺第 2、第 3 項は

$$\begin{aligned}\iint_D \left(F_1\frac{\partial\eta}{\partial x_1} + F_2\frac{\partial\eta}{\partial x_2}\right) dx_1 dx_2 &= \iint_D \left(\frac{\partial}{\partial x_1}(F_1\eta) + \frac{\partial}{\partial x_2}(F_2\eta)\right) dx_1 dx_2 \\ &\quad - \iint_D \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2}\right) \eta dx_1 dx_2\end{aligned} \tag{2.4.9}$$

となる。この積分は面積分なのでグリーンの定理を使って線積分に変換する。グリーンの定理は次のようなものだったね。

$$\iint_D \left(\frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y}\right) dxdy = \int_c (fdx + gdy) \tag{2.4.10}$$

(2.4.9) の右辺第 1 項にグリーンの定理を適用して線積分に変換すると、境界線 C 上で $\eta(x_1, x_2) = 0$ なので、結局この項は 0 になる。

$$\iint_D \left(\frac{\partial}{\partial x_1}(F_1\eta) + \frac{\partial}{\partial x_2}(F_2\eta)\right) dx_1 dx_2 = \int_C \eta(F_1 dx_2 - F_2 dx_1) = 0 \tag{2.4.11}$$

したがって (2.4.7) は

$$\delta I = \iint_D \eta\left(F_y - \frac{\partial F_1}{\partial x_1} - \frac{\partial F_2}{\partial x_2}\right) dx_1 dx_2 \tag{2.4.12}$$

となる。$\eta(x_1, x_2)$ は任意の関数なので、$\delta I = 0$ より EL 方程式として

$$F_y - \frac{\partial F_1}{\partial x_1} - \frac{\partial F_2}{\partial x_2} = F_y - \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\partial F}{\partial y_{x_1}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_2}\left(\frac{\partial F}{\partial y_{x_2}}\right) = 0 \tag{2.4.13}$$

を得る。

尚、上で得られた結果を一般論に拡張すれば EL 方程式は

$$F_y - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial F}{\partial y_{x_k}}\right) = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, n) \tag{2.4.14}$$

となるわけだ。

具体的な例として次の汎関数に対する EL 方程式を求めてみよう

$$I = \iint_D \{y_{x_1}^2 + y_{x_2}^2 + 2yf(x_1, x_2)\} dx_1 dx_2 \tag{2.4.15}$$

$F = y_{x_1}^2 + y_{x_2}^2 + 2yf(x_1, x_2)$ とおいて

$$F_y = 2f(x_1, x_2), \quad \frac{\partial F_1}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\partial F}{\partial y_{x_1}}\right) = 2\frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2}, \quad \frac{\partial F_2}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial x_2}\left(\frac{\partial F}{\partial y_{x_2}}\right) = 2\frac{\partial^2 y}{\partial x_2^2} \tag{2.4.16}$$

これから EL 方程式は (2.4.13) より

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial x_2^2} = f(x_1, x_2) \tag{2.4.17}$$

これは 2 次元のポアソン方程式と呼ばれるものだね。ご承知のように $f = 0$ の場合はラプラスの方程式と呼ばれる。

- コニー：電磁気学でラプラスの方程式 $\nabla^2\phi = 0$ を勉強したわ。ϕ は静電ポテンシャル。荷電粒子が存在しない静電場のエネルギー密度を $\mathcal{E}$ とすると、これは電場を E、真空の誘電率を ε_0 として $\mathcal{E} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 E^2$ で表される。ところで $E = -\nabla\phi$ なので $\mathcal{E}$ を ϕ で表せば $\mathcal{E} = \frac{1}{2}\varepsilon_0(\nabla\phi)^2$。したがって、ある与えられた体積中の静電エネルギーを $I[\phi]$ とすると

$$I[\phi] = \int \mathcal{E} dV = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \iiint (\nabla\phi)^2 dxdydz = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \iiint (\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2) dxdydz \tag{2.4.18}$$

$I[\phi]$ が停留値をとる ϕ は EL 方程式の解ということね。EL 方程式は、$F = \phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2$ とおいて上と同じような計算をすると

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = 0 \longrightarrow \nabla^2\phi = 0 \tag{2.4.19}$$

が得られ、ラプラスの方程式は静電場のエネルギーを最小にするという要請からでてくる。

- K 氏：それでは次の問題をやろう。

• **Ex-4：** xy 平面の領域 D に張られた薄い弾性膜の振動の方程式を求めよ。$\sigma(x, y)$ を膜の表面密度、$\mathit{\Gamma}$ を膜の表面張力とすると、膜の運動エネルギー T は

$$T = \frac{1}{2}\iint_D \sigma\left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)^2 dxdy, \qquad z = z(x, y, t) \tag{2.4.20}$$

膜振動のポテンシャルエネルギー V は

$$V = \frac{1}{2}\mathit{\Gamma}\iint_D \left\{\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2\right\} dxdy \tag{2.4.21}$$

で与えられる。

• **ans-4**：膜の振動のラグランジアンは $L = T - V$。ハミルトンの原理より $\delta\int Ldt = 0$ が実現する膜振動となる。

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} Ldt = \frac{1}{2}\delta\int_{t_1}^{t_2}\iint_D \left\{\sigma\left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)^2 - \Gamma\left[\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2\right]\right\} dxdydt$$

(2.4.1) の F に対応する式は

$$F(x, y, t, z, z_x, z_y.z_t) = \sigma\left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)^2 - \Gamma\left\{\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2\right\}$$

となる。EL 方程式は (2.4.14) で $x_1 \to x$, $x_2 \to y$, $x_3 \to t$, $y \to z$ と置き換えて

$$F_z - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial z_x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial F}{\partial z_y}\right) - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial F}{\partial z_t}\right) = 0 \tag{2.4.22}$$

となる。上式の各項は

$$\begin{cases} F_z = \dfrac{\partial F}{\partial z} = 0, & \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\dfrac{\partial F}{\partial z_x}\right) = -2\Gamma\dfrac{\partial^2 z}{\partial x^2} \\ \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\dfrac{\partial F}{\partial z_y}\right) = -2\Gamma\dfrac{\partial^2 z}{\partial y^2}, & \dfrac{\partial}{\partial t}\left(\dfrac{\partial F}{\partial z_t}\right) = 2\sigma\dfrac{\partial^2 z}{\partial t^2} \end{cases}$$

と計算され、これを (2.4.22) に入れて膜の振動方程式

$$\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} = c^2\left(\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z}{\partial y^2}\right), \quad c = \sqrt{\frac{\Gamma}{\sigma}}$$

を得る。

2.5 自然境界条件

- K氏：第 1 話「変分法の基礎理論」の話を振り返ってみよう。

$$I[y] = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y, y')dx \tag{2.5.1}$$

の第 1 変分 $\delta I = 0$ より EL 方程式が導かれた。この導出プロセスを再掲すると

$$\begin{aligned} \delta I &= \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y}\eta dx + \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y'}\eta' dx \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y}\eta dx + \left[\frac{\partial F}{\partial y'}\eta\right]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y}\eta dx - \int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx = \int_{x_1}^{x_2}\left\{\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\right\}\eta dx = 0 \\ \therefore \quad &\forall\eta \longrightarrow \frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \end{aligned} \tag{2.5.2}$$

2 行目から 3 行目へは両端固定の境界条件を利用して余分な項を消去できた。その結果 EL 方程式が得られたわけだが、両端固定という境界条件の代わりに

$$\left.\frac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_1} = 0, \qquad \left.\frac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2} = 0 \tag{2.5.3}$$

という境界条件を設定しても EL の式はでてくる。この境界条件のことを**自然境界条件**と呼んでいる。この場合、EL 方程式に自然境界条件が加わることになる。

$$\begin{cases} EL \text{ 方程式} & : \quad \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \\ \text{自然境界条件} & : \quad \left.\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_1} = 0, \quad \left.\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2} = 0 \end{cases} \tag{2.5.4}$$

- コニー：例えば一端 A が固定されており、B 端は自由端になっているような場合は $\eta(x_1) = 0, \eta(x_2) \neq 0$ で、EL の方程式と自然境界条件のセットは

$$\begin{cases} EL \text{ 方程式} & : \quad \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \\ \text{自然境界条件} & : \quad \left.\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2} = 0 \end{cases} \tag{2.5.5}$$

とすればいいのね。

- K氏：そうだね。具体的な例として汎関数

$$I[y] = \int_0^1 (y'^2 - 4y)dx$$

を考えよう。境界条件として、A 端 $(x_1 = 0)$ は固定されて $y(0) = 1$、B 端 $(x = x_2 = 1)$ は自由端、つまり B 端の y 値は y 軸と平行な直線 $x_2 = 1$ 上にある場合だね。そうすると EL 方程式と自然境界条件のセットは $F = y'^2 - 4y$ として

$$\begin{cases} EL \text{ 方程式} & : \quad \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \longrightarrow y''(x) + 2 = 0 \\ \text{境界条件} & : \quad y(0) = 1, \quad \left.\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2=1} = 0 \end{cases}$$

EL 方程式より

$$y(x) = -x^2 + ax + b \quad (a, b\text{：定数})$$

境界条件より

$$y(0) = 1 \to b = 1, \quad \partial F/\partial y'|_{x=1} = 0 \to a = 2$$

となるので、求める停留関数は

$$y = -x^2 + 2x + 1$$

停留値は

$$I = \int_0^1 \left\{(-2x + 2)^2 - 4(-x^2 + 2x + 1)\right\} dx = -\frac{16}{3}$$

となる。

2.6 横断条件

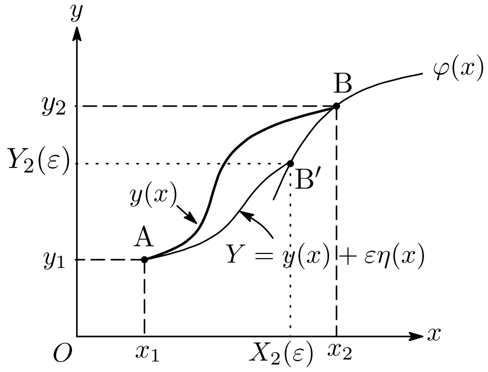
- K氏：さて、汎関数

$$I[y] = \int_{x_1}^{P} F(x, y, y')dx \tag{2.6.1}$$

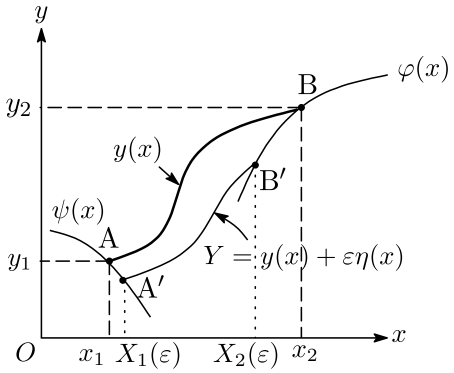
を考え、境界条件は A 点で固定値

$$y(x_1) = y_1 \tag{2.6.2}$$

をとり、B 点はある曲線 $y = \varphi(x)$ 上にあればどこでもよい場合を考える（次ページの左図参照）。積分の上限 P は曲線 $\varphi(x)$ 上の x 座標を表す。



$X_2(\varepsilon) = x_2 + \varepsilon u$



$X_1(\varepsilon) = x_1 + \varepsilon v \quad X_2(\varepsilon) = x_2 + \varepsilon u$

比較関数を

$$Y(x,\varepsilon) = y(x) + \varepsilon\eta(x) \tag{2.6.3}$$

として、曲線 $\varphi(x)$ との交点を B$'$ とし、その座標を $(X_2(\varepsilon), Y_2(\varepsilon))$ とする。停留関数 $y(x)$ が $\varepsilon\eta$ だけ動かされたために B 点が B$'$ 点になったと考える。(2.6.1) の y の代わりに (2.6.3) の Y を入れ、積分の上限 P を $X_2(\varepsilon)$ とすると、問題とすべき汎関数は

$$I[y+\varepsilon\eta] = \int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)} F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx, \quad X_2(\varepsilon) = x_2 + \varepsilon u \tag{2.6.4}$$

となる。以下、停留関数 $y(x)$ が満たすべき必要条件を求めていく。

I をパラメータ ε の単なる関数とみなすと、ε を変数とした I の極値問題と考えればよい。I を ε で微分し、この § の最後で証明する公式

$$\frac{d}{d\varepsilon}\int_{X_1(\varepsilon)}^{X_2(\varepsilon)} F(x,\varepsilon)dx = \int_{X_1(\varepsilon)}^{X_2(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(x,\varepsilon)dx + F(X_2,\varepsilon)\frac{dX_2}{d\varepsilon} - F(X_1,\varepsilon)\frac{dX_1}{d\varepsilon} \tag{2.6.5}$$

を利用すれば

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\varepsilon}I &= \frac{d}{d\varepsilon}\int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)} F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx \\
&= \int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx \\
&\quad + F\left(X_2(\varepsilon), y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta'\right)\frac{dX_2(\varepsilon)}{d\varepsilon} - F\left(x_1, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta'\right)\frac{dx_1(\varepsilon)}{d\varepsilon} \\
&= \int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(x, y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta')dx + F\left(X_2(\varepsilon), y+\varepsilon\eta, y'+\varepsilon\eta'\right)u
\end{aligned} \tag{2.6.6}$$

となる（A 点は固定されているので $dx_1(\varepsilon)/d\varepsilon = 0$）。右辺第 1 項は

$$\int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(x,Y,Y')dx = \int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)}\left(\frac{\partial F}{\partial Y}\frac{\partial Y}{\partial\varepsilon} + \frac{\partial F}{\partial Y'}\frac{\partial Y'}{\partial\varepsilon}\right)dx = \int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)}\left(\frac{\partial F}{\partial Y}\eta + \frac{\partial F}{\partial Y'}\eta'\right)$$

となるので、(2.6.6) は

$$\frac{d}{d\varepsilon}I=\int_{x_1}^{X_2(\varepsilon)}\left(\frac{\partial F}{\partial Y}\eta+\frac{\partial F}{\partial Y'}\eta'\right)dx+F\left(X_2(\varepsilon),Y,Y'\right)u \tag{2.6.7}$$

となる。第 1 変分を

$$\delta I=\left.\frac{d}{d\varepsilon}I(y+\varepsilon\eta)\right|_{\varepsilon=0}=0 \tag{2.6.8}$$

として、$X_2(0)=x_2,\ \eta(x_1)=0$ であることに留意しながら (2.6.7) を計算すると

$$\begin{aligned}\delta^1 I&=\int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta+\frac{\partial F}{\partial y'}\eta'\right)dx+F\left(X_2(\varepsilon),Y,Y'\right)u\\&=\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial F}{\partial y}\eta dx+\left[\frac{\partial F}{\partial y'}\eta\right]_{x_1}^{x_2}-\int_{x_1}^{x_2}\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\eta dx+F(x_2,y,y')u\\&=\int_{x_1}^{x_2}\left\{\frac{\partial F}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\right\}\eta dx+\left.\frac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2}\cdot\eta(x_2)+F(x_2,y,y')u\\&=0\end{aligned} \tag{2.6.9}$$

となる。ここで η は任意関数なので

$$\frac{\partial F}{\partial y}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)=0 \tag{2.6.10}$$

とおいて EL の方程式を得る。同時に

$$\left.\frac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2}\cdot\eta(x_2)+F(x_2,y,y')u=0 \tag{2.6.11}$$

が成立しなければならないので、これが成立する条件を求めていこう。$X_2(\varepsilon)$ は曲線 $\varphi(x)$ 上の点なので

$$\varphi(X_2)=y(X_2)+\varepsilon\eta(X_2) \tag{2.6.12}$$

と表せる。この両辺を ε で微分して

$$\frac{d\varphi}{d\varepsilon}=\frac{\partial y}{\partial X_2}\frac{dX_2}{d\varepsilon}+\eta+\varepsilon\frac{\partial\eta}{\partial X_2}\frac{dX_2}{d\varepsilon}=\frac{\partial y}{\partial X_2}u+\eta+\varepsilon\frac{\partial\eta}{\partial X_2}u \tag{2.6.13}$$

を得る。ここで $\varepsilon=0$ とすると右辺第 3 項が消え、このとき $X_2(0)=x_2$ になることに注意すれば上式は

$$\varphi'(x_2)u=y'(x_2)u+\eta(x_2) \tag{2.6.14}$$

となり、これから

$$\eta(x_2)=\left\{\varphi'(x_2)-y'(x_2)\right\}u \tag{2.6.15}$$

が得られる。これを (2.6.11) に入れて整理すると

$$\left\{F(x,y,y')+F_{y'}(\varphi'-y')\right\}_{x=x_2}u=0 \tag{2.6.16}$$

となり、u は任意なので上式が成り立つためには $x=x_2$ の点で

$$F-F_{y'}(\varphi'-y')=0 \tag{2.6.17}$$

でなければばならない。したがって求める必要条件は

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \\ \big[F - F_{y'}(\varphi' - y')\big]_{x=x_2} = 0 \end{cases} \tag{2.6.18}$$

となる。(2.6.18) の境界条件は**横断条件**とか**横断線条件**と呼ばれる。

さて、A 端も曲線 $\psi(x)$ 上にある場合の横断条件はどうなるか、コニーやってみるかい。

- コニー：そうねぇ、上の計算をなぞっていけばいいハズね。

$$X_1(\varepsilon) = x_1 + \varepsilon v, \quad X_2(\varepsilon) = x_2 + \varepsilon u \tag{2.6.19}$$

とおいて

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} I(y + \varepsilon\eta) &= \frac{d}{d\varepsilon}\int_{X_1}^{X_2} F(x, y + \varepsilon\eta, y' + \varepsilon\eta')dx \\ &= \int_{X_1}^{X_2}\left(\frac{\partial F}{\partial Y}\eta + \frac{\partial F}{\partial Y'}\eta'\right)dx + F\left(X_2, Y, Y'\right)u - F\left(X_1, Y, Y'\right)v \end{aligned} \tag{2.6.20}$$

となって、$\delta I = 0$ の式は

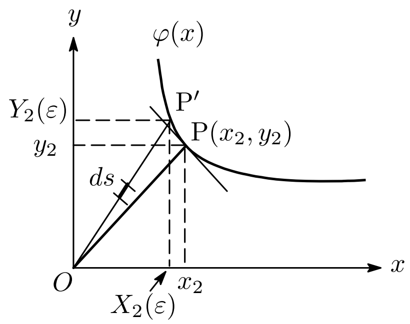
$$\begin{aligned} \delta I &= \int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{\partial F}{\partial y}\eta + \frac{\partial F}{\partial y'}\eta'\right)dx + F\left(X_2, Y, Y'\right)u - F\left(X_1, Y, Y'\right)v \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\left\{\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\right\}\eta dx + \left.\frac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_2}\cdot\eta(x_2) - \left.\frac{\partial F}{\partial y'}\right|_{x=x_1}\cdot\eta(x_1) \\ &+ F(x_2, y, y')u - F(x_1, y, y')v \\ &= \int_{x_1}^{x_2}\left\{\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)\right\}\eta dx \\ &+ \big\{F(x, y, y') + F_{y'}(\varphi' - y')\big\}_{x=x_2}\cdot u - \big\{F(x, y, y') + F_{y'}(\psi' - y')\big\}_{x=x_1}\cdot v = 0 \end{aligned} \tag{2.6.21}$$

η, u, v は任意なので上式が成立するためには

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \\ \big\{F + F_{y'}(\psi' - y')\big\}_{x=x_1} = 0 \\ \big\{F + F_{y'}(\varphi' - y')\big\}_{x=x_2} = 0 \end{cases} \tag{2.6.22}$$

となり、EL 方程式に加えて A 端、B 端での 2 つの横断条件が加わる。

- K 氏：そうだね。
- コニー：横断条件の何か適当な例題があるかしら。
- K 氏：そうだね、それじゃ『原点 $O(0,0)$ から与えられた曲線 $y = \varphi(x)$ までの最短距離を求めよ』という問題を考えよう。この問題は 1 端が原点に固定され、もう 1 端は曲線 $\varphi(x)$ 上にある任意の点だね。



原点から曲線 $\varphi(x)$ への最短距離を実現する曲線は直線であることは明らかだ。“ 最短距離を実現する ”直線 $y(x)$ と曲線 $\varphi(x)$ の交点を $\mathrm{P}(x_2, y_2)$ とし、直線の線素を ds とすると $ds = \sqrt{1+y'^2}dx$。

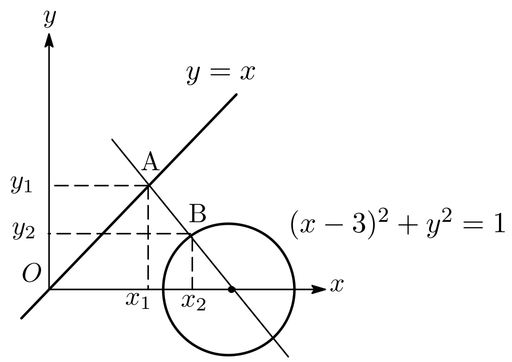
$$F = \sqrt{1+y'^2} \tag{2.6.23}$$

とおいて (2.6.18) より

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial y} - \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 & \longrightarrow \quad \dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right) = 0 \\ \big[F - F_{y'}(\varphi' - y')\big]_{x=x_2} = 0 & \longrightarrow \quad [1 + y'\varphi']_{x=x_2} = 0 \quad \therefore\ y'(x_2)\varphi'(x_2) = -1 \end{cases} \tag{2.6.24}$$

$\varphi'(x_2)$ は曲線 $\varphi(x)$ 接線の傾きで、$y'(x_2)$ は原点 O から伸びる直線の傾きだ。したがって直線 OP は曲線 $\varphi(x)$ と直交する直線となる。

- **Ex-5：** 両端での横断条件を使うことによって、直線 $y = x$ と円 $(x-3)^2 + y^2 = 1$ との間の最短距離を求めよ。



- **ans-5：** 最短距離は直線になる。$F = \sqrt{1+y'^2}$ として A 点での横断条件より

$$[1 + y'\psi']_{x=x_1} = 0 \quad \therefore\ y'(x_1) = -1 \quad (\because \psi = x)$$

B 点での横断条件より

$$[1 + y'\varphi']_{x=x_2} = 0 \quad \therefore\ y'(x_2) = (x_2 - 3)/y_2 \quad (\because \varphi' = (x-3)/\varphi)$$

$y'(x_1) = y'(x_2)$ より最短距離を実現する直線の式は

$$y = -x + 3$$

となる。これから A、B の座標は

$$A(x_1, y_1) = A(3/2,\, 3/2), \quad B(x_2, y_2) = B(3 - 1/\sqrt{2},\, 1/\sqrt{2})$$

最短距離 ℓ は

$$l = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} = (3\sqrt{2} - 1)/2$$

となる。

- K 氏：最後に (2.6.5) の公式を証明して第 2 話を終了しよう。次のような公式だったね

$$\frac{d}{d\varepsilon}\int_{X_1(\varepsilon)}^{X_2(\varepsilon)} F(x,\varepsilon)dx = \int_{X_1(\varepsilon)}^{X_2(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(x,\varepsilon)dx + \left[F(\varepsilon.x)\frac{dx}{d\varepsilon}\right]_{X_1(\varepsilon)}^{X_2(\varepsilon)}$$

この証明は次のようにやればよい。$f(\varepsilon, x)$ を $F(\varepsilon, x)$ の原始関数とすると

$$\int F(\varepsilon, x)dx = f(\varepsilon, x) \longleftrightarrow F(\varepsilon, x) = \frac{d}{dx}f(\varepsilon, x) \tag{2.6.25}$$

この関係式を使い積分範囲を X_1, X_2 とすると

$$\frac{d}{d\varepsilon}\int_{X_1}^{X_2} F(x,\varepsilon)dx = \frac{d}{d\varepsilon}\Big[f(\varepsilon, x)\Big]_{X_1}^{X_2} = \frac{d}{d\varepsilon}\left[f(\varepsilon, X_2) - f(\varepsilon, X_1)\right] \tag{2.6.26}$$

$$\begin{aligned}
\text{右辺} &= \frac{\partial}{\partial\varepsilon}f(\varepsilon, X_2) + \frac{\partial f(\varepsilon, X_2)}{\partial X_2}\frac{dX_2}{d\varepsilon} - \frac{\partial}{\partial\varepsilon}f(\varepsilon, X_1) - \frac{\partial f(\varepsilon, X_1)}{\partial X_1}\frac{dX_1}{d\varepsilon} \\
&= \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\{f(\varepsilon, X_2) - f(\varepsilon, X_1)\} + F(\varepsilon.X_2)\frac{dX_2}{d\varepsilon} - F(\varepsilon.X_1)\frac{dX_1}{d\varepsilon} \\
&= \frac{d}{d\varepsilon}\int_{X_1}^{X_2} F(\varepsilon, x)dx + F(\varepsilon.X_2)\frac{dX_2}{d\varepsilon} - F(\varepsilon.X_1)\frac{dX_1}{d\varepsilon} \\
&= \int_{X_1}^{X_2}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(\varepsilon, x)dx + \left[F(\varepsilon.x)\frac{dx}{d\varepsilon}\right]_{X_1}^{X_2}
\end{aligned} \tag{2.6.27}$$

となって、公式がでてくる。

次回第 3 話は、境界条件に加えて付加条件（束縛条件）を伴う変分の話をしていく予定で、ラグランジュの未定乗数法がでてくる。お楽しみに。

第3話　ラグランジュの未定乗数法

3.1　付加条件を伴う変分

- K氏：関数

$$F = F(u_1, u_2, \cdots, u_n) \tag{3.1.1}$$

に1つの付加条件[1]

$$f(u_1, u_2, \cdots, u_n) = 0 \tag{3.1.2}$$

が付いた場合の関数の停留値（極値）を求める問題を考えよう。まず、考えられるのは付加条件 (3.1.2) を u_i について解き、それを関数 F に入れれば付加条件のない $n-1$ 個の独立変数の変分問題として取り扱うことができるということだ。もっとも、この方法は常にうまくいくとは限らない。付加条件から u_i を消去するのが大変面倒になる場合が多い。そのような場合の対処法は後で述べるとして、まず1つの付加条件

$$f(u_1, u_2, u_3) = 0 \tag{3.1.3}$$

を伴う3変数からなる関数

$$F = F(u_1, u_2, u_3) \tag{3.1.4}$$

の停留値を求める問題を考えよう。 (3.1.3) の変分をとると

$$\delta f = \frac{\partial f}{\partial u_1}\delta u_1 + \frac{\partial f}{\partial u_2}\delta u_2 + \frac{\partial f}{\partial u_3}\delta u_3 = 0 \tag{3.1.5}$$

関数 F の変分は停留値のところで0だから

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial u_1}\delta u_1 + \frac{\partial F}{\partial u_2}\delta u_2 + \frac{\partial F}{\partial u_3}\delta u_3 = 0 \tag{3.1.6}$$

$\delta u_i\,(i = 1,2,3)$ はそれぞれ独立した変分ではないので $\partial F/\partial u_i \neq 0$ $(i = 1,2,3)$ 。(3.1.5) の変分の内どれでもいいが、δu_3 について解くと

$$\delta u_3 = -\left(\frac{\partial f}{\partial u_1}\delta u_1 + \frac{\partial f}{\partial u_2}\delta u_2\right)\Bigg/\frac{\partial f}{\partial u_3} \tag{3.1.7}$$

が得られる。これを (3.1.6) に入れて整理すると

$$\begin{aligned}
\delta F &= \left(\frac{\partial F}{\partial u_1} - \frac{\frac{\partial f}{\partial u_1}}{\frac{\partial f}{\partial u_3}}\cdot\frac{\partial F}{\partial u_3}\right)\delta u_1 + \left(\frac{\partial F}{\partial u_2} - \frac{\frac{\partial f}{\partial u_2}}{\frac{\partial f}{\partial u_3}}\cdot\frac{\partial F}{\partial u_3}\right)\delta u_2 \\
&= \left(\frac{\partial F}{\partial u_1} - \lambda\frac{\partial f}{\partial u_1}\right)\delta u_1 + \left(\frac{\partial F}{\partial u_2} - \lambda\frac{\partial f}{\partial u_2}\right)\delta u_2 = 0, \quad \text{ただし、}\lambda \equiv \frac{\partial F}{\partial u_3}\Bigg/\frac{\partial f}{\partial u_3}
\end{aligned} \tag{3.1.8}$$

[1](3.1.2) で表される付加条件はホロノミック系と呼ばれる。*holonomic* という語は Hertz によって導入された。ギリシャ語からきており、「従来通り」のとか「普通の」という意味を持つ。可積分な拘束条件という意味合いでも使われる。

ここで、δu_1, δu_2 は自由に動かせる独立な変分となるので

$$\frac{\partial F}{\partial u_1} - \lambda \frac{\partial f}{\partial u_1} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial u_2} - \lambda \frac{\partial f}{\partial u_2} = 0 \tag{3.1.9}$$

が成立する。また、$\lambda = \frac{\partial F}{\partial u_3} \Big/ \frac{\partial f}{\partial u_3}$ より

$$\frac{\partial F}{\partial u_3} - \lambda \frac{\partial f}{\partial u_3} = 0 \tag{3.1.10}$$

以上の結果を (3.1.6) に入れて整理すると

$$\begin{aligned} &\delta F - \lambda \left(\frac{\partial f}{\partial u_1} \delta u_1 + \frac{\partial f}{\partial u_2} \delta u_2 + \frac{\partial f}{\partial u_3} \delta u_3 \right) = \delta F - \lambda \delta f = 0 \\ &\therefore \quad \delta (F - \lambda f) = 0 \end{aligned} \tag{3.1.11}$$

となり、新しい関数

$$\mathcal{F} = F - \lambda f \tag{3.1.12}$$

を定義すれば、付加条件付の関数 F の極値問題は付加条件なしの関数 $\mathcal{F}$ の極値問題に置き換えることができる。この結果は (3.1.1), (3.1.2) のような変数が n 個の一般のケースにもそのまま拡張適用できる。

次に m 個の独立な付加条件がある場合を考えよう。

$$F = F(u_1, u_2, \cdots, u_n) \tag{3.1.13}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(u_1, u_2, \cdots, u_n) = 0 \\ \qquad \vdots \\ f_m(u_1, u_2, \cdots, u_n) = 0 \end{array} \right. \qquad (m < n) \tag{3.1.14}$$

(3.1.14) の変分をとると

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta f_1 = \dfrac{\partial f_1}{\partial u_1} \delta u_1 + \cdots + \dfrac{\partial f_1}{\partial u_n} \delta u_n = 0 \\ \qquad \qquad \vdots \\ \delta f_m = \dfrac{\partial f_m}{\partial u_1} \delta u_1 + \cdots + \dfrac{\partial f_m}{\partial u_n} \delta u_n = 0 \end{array} \right. \tag{3.1.15}$$

関数 F の変分は

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial u_1} \delta u_1 + \cdots + \frac{\partial F}{\partial u_n} \delta u_n = \sum_{r=1}^{n} A_r \delta u_r = 0, \quad \text{ただし } A_r \equiv \frac{\partial F}{\partial u_r} \tag{3.1.16}$$

m 個の付加条件 (3.1.15) により、独立な変分の数は $n-m$ 個となる。その内、どれでもよいが例えば $\delta u_{m+1}, \delta u_{m+2}, \cdots, \delta u_n$ を独立な変分として採用すると、残り m 個の $\delta u_1, \delta u_2, \cdots, \delta u_m$ はそれらの 1 次結合として表される。その関係式は、$\delta u_1, \delta u_2, \cdots, \delta u_m$ を未知数とする (3.1.15) の m 個の連立 1 次同次方程式を解いて得られる[2]。

[2]詳細は適当な線形代数のテキスト、例えば稲葉三男「行列と行列式」（近代数学新書）等を参照されたし。

$$\underbrace{\boxed{\delta u_1, \delta u_2, \cdots, \delta u_m,}}_{m\,\text{個 (従属)}} \quad \underbrace{\boxed{\delta u_{m+1}, \delta u_{m+2}, \cdots, \delta u_n}}_{n-m\,\text{個（独立）}}$$

◎ $\delta u_1, \delta u_2, \cdots, \delta u_m$ は $n-m$ 個の δu_{m+i} の 1 次結合で与えられる

いま、仮にその関係式が求まったとして

$$\delta u_j = c_1^{(j)} \delta u_{m+1} + c_2^{(j)} \delta u_{m+2} + \cdots + c_{n-m}^{(j)} \delta u_n = \sum_{i=1}^{n-m} c_i^{(j)} \delta u_{m+i} \qquad (j = 1, 2, \cdots, m) \tag{3.1.17}$$

と書こう。これを (3.1.16) に入れて整理すると

$$\sum_{i=1}^{n-m} \left(A_{m+i} + \sum_{j=1}^{m} A_i c_i^{(j)} \right) \delta u_{m+i} = 0 \tag{3.1.18}$$

となり、δu_{m+i} $(i = 1, 2, \cdots, n-m)$ は独立な変分なので、A_r の従うべき式として

$$A_{m+i} + \sum_{j=1}^{m} A_i c_i^{(j)} = 0 \qquad (i = 1, 2, \cdots, n-m) \tag{3.1.19}$$

を得る。しかし、この式を具体的に書き下すと一般に複雑なものとなり、付加条件を“ 解く ”この方法は必ずしも見通しのよい方法とはいえない。そこで、(3.1.16) の $\delta F = 0$ の代わりに

$$\begin{aligned}
&\delta F - (\lambda_1 \delta f_1 + \cdots + \lambda_m \delta f_m) \\
&= \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial u_k} \delta u_k - \lambda_1 \left(\frac{\partial f_1}{\partial u_1} \delta u_1 + \cdots + \frac{\partial f_1}{\partial u_n} \delta u_n \right) - \cdots - \lambda_m \left(\frac{\partial f_m}{\partial u_1} \delta u_1 + \cdots + \frac{\partial f_m}{\partial u_n} \delta u_n \right) \\
&= \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial u_k} - \sum_{\ell=1}^{m} \lambda_\ell \frac{\partial f_\ell}{\partial u_k} \right) \delta u_k = 0
\end{aligned} \tag{3.1.20}$$

とおいてみよう。こうしても付加条件 (3.1.15) により任意の $\lambda_\ell (\ell = 1, 2, \cdots, m)$ に対して δF の値は変わらない。つまり (3.1.20) は (3.1.16) と同等ということだね。

- コニー：この狙いは従属的な変分を消去しようという意図があるのね。
- K氏：そうなんだ。$\lambda_\ell (\ell = 1, 2, \cdots, m)$ は任意だから、λ_ℓ として次の m 個の連立方程式の解を採用する。

$$\frac{\partial F}{\partial u_k} - \sum_{\ell=1}^{m} \lambda_\ell \frac{\partial f_\ell}{\partial u_k} = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, m) \tag{3.1.21}$$

そうすると (3.1.20) の前半の m 個の項が消えて次式を得る。

$$\sum_{k=m+1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial u_k} - \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial u_k} - \cdots - \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial u_k} \right) \delta u_k = 0 \tag{3.1.22}$$

δu_k は どれも独立した変分 なので

$$\frac{\partial F}{\partial u_k} - \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial u_k} - \cdots - \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial u_k} = 0 \quad (k = m+1, \cdots, n) \tag{3.1.23}$$

が成立する。したがって、(3.1.21) と (3.3.10) より

$$\frac{\partial F}{\partial u_k} - \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial u_k} - \cdots - \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial u_k} = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, n) \tag{3.1.24}$$

が得られる。(3.1.24) は すべての変分 δu_k が独立である として

$$\delta F - \lambda_1 \delta f_1 - \cdots - \lambda_m \delta f_m = 0 \tag{3.1.25}$$

から得られる結果と等価だ。すなわち、m 個の付加条件付の関数 F の停留値を求める問題は、付加条件のない新しい関数

$$\mathcal{F} = F - \lambda_1 f_1 - \cdots - \lambda_m f_m = F - \sum_{\ell=1}^{m} \lambda_\ell f_\ell \tag{3.1.26}$$

の停留値問題に置き換えることができる。 λ は**未定乗数**と呼ばれ、この方法を**ラグランジュの未定乗数法**と呼んでいる。この方法の優れているところは、付加条件の数には関係しないし、また、**非ホロノミック**(*nonholonomic*) な付加条件[3]にも適用することができる点にあるんだね。

- コニー：未定乗数の“ 未定 ”とは値の定まっていない乗数という意味ね。
- K氏：そうなんだね。λ は式を立てた段階では未定だけど、問題を解いた後で自然に決まってくる。このあたりの事情ははあとで問題をやったときに分かると思う。
- コニー：一般論はいつも抽象的でなかなか掴み難いものを感じるけど。。。
- K氏：まぁ、しばらく我慢我慢。ラグランジュの未定乗数法を要約しておくと次のようになるね。『付加条件 $f_i(u_1, \cdots, u_n)$ $(i = 1, 2, \cdots, m)$ のもとでの関数 $F(u_1, \cdots, u_n)$ の停留値問題は付加条件なしのあたらな関数 $\mathcal{F} = F - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i$ の停留値問題に置き換えることができる。』

3.2　積分形の付加条件

- K氏：$G(x, y, y')$ を既知の汎関数として、次の積分形の付加条件

$$J = \int_{x_1}^{x_2} G(x, y, y')dx = C(\text{定数}) \tag{3.2.1}$$

のもとで次の汎関数の変分問題を考えよう。

$$I = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y, y')dx \tag{3.2.2}$$

この問題の典型例として『周の長さを一定としたとき、それが囲む面積が最大となる図形は何か？』（*Dido* の問題と）いうのがあり、このことからこの種の変分問題を**等周問題**と呼んでいる。これは λ を未定乗数として、

$$\mathcal{F} = F - \lambda G \tag{3.2.3}$$

とおき、付加条件のない次の変分問題と等価になる。

$$\delta \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{F} dx = 0 \longrightarrow \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y'}\right) = 0 \tag{3.2.4}$$

[3] ホロノミックや非ホロノミックについては最後の『おまけの蛇足』を参照されたし。

一般論をまとめておくと次のようになる。m 個の積分形の付加条件

$$J_k = \int_{x_1}^{x_2} G_k(x, y_1, y_2, \cdots, y_n, y_1', y_2', \cdots, y_n')dx = C_k \quad (k = 1, 2, \cdots, m) \tag{3.2.5}$$

のもとで

$$I = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y_1, y_2, \cdots, y_n, y_1', y_2', \cdots, y_n')dx \tag{3.2.6}$$

の変分問題は λ_k を未定乗数として

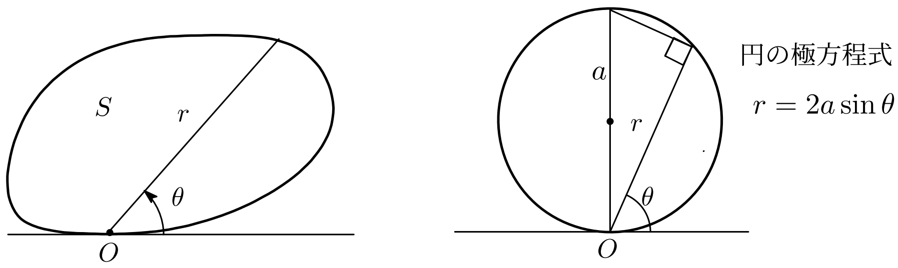
$$\mathcal{F} = F - \sum_{k=1}^{m} \lambda_k G_k \qquad (k = 1, 2, \cdots, m) \tag{3.2.7}$$

とおき、付加条件なしの

$$\delta \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{F} dx = 0 \longrightarrow \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_k} - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y_k'}\right) = 0 \quad (k = 1, 2, \cdots, n) \tag{3.2.8}$$

の変分問題となるということだね。さっそく問題をやってみよう。

- **Ex-6：** 周囲の長さ L で囲まれた面積 S を最大にするような滑らかな平面曲線を求めよ。



- **ans-6：** 曲線上の 1 点を極とし、その点での接線を基線とする曲線の極方程式を $r = f(\theta)$ とすると、曲線で囲まれた面積 S は

$$S = \int_0^{\pi} \frac{1}{2} r^2 d\theta \tag{3.2.9}$$

周囲の長さは

$$L = \int_0^{\pi} \left\{ \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 + r^2 \right\}^{1/2} d\theta \tag{3.2.10}$$

で与えられる。付加条件を伴う関数 S の変分問題はラグランジュの未定乗数法を使うことで次の関数 $\mathcal{S}$ の変分問題と等価となる。

$$\mathcal{S} = S - \lambda L = \int_0^{\pi} \left[\frac{1}{2} r^2 - \lambda \left\{ \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 + r^2 \right\}^{1/2} \right] d\theta = \int_0^{\pi} F(r, r') d\theta \tag{3.2.11}$$

EL の式は第 2 話ででてきた (2.1.4) の第　式

$$F = F(y, y') \longrightarrow F - y' F_{y'} = \texttt{const}$$

が使える。

$$T = \left\{ \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 + r^2 \right\}^{1/2} \longrightarrow \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 = T^2 - r^2$$

とおくと EL の式は

$$\frac{1}{2}r^2 - \lambda T + \lambda\frac{(dr/d\theta)^2}{T} = \frac{1}{2}r^2 - \lambda\frac{r^2}{T} = \texttt{const} \tag{3.2.12}$$

曲線上の 1 点で $r = 0$ となるので $\texttt{const} = 0$ とおける。これから

$$\left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 = 4\lambda^2 - r^2, \qquad \therefore\ \frac{d\theta}{dr} = \frac{1}{(4\lambda^2 - r^2)^{1/2}} \tag{3.2.13}$$

これを解いて

$$\theta = \sin^{-1}\left(\frac{r}{2\lambda}\right) + C \tag{3.2.14}$$

積分定数 C は $r = 0$ で $\theta = 0$ なので $C = 0$。したがって

$$r = 2\lambda\sin\theta \tag{3.2.15}$$

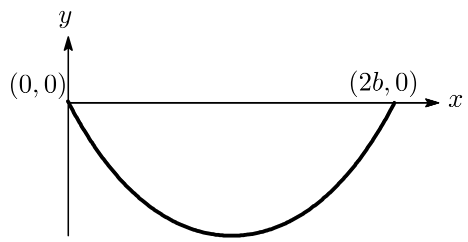
これは半径 λ の円を表す。付加条件 (3.2.10) より

$$L = \int_0^\pi 2\lambda d\theta = 2\pi\lambda, \quad \therefore\ \lambda = L/2\pi \tag{3.2.16}$$

- **Ex-7：** 長さ $2a$ の一様な線密度 ρ のロープが 2 点 $(x, y) = (0, 0)$, $(x, y) = (2b, 0)$ の間に懸けてある。ポテンシャルエネルギー

$$V = \rho g \int_o^{2b} y ds \tag{3.2.17}$$

を極小にする曲線 $y = y(x)$ を求めよ。ただし、$b < a$ とする。



- **ans-7：** ロープの長さは $2a$ なので

$$\int_0^{2b} ds = \int_0^{2b} (1 + y'^2)^{1/2} dx = 2a \tag{3.2.18}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &= \int_0^{2b} \{\rho g y(1 + y'^2)^{1/2} - \lambda(1 + y'^2)^{1/2}\} dx \\ &= \int_0^{2b} (\rho g y - \lambda)(1 + y'^2)^{1/2} dx = \int_0^{2b} F(y, y') dx\end{aligned} \tag{3.2.19}$$

とおいて EL の式は

$$\begin{aligned}&F - y'F_{y'} = \frac{\rho g y - \lambda}{(1 + y'^2)^{1/2}} = c_1 \qquad (c_1 = \texttt{const}) \\ &\therefore\ \left(y - \frac{\lambda}{\rho g}\right)^2 = \left(\frac{c_1}{\rho g}\right)^2 (1 + y'^2)\end{aligned} \tag{3.2.20}$$

$Y = y - \lambda/\rho g$ とおくと

$$
\begin{aligned}
&Y^2 = \left(\frac{c_1}{\rho g}\right)^2 (1 + Y'^2) \longrightarrow \frac{dY}{\sqrt{Y^2 - k^2}} = \pm\frac{dx}{k} \qquad (k = c_1/\rho g) \\
&\therefore\ Y = k\cosh\left(\frac{x - c_2}{k}\right) \longrightarrow y = \frac{\lambda}{\rho g} + \frac{c_1}{\rho g}\cosh\left\{\frac{(x - c_2)\rho g}{c_1}\right\} \qquad (c_2 = \texttt{const})
\end{aligned}
\tag{3.2.21}
$$

これは懸垂曲線を表す。3 個の定数 λ, c_1, c_2 は付加条件 (3.2.18) と 2 つの境界条件から求まる。

• **Ex-8：** $\displaystyle\int_0^1 \dot{x}^2 dt$ を次の条件の下で極小にせよ。

$$\int_0^1 x dt = 0, \quad \int_o^1 xt dt = 1, \quad x(0) = x(1) = 0 \tag{3.2.22}$$

• **ans-8：** 付加条件が 2 つなので

$$\mathcal{F}(x, \dot{x}, t) = \dot{x}^2 - \lambda_1 x - \lambda_2 xt \tag{3.2.23}$$

とおいて EL の式を求めると

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\dot{x}}\right) = -(\lambda_1 + \lambda_2 t + 2\ddot{x}) = 0 \\
&\therefore\ 2\ddot{x} + \lambda_2 t + \lambda_1 = 0
\end{aligned}
\tag{3.2.24}
$$

境界条件 $x(0) = 0$ を使ってこれを解くと

$$x = -\frac{1}{4}\lambda_1 t^2 - \frac{1}{12}\lambda_2 t^3 + C_2 t \tag{3.2.25}$$

第 2 境界条件 $x(1) = 0$ より

$$\frac{1}{4}\lambda_1 + \frac{1}{12}\lambda_2 - C_2 = 0 \tag{3.2.26}$$

付加条件より

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 x dt &= \int_0^1 \left(-\frac{1}{4}\lambda_1 t^2 - \frac{1}{12}\lambda_2 t^3 + C_2 t\right) dt = -\frac{\lambda_1}{12} - \frac{\lambda_2}{48} + \frac{C_2}{2} = 0 \\
\int_0^1 xt dt &= \int_0^1 \left(-\frac{1}{4}\lambda_1 t^2 - \frac{1}{12}\lambda_2 t^3 + C_2 t\right) t dt = -\frac{\lambda_1}{16} - \frac{\lambda_2}{60} + \frac{C_2}{3} = 1
\end{aligned}
\tag{3.2.27}
$$

$\lambda_1, \lambda_2, C_2$ は (3.2.26) と (3.2.27) の連立方程式を解いて

$$\lambda_1 = -720, \quad \lambda_2 = 1440, \quad C_2 = -60$$

よって

$$x = -120t^3 + 180t^2 - 60t, \qquad \int_0^1 \dot{x}^2 dt \text{ の極小値は } 720 \text{ となる。}$$

3.3　代数形の付加条件

• K 氏：代数形の付加条件は一般的に

$$g_k(x, y_1, y_2, \cdots, y_n, y_1', y_2', \cdots, y_n') = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, m) \tag{3.3.1}$$

という形で表される。この付加条件のもとで汎関数

$$I=\int_{x_1}^{x_2}F(x,y_1,y_2,\cdots,y_n,y_1',y_2',\cdots,y_n')dx \tag{3.3.2}$$

の変分問題は、λ_k を未定定数として

$$\mathcal{F}=F-\sum_{k=1}^{m}\lambda_k g_k, \tag{3.3.3}$$

とおき、付加条件のない次の変分問題と等価になる。

$$\delta\int_{x_1}^{x_2}\mathcal{F}dx=0\longrightarrow\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial y_k}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial y_k'}\right)=0\quad(k=1,2,\cdots,n) \tag{3.3.4}$$

- **Ex-9：** $x^2+y^2=1$ の条件のもとで $\displaystyle\int_0^1(\dot{x}^2+\dot{y}^2+1)^{1/2}dt$ を極小にする曲線を求めよ。
- **ans-9：**

$$\mathcal{F}=(\dot{x}^2+\dot{y}^2+1)^{1/2}-\lambda(x^2+y^2-1) \tag{3.3.5}$$

$\mathcal{F}$ に対する EL の式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\dot{x}}\right)=0\quad&\longrightarrow\quad 2\lambda x+\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{x}}{\sqrt{\dot{x}^2+\dot{y}^2+1}}\right)=0\\ \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial y}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\dot{y}}\right)=0\quad&\longrightarrow\quad 2\lambda y+\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{y}}{\sqrt{\dot{y}^2+\dot{y}^2+1}}\right)=0\end{aligned} \tag{3.3.6}$$

ここで $x=\cos\theta,\ y=\sin\theta$ と変数変換すると $\dot{x}^2+\dot{y}^2=\dot{\theta}^2=1$ となるので上式は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{\theta}\sin\theta}{\sqrt{1+\dot{\theta}^2}}\right)=-2\lambda\cos\theta,\quad\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{\theta}\cos\theta}{\sqrt{1+\dot{\theta}^2}}\right)=2\lambda\sin\theta$$

となる。第 1 式の両辺に $\sin\theta$ を掛け、第 2 式の両辺に $\cos\theta$ を掛けて足しあわすと

$$\sin\theta\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{\theta}\sin\theta}{\sqrt{1+\dot{\theta}^2}}\right)+\cos\theta\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{\theta}\cos\theta}{\sqrt{1+\dot{\theta}^2}}\right)=\frac{\ddot{\theta}}{(1+\dot{\theta}^2)^{3/2}}=0,\quad\therefore\ \frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{\theta}}{\sqrt{1+\dot{\theta}^2}}\right)=0$$

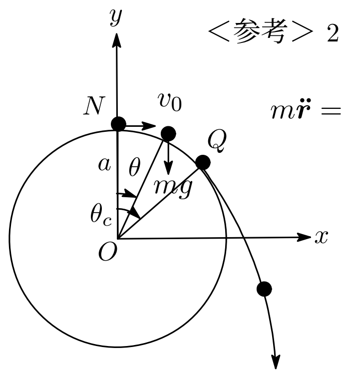
これから $\dot{\theta}=A$(一定) とおくと $\theta=At+B\,(B:$ 一定$)$。したがって求める曲線は

$$x=\cos(At+B),\quad y=\sin(At+B) \tag{3.3.7}$$

極値は

$$\int_0^1(\dot{x}^2+\dot{y}^2+1)^{1/2}dt=\int_0^1(1+A^2)^{1/2}dt=(1+A^2)^{1/2} \tag{3.3.8}$$

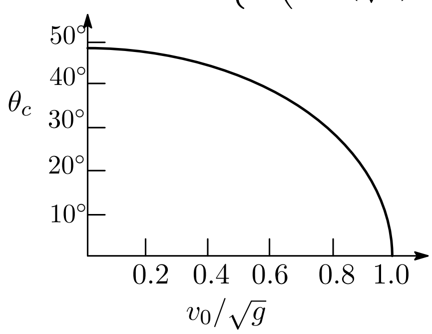
- **Ex-10：** 一様な重力の下に固定され半径 a の滑らかな球面上の北極点 N から初速度 v_0 で質点が滑り落ち、球面上の点 Q で球面から離れて落下した。このとき、$\angle NOQ$ は $\cos^{-1}(2/3)$ を超えないことを示せ。



＜参考＞ 2 次元極座標での運動方程式

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F} \longrightarrow \begin{array}{l} m(\ddot{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{r}\dot{\theta}^2) = \boldsymbol{F}_r \\ m(\boldsymbol{r}\ddot{\theta} + 2\dot{\boldsymbol{r}}\dot{\theta}) = \boldsymbol{F}_\theta \end{array}$$

$$\theta_c = \cos^{-1}\left\{\frac{1}{3}\left(2 + \left(\frac{v_0}{\sqrt{g}}\right)^2\right)\right\}$$



• **ans-10：** $x = r\sin\theta, y = r\cos\theta$ とすると質点の運動エネルギー T、位置エネルギー V は

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2), \quad V = mgr\cos\theta \tag{3.3.9}$$

ラグランジアン L は

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - mgr\cos\theta \tag{3.3.10}$$

束縛条件は

$$f = r - a = 0 \tag{3.3.11}$$

新たなラグランジアンを $\mathcal{L} = L - \lambda f$ とすると EL の式は

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2 + g\cos\theta) - \lambda = 0 \\ &\therefore\ m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2 + g\cos\theta) = \lambda \end{aligned} \tag{3.3.12}$$

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = m(r^2\ddot{\theta} + 2r\dot{r}\dot{\theta} - gr\sin\theta) = 0 \\ &\therefore\ r^2\ddot{\theta} + 2r\dot{r}\dot{\theta} - gr\sin\theta = 0 \end{aligned} \tag{3.3.13}$$

(3.3.12) より λ は動径方向に働く束縛力を表し、θ の関数となることが分かる[4]。束縛条件より $r = a$ なので、上式は

$$-ma\dot{\theta}^2 + mg\cos\theta = \lambda(\theta) \tag{3.3.14}$$

$$a\ddot{\theta} - g\sin\theta = 0 \tag{3.3.15}$$

となる。(3.3.15) に $\dot{\theta}$ を掛けて整理すると

$$a\dot{\theta}\ddot{\theta} - g\sin\theta\dot{\theta} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}a\dot{\theta}^2 + g\cos\theta\right) = 0, \quad \therefore\ \frac{1}{2}a\dot{\theta}^2 + g\cos\theta = C \quad (C：定数) \tag{3.3.16}$$

この式はエネルギー保存則を表している[5]。積分定数 C は初期条件 $\theta = 0 : a\dot{\theta} = v_0$ より $C = v_0^2/2a + g$ となるので

$$a\dot{\theta}^2 = 2g(1 - \cos\theta) + \frac{v_0^2}{a} \tag{3.3.17}$$

---

[4] 図中の＜参考＞を参照されたし。

[5] $\frac{1}{2}ma^2\dot{\theta}^2 + mga\cos\theta = $ 一定

これを (3.3.14) に入れると

$$\lambda = -m\left\{g(2-3\cos\theta)+\frac{v_0^2}{a}\right\} \tag{3.3.18}$$

v_0 があまり大きくなければ

$$\lambda \simeq -mg(2-3\cos\theta) \tag{3.3.19}$$

とおける。$\cos\theta_c = 2/3$ で $\lambda = 0$ となるので、$\theta_c = \cos^{-1}(2/3)$ なる点で質点は球面を離れる。束縛力 $\lambda > 0$ なので

$$2-3\cos\theta_c < 0, \quad \therefore\ \theta_c < \cos^{-1}(2/3) \tag{3.3.20}$$

- K 氏：以上で第 3 話を終了する。第 4 話は直接法について説明する予定。

第4話　直接法

4.1　直接法

- K氏：いままで汎関数 $I[y]=\displaystyle\int_{x_1}^{x_2}F(x,y,y')dx$ の停留関数 $y(x)$ を求めるのに両端固定の境界条件の下で EL 方程式（微分方程式）$\dfrac{\partial F}{\partial y}-\dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\partial F}{\partial y'}\right)=0$ を解いてその解を求めきた。しかし、微分方程式が解析的に解けるケースはごく限られていて、大抵はコンピュータを駆使した数値計算で解かれるのが普通だ。

  一方、EL 方程式を解く代わりに、求めるべき関数 $y(x)$ に対して適当なパラメータ（**変分パラメータ**と呼ぶ）を含んだもっともらしい近似関数 (**試行関数**：$trial\ function$) をとり、汎関数 $I[y]$ が停留値（極値) をとるようにパラメータを決めていくやり方がある。これを**直接法**という。その中で、近似関数を多項式

$$y(x)=c_0+c_1x+c_2x^2+\cdots+c_nx^n \tag{4.1.1}$$

  で表したり、適当な関数系 $\{\phi_i(x)\}$ の1次結合

$$y(x)=c_0\phi_0(x)+c_1\phi_1(x)+\cdots+c_n\phi_n(x) \tag{4.1.2}$$

  で表し、その係数を変分パラメータする方法を**リッツの方法**と呼んでいる。

- コニー：直接法というのは境界条件の下で EL の式を解いていくというのではなく、いきなり汎関数を極値にする $y(x)$ を定めるという方法ね。付加条件がついている場合にも適用できるのかしら。

- K氏：うん、試行関数が付加条件を満たすようにしておけばよい。さて、リッツの方法は後で紹介するとして、次の非線型方程式の解を直接法で求めてみよう[1]。ε は十分小さいとしておく。$\varepsilon=0$ とすれば調和振動子の微分方程式だね。

$$\ddot{x}+\omega_0^2x+\varepsilon x^3=0 \tag{4.1.3}$$

  この微分方程式を EL の式と見做すとラグランジアンは

$$L=\frac{1}{2}\left(\dot{x}^2-\omega_0^2x^2\right)-\frac{\varepsilon}{4}x^4 \tag{4.1.4}$$

  となる。求める解（停留関数）は作用積分[2]

$$I=\int_{t_1}^{t_2}Ldt\longrightarrow\delta I=0 \tag{4.1.5}$$

---

[1] この非線形微分方程式は $Duffing$ 方程式と呼ばれる。詳細はレポート「対話・非線形振動（その１）」を参照されたし。

[2] $\displaystyle\int_{t_1}^{t_2}L(x,\dot{x},t)dt$ を作用積分という。

が停留値をとるものだ。いま ε が十分小さいので試行関数として A と ω をパラメータとする調和振動子の解を考える。すなわち

$$x(t) = A\sin\omega t \tag{4.1.6}$$

と置くとラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}(A^2\omega^2\cos^2\omega t - A^2\omega_0^2\sin^2\omega t) - \frac{\varepsilon}{4}A^4\sin^4\omega t \tag{4.1.7}$$

となる。境界条件は両端固定で $\delta x(t_1) = \delta x(t_2) = 0$ なので、任意の時刻 t_1, t_2 の区間を 1 周期 $(t_1 = 0, t_2 = 2\pi/\omega)$ と設定する。そうすると $\delta x(0) = \delta x(2\pi/\omega) = 0$ となるので境界条件を満たす。こうして

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{2\pi/\omega} L dt = \int_0^{2\pi/\omega}\left\{\frac{1}{2}(A^2\omega^2\cos^2\omega t - A^2\omega_0^2\sin^2\omega t) - \frac{\varepsilon}{4}A^4\sin^4\omega t\right\}dt \\ &= \frac{1}{2}A^2\frac{\pi}{\omega}(\omega^2 - \omega_0^2) - \frac{\varepsilon}{4}\frac{3}{4}\frac{\pi}{\omega}A^4 \end{aligned} \tag{4.1.8}$$

となる。汎関数 I はパラメータ A^2 の単なる関数となるので、I が極値をとる条件として

$$\frac{\partial I}{\partial A^2} = \frac{1}{2}\frac{\pi}{\omega}\left(\omega^2 - \omega_0^2 - \varepsilon\frac{3}{4}A^2\right) = 0$$

これから

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \varepsilon\frac{3}{4}A^2 = \omega_0^2\left(1 + \frac{3\varepsilon}{4\omega_0^2}A^2\right), \quad \therefore\ \omega = \omega_0\left(1 + \frac{3\varepsilon}{4\omega_0^2}A^2\right)^{1/2} \tag{4.1.9}$$

したがって近似解として

$$x(t) = A\sin\omega_0\left(1 + \frac{3\varepsilon}{4\omega_0^2}A^2\right)^{1/2} t \simeq A\sin\omega_0\left(1 + \frac{3\varepsilon}{8\omega_0^2}A^2\right)t \tag{4.1.10}$$

を得る。ところで (4.1.3) の厳密解は実は見出されていて

$$\frac{2\pi}{\omega} = \frac{4}{\omega_0}\int_0^{\pi/2}\left\{1 + \varepsilon\frac{A^2}{\omega_0^2}\left(1 - \frac{1}{2}\cos^2\theta\right)\right\}^{-\frac{1}{2}} d\theta \tag{4.1.11}$$

で与えられる。ε が十分小さいとして (4.1.11) の被積分項を展開して積分を実行すると

$$\frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{\omega_0}\left(1 - \frac{3\varepsilon}{8\omega_0^2}A^2 + \cdots\right) \tag{4.1.12}$$

を得る。一方、(4.1.9) を展開し ε の 1 次の項までとると

$$\frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{\omega_0}\left(1 + \frac{3\varepsilon}{4\omega_0^2}A^2\right)^{-\frac{1}{2}} \simeq \frac{2\pi}{\omega_0}\left(1 - \frac{3\varepsilon}{8\omega_0^2}A^2\right) \tag{4.1.13}$$

これは (4.1.12) と ε の 1 次の項で一致する。この例はうまい試行関数をとったから厳密解との一致精度が良かったわけだね。うまい試行関数を見つけるのこれといって決まった方法があるわけでなく、問題に応じて考えてやる必要があり、うまい選び方ができれば近似がよくなるが、そうでないときは当然精度が落ちる。

- コニー：変分法を使う場合、常にその辺りのことを留意しておく必要があるわね。
- K 氏：そうだね。次にリッツの方法を取り上げよう。

4.2　*Ritz* の方法

- K 氏：近似関数を多項式か適当な関数系 $\{\phi_i(x)\}$ の 1 次結合で表す[3]。

$$\begin{cases} y(c) = \sum_{i=0}^{n} c_i x^i \\ y(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i \phi_i(x) \end{cases} \tag{4.2.1}$$

係数 c_i を変分パラメータとすると、汎関数 $I[y]$ は c_i の単なる関数となるので

$$\frac{\partial I}{\partial c_1} = 0, \quad \frac{\partial I}{\partial c_2} = 0, \cdots, \frac{\partial I}{\partial c_n} = 0 \tag{4.2.2}$$

の連立方程式を解いて $c_1, c_2, \cdots, c_n$ を決める。 早速例題をやってみよう。

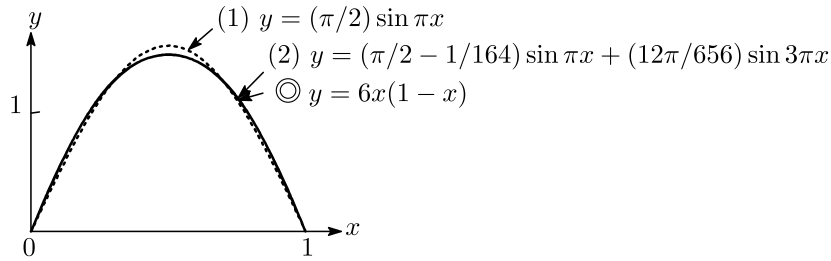
『境界条件 $y(0) = y(1) = 0$ と付加条件 $\int_0^1 y dx = 1$ の下で $I = \int_0^1 y'^2 dx$ を最小にする関数 $y(x)$ を直接法で求めよ。』

(1) 試行関数として境界条件は満たした三角関数 $y = c \sin \pi x$ とおいてみよう。付加条件より

$$c \int_0^1 \sin \pi x dx = 1, \quad \therefore c = \frac{\pi}{2} \tag{4.2.3}$$

これから $y = (\pi/2) \sin \pi x$ で、$I = \pi^4/8 = 12.176$ とあっさり求まった。

(2) 次に、近似精度を上げるために境界条件は満たした $y = c_1 \sin \pi x + c_2 \sin 3\pi x$ と置いてみる。付加条件より



$$c_1 \int_0^1 \sin \pi x dx + c_2 \int_0^1 \sin 3\pi x dx = \frac{2}{\pi}\left(c_1 + \frac{1}{3}c_2\right) = 1, \quad \therefore c_1 = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{3}c_2 \tag{4.2.4}$$

試行関数のパラメータを c_2 で表して $y = (\pi/2 - c_2/3) \sin \pi x + c_2 \sin 3\pi x$ とし、I を c_2 の関数と見做す。

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 y'^2 dx = \frac{1}{72}\pi^2(9\pi^2 - 12\pi c_2 + 328{c_2}^2) \\ \frac{\partial I}{\partial c_2} &= 0 \longrightarrow c_2 = 12\pi/656 \end{aligned} \tag{4.2.5}$$

この結果、$y = (\pi/2 - 1/164) \sin \pi x + (12\pi/656) \sin 3\pi x$ となり、$I = \int_0^1 y'^2 dx = 12.0276$ が得られる。この問題の正解は $y = 6x(1-x)$ で $I = 12$ なので、(1) に較べて近似精度はよくなっていることが分かる。

[3] 多項式で表されるのが一般的だが、境界条件が単純な場合は三角関数による展開が適している場合が多い。

- **Ex-11：** 境界条件 $y(0) = y(1) = 0$ の下で $\displaystyle\int_0^1 (y^2 - 12xy)dx$ を最小にする関数 $y(x)$ を直接法で求めよ。

- **Ans-11：**

(1) 試行関数を境界条件を満たす最小次数の多項式 $y(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2$ とする。境界条件より $c_0 = 0,\ c_1 = -c_2$ となるので

$$y(x) = cx(1-x) \qquad (c = c_1)$$

$$I[y] = \int_0^1 (y'^2 - 12xy)dx = -c + \frac{c^2}{3}, \quad \frac{dI}{dc} = 0 \longrightarrow c = \frac{3}{2}$$

したがって求める関数 $y(x)$ は $y(x) = (3/2)x(1-x)$ となり、I の最小値は -0.75 となる。真の最小値は -0.8 なので、まずまずの近似といえる。

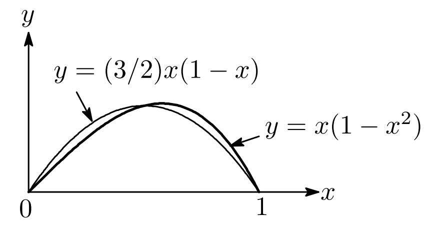
(2) 次に 3 次の項までとり、$y(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3$ としてみよう。境界条件より $c_0 = 0,\ c_1 + c_2 + c_3 = 0$。したがって

$$y(x) = -(c_2+c_3)x + c_2x^2 + c_3x^3, \quad I[y] = c_2 + c_2c_3 + \frac{c_2^2}{3} + \frac{8}{5}c_3 + \frac{4}{5}c_3^2$$

$$\frac{\partial I}{\partial c_2} = 1 + \frac{2}{3}c_2 + c_3 = 0, \quad \frac{\partial I}{\partial c_3} = \frac{8}{5} + c_2 + \frac{8}{5}c_3 = 0$$

$$\therefore\ c_2 = 0, \quad c_3 = -1 \longrightarrow c_1 = 1$$

したがって、近似関数は $y(x) = x - x^3$ となる。このとき I の最小値は -0.8 となり、真値と一致する。



- **Ex-12：** 境界条件 $y(0) = y(1) = 0$ をもつ常微分方程式 $y'' + x^2y - x = 0$ をリッツの方法で解け。

- **Ans-12：** 上の微分方程式を EL 方程式とする関数 $F(x, y, y')$ は

$$F(x, y, y') = y'^2 - x^2y^2 + 2xy \tag{4.2.6}$$

である。したがって汎関数

$$I[y] = \int_0^1 F(x, y, y')dx, \qquad y(0) = y(1) = 0 \tag{4.2.7}$$

が停留値をとる関数 $y(x)$ が与えられた微分方程式の解となる。 近似関数を多項式で展開して $y(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3$ とおく。境界条件より $c_0 = 0,\ c_1 + c_2 + c_3 = 0$ となるので

$$y(x) = -(c_2+c_3)x + c_2x^2 + c_3x^3$$

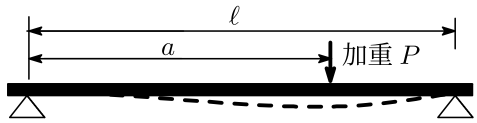
これを (4.2.7) に入れると

$$I[y] = -\frac{1}{6}c_2 + \frac{34}{105}c_2^2 + \frac{407}{420}c_2c_3 - \frac{4}{15}c_3 + \frac{488}{315}c_3 \tag{4.2.8}$$

次に $\partial I/\partial c_2 = 0,\ \partial I/\partial c_3 = 0$ の連立方程式を解いて $c_2 = -0.003294, c_3 = 0.174192$ を得る。したがって微分方程式の近似解は

$$y(x) = -0.170897x - 0.003294x^2 + 0.174192x^3$$

- **Ex-13：** 長さ ℓ の梁が $x = 0,\ x = \ell$ で支持されている。$x = 0$ から a なる点で y 方向に集中加重 P が作用したときのたわみ $y(x)$ を求めよ。ただし、$y(0) = 0,\ y(\ell) = 0$ である。



- **ans-13：** 梁のポテンシャルエネルギー V は、梁の材質のヤング率を E、断面 2 次モーメント I、曲げ剛性を EI とすると次式で与えられる。

$$V[y] = \frac{EI}{2}\int_0^{\ell}\left(\frac{d^2y}{dx^2}\right)dx - Py(a)$$

V が停留値をとる $y(x)$ が求める解となる。境界条件を満足させるように正弦関数の線形結合を近似関数にとると

$$\begin{aligned}
&y(x) = c_1\sin(\pi x/\ell) + c_2\sin(2\pi x/\ell) + c_3\sin(3\pi x/\ell) + \cdots \\
\therefore\ &y''(x) = -(\pi/\ell)^2\left\{c_1\sin(\pi x/\ell) + 2^2c_2\sin(2\pi x/\ell) + 3^2c_3\sin(3\pi x/\ell) + \cdots\right\} \\
&V[y] = (\pi^4 EI/4\ell^3)(c_1^2 + 2^4c_2^2 + 3^4c_3^2 + \cdots) - P\{c_1\sin(\pi a/\ell) + c_2\sin(2\pi a/\ell) + c_3\sin(3\pi a/\ell) + \cdots\}
\end{aligned}$$

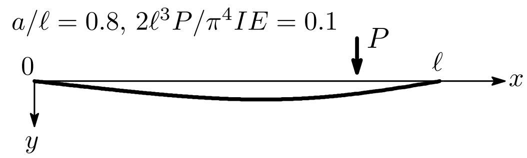
係数 $c_i\ (i = 1, 2, \cdots, n)$ は $\partial V/\partial c_i = 0\ (1 = 1, 2, \cdots, n)$ より

$$\begin{aligned}
&c_1 = \frac{2\ell^3P}{\pi^4IE}\sin(\pi a/\ell), \quad c_2 = \frac{2\ell^3P}{2^4\pi^4IE}\sin(2\pi a/\ell), \quad c_3 = \frac{2\ell^3P}{3^4\pi^4IE}\sin(3\pi a/\ell), \cdots, \\
&c_n = \frac{2\ell^3P}{n^4\pi^4IE}\sin(n\pi a/\ell)
\end{aligned}$$

と求まる。したがって V に停留値を与えるたわみ関数 $y(x)$ は

$$y(x) = \frac{2\ell^3P}{\pi^4IE}\left\{\sin(\pi a/\ell)\sin(\pi x/\ell) + \frac{1}{2^4}\sin(2\pi a/\ell)\sin(2\pi x/\ell) + \cdots\right\} \tag{4.2.9}$$

ちなみに第 2 項までの近似では最大たわみ箇所が加重点よりずれている。



- K氏：以上で第 4 話を終了する。最終回の第 5 話は変分法の応用例を取り上げる予定だ。

第5話　変分法の応用例

- K氏：応用例として解析力学と量子力学、量子化学を取りあげる。詳しいことはそれぞれのテキストで勉強していただくとして、主なものだけを紹介しておこう。

5.1　解析力学

5.1.1　最小作用の原理（Hamiltonの原理）

- K氏：自由度が n の力学系を考えよう。『初期時刻、終期時刻での位置が固定されたときの実際に実現される運動は、次の作用積分が極値を取るような運動である。』これを**最小作用の原理**とか**ハミルトンの原理**いう。

$$S=\int_{t_1}^{t_2} L dt, \qquad L=L(q_1,q_2,\cdots,q_n,\dot{q}_1,\dot{q}_2,\cdots,\dot{q}_n) \tag{5.1.1}$$

L はラグランジアンで一般化座標 q_i とその時間微分 $\dot{q}_i$ の関数だ[1]。δS の第1変分だけに注目すると、第1話の変分計算と同じようにして

$$\begin{aligned}
\delta S &= \delta\int_{t_1}^{t_2} L(q_1,q_2,\cdots,q_n,\dot{q}_1,\dot{q}_2,\cdots,\dot{q}_n)dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2} L(q_1+\delta q_1,\cdots,q_n+\delta q_n,\dot{q}_1+\delta\dot{q}_1,\cdots,\dot{q}_n+\delta\dot{q}_n,t)dt-\int_{t_1}^{t_2} L(q_1,\cdots,q_n,\dot{q}_1,\cdots,\dot{q}_n)dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q_1}\delta q_1+\cdots+\frac{\partial L}{\partial q_n}\delta q_n+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}\delta\dot{q}_1+\cdots+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n}\delta\dot{q}_n\right)dt \qquad \text{：2 次以上の項は省略} \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta\dot{q}_i\right)dt \qquad \text{：第 2 項を部分積分して} \\
&= \int_{t_1}^{t_2}dt\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right\}\delta q_i(t)+\left[\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i(t)\right]_{t_1}^{t_2} \qquad \text{：両端固定 } \delta q_i(t_1)=\delta q_i(t_2)=0 \\
&= \int_{t_1}^{t_2}dt\sum_{i=1}^{n}\left\{\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right\}\delta q_i(t) \qquad \text{：} \delta q_i(t) \text{ は任意の変分} \\
&= 0
\end{aligned} \tag{5.1.2}$$

$\delta q_i(t)$ は任意の変分なので、$\delta S=0$ を満たす方程式として次の EL の式がでてくる。

$$\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)=0 \qquad (i=1,2,\cdots,n) \tag{5.1.3}$$

---

[1] ラグランジアンが時間を陽に含む場合は $L=L(q_1,\cdots,q_n,\,\dot{q}_1,\cdots,\dot{q}_n,\,t)$ と書かれる。具体的には摩擦力などの外力が働く場合で、エネルギー保存則は成立しない。このような力学系をエネルギー散逸系という。

あるいは、L は t を陽に含んでいないので (2.1.4) より

$$L-\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\mathtt{const} \tag{5.1.4}$$

と表すこともできる。なお、ここで留意して欲しいのは、(5.1.3) で EL の式がでてくる時、任意の変分は δq_i だけしか顔をださなかった点だ。$\delta\dot{q}_i$ の項は部分積分で両端固定の境界条件により消え去ったね。

解析力学のテキストには“ $\dot{q}_i$ を独立変数と考えて ”と書かれているが、$\dot{q}_i=dq_i(t)/dt$ から分かるように $\dot{q}_i$ と q_i は従属関係にあると考えられるね。というのは上の変分計算で $q_i\to q_i+\delta q_i$ としたとき、それに連動して $\dot{q}_i\to\dot{q}_i+\delta\dot{q}_i$ と僅かにずれているだろ。独立なら連動するはずがないね。ではなぜ $\dot{q}_i$ を独立変数と考えるのだろうか。

(5.1.3) の EL の式を見ると L を $\dot{q}_i$ で偏微分している、ということは変数 $q_i(t)$ を固定しておいて $\dot{q}_1$ をわずかに変化させるということなので、$\dot{q}_1$ を独立変数と考えてなにか文句ある？といわれてもすぐには反論ができない（笑い)。深入りすると面倒そうなので、ここは形式的に L を $\dot{q}_i$ で偏微分すると割り切って考えておこう。

- コニー：解析力学で、系の各瞬間の運動は $2n$ 個の座標 $q_1,\cdots,q_n,\,p_1,\cdots,p_n$ からなる位相空間内の 1 点で表されると習ったわ。平たくいえば、q_i と $\dot{q}_i$ の 2 つを決めればその瞬間の運動は完全に決まるということね。ラグランジュの理論はそこを出発点としていると思うの。だから実際はともかくとして、理論を展開していく上で q_i と $\dot{q}_i$ とは独立したものと考えていこうということだと思うけど。

- K氏：そうだね。ところでラグランジアンを q_i の時間微分を含んだ $L(\boldsymbol{q},\dot{\boldsymbol{q}})$ とする代わりに、微分の階数を 1 階落とした $L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{v})$ として、作用積分

$$S=\int_{t_1}^{t_2}L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{v})dt \tag{5.1.5}$$

が停留値をとる必要条件を求めてみよう。ここで付加条件として

$$\boldsymbol{v}=\dot{\boldsymbol{q}} \tag{5.1.6}$$

を加えておく。ベクトル表記で書いたので $\boldsymbol{q}=(q_1,\cdots,q_n)$, $\boldsymbol{v}=(\dot{q}_1,\cdots,\dot{q}_n)$ を表すことに注意。L を $\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{v}$ で表すと、$\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{v}$ はそれぞれ独立変数として振舞ってくるんだね。付加条件付の変分問題なので、ラグランジュの未定乗数 $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_1(t),\cdots,\lambda_n(t))$ を導入し、$J=L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{v})-\boldsymbol{\lambda}\cdot(\boldsymbol{v}-\dot{\boldsymbol{q}})$ とおいて

$$\begin{aligned}\delta J&=\delta\int_{t_1}^{t_2}\{L(\boldsymbol{q},\boldsymbol{v})-\boldsymbol{\lambda}\cdot(\boldsymbol{v}-\dot{\boldsymbol{q}})\}dt\\&=\sum_{i=1}^{n}\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i+\frac{\partial L}{\partial v_i}\delta v_i-\lambda_i\delta v_i+\lambda_i\delta\dot{q}_i\right)dt\\&=\sum_{i=1}^{n}\int_{t_1}^{t_2}\left\{\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i+\lambda_i\delta\dot{q}_i+\left(\frac{\partial L}{\partial v_i}-\lambda_i\right)\delta v_i\right\}dt\\&=0\end{aligned} \tag{5.1.7}$$

右辺第 2 項は部分積分により

$$\int_{t_1}^{t_2}\lambda_i\delta\dot{q}_i dt=\int_{t_1}^{t_2}\lambda_i\frac{d}{dt}(\delta q_i)=\big[\lambda_i\delta q_i\big]_{t_1}^{t_2}-\int_{t_1}^{t_2}\dot{\lambda}_i\delta q_i dt=-\int_{t_1}^{t_2}\dot{\lambda}_i\delta q_i dt$$

となるので (5.1.7) は

$$\delta J = \sum_{i=1}^{n} \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \dot{\lambda}_i \right) \delta q_i + \left(\frac{\partial L}{\partial v_i} - \lambda_i \right) \delta v_i \right\} dt = 0 \tag{5.1.8}$$

ここで δq_i と δv_i を**それぞれ独立した変分**と考えると

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \dot{\lambda}_i = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v_i} - \lambda_i = 0 \tag{5.1.9}$$

が成り立つ。これから

$$\lambda_i = \frac{\partial L}{\partial v_i}, \quad \dot{\lambda}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{5.1.10}$$

がでてくる。$d\lambda_i/dt = \dot{\lambda}_i$ なので、上式より

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial v_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad \text{ただし } v_i = \dot{q}_i, \qquad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{5.1.11}$$

これは (5.1.3) の EL の式と一致する。

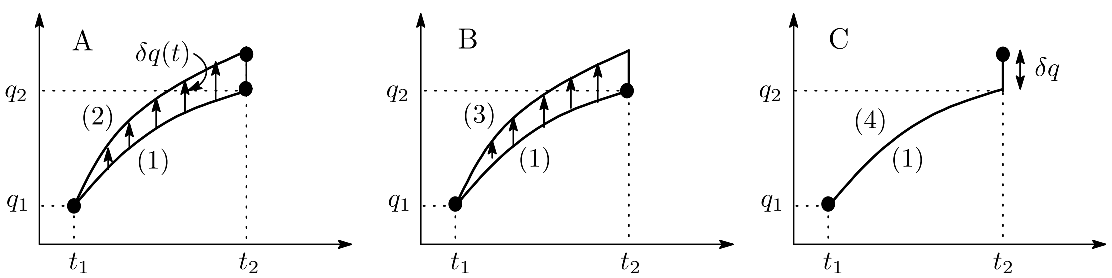
- コニー：運動の瞬間は位相空間内の $\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{p}(= m\boldsymbol{v})$ の 2 つの座標を決めれば完全に決まるということね。

5.1.2　ハミルトン・ヤコビの方程式

- K氏：解析力学では、EL の方程式や正準方程式と並んでハミルトン・ヤコビ方程式の勉強をするだろう。ハミルトン・ヤコビ方程式の説明は解析力学のレポートなどを参照していただくとして、ここでは変分原理からこの方程式が導出されることを紹介しておこう。 簡単のために自由度が 1 ($n = 1$) の場合を考えよう。作用積分は

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt \tag{5.1.12}$$

だ。最小作用の原理によれば、実際に実現される運動の経路は、初期時刻 t_1 で $q(t_1) = q_1$ から出発し終期時刻 t_2 で到達地点 $q(t_2) = q_2$ に達する経路のなかの S が最小値をとる経路だった。



いま、初期時刻 t_1 で q_1 から出発し、終時刻 t_2 で到着点が $q_2 + \delta q$ になった経路を図 A-(2) としよう。(2) の経路は (1) とは異なるが、最終到達点が $q_2 \to q_2 + \delta q$ に変更しただけなので EL の運動方程式を満たす。当然、作用積分の値は経路 (1) の場合とは異なる。ところが、図-B の (3)

のように、途中経路は図 A(2) のように (1) からわずかにずれるが、最終到達点が (1) と同じになれば、(1) の経路と (3) の経路の S の値は同じ、つまり S は停留値をとる。そこで 経路 (1) と (2) の作用積分の差を計算してみよう。$t=t_1$ で q が固定：$\delta q(t{=}t_1)=0$ ということと、運動の経路上では EL の式が成り立つことに注意すれば

$$\begin{aligned}
&\int_{t_1}^{t_2} L(q+\delta q,\dot q+\delta\dot q)dt-\int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot q)dt\\
&=\int_{t_1}^{t_2} dt\left\{\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\right\}\delta q(t)+\left[\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta q(t)\right]_{t_1}^{t_2}\\
&=\int_{t_1}^{t_2} dt\left\{\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\right\}\delta q(t)+\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta q(t_2)\\
&=\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta q(t_2)=p\delta q(t_2)\qquad\quad (p\equiv \partial L/\partial\dot q|_{t=t_2})
\end{aligned}\tag{5.1.13}$$

となり、積分の中間領域に依存せず終期時刻 t_2 における $(\partial L/\partial\dot q)\delta q(t_2)$ だけが残る[2]。

以上の結論をベースに、終期時刻 t_2 で到達点 $q_2(t_2)$ が固定されていない場合、S の時々刻々の変化を求めてみよう。運動の経路は EL の式が成立しているとする。$t=t_2$ での最終到達点の座標 q_2 は $t=t_2$ の関数になるので、作用積分は

$$S=S(q(t_2),t_2)=\int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot q)dt \tag{5.1.14}$$

と表せる。これを t_2 で微分すると

$$\frac{dS}{dt_2}=L(q(t_2),\dot q(t_2)) \tag{5.1.15}$$

一方、S は $q(t_2)$ と t_2 の関数なので

$$\frac{dS}{dt_2}=\frac{\partial S}{\partial q_2}\frac{dq_2}{dt_2}+\frac{\partial S}{\partial t_2},\qquad q_2\equiv q(t_2) \tag{5.1.16}$$

と書ける。右辺の偏微分 $\partial S/\partial q_2$ は時刻 t_2 を固定したときの $q(t_2)$ についての微分なので

$$\frac{\partial S}{\partial q_2}=\lim_{\delta q_2\to 0}\frac{S(q_2+\delta q_2,t_2)-S(q_2,t_2)}{\delta q_2} \tag{5.1.17}$$

と表せる（図-C を参照されたし）。右辺の分子は

$$\begin{aligned}
S(q_2+\delta q_2,t_2)-S(q_2,t_2)&=\int_{t_1}^{t_2} L(q+\delta q,\dot q+\delta\dot q)dt-\int_{t_1}^{t} L(q,\dot q)dt\\
&=\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q+\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta\dot q\right)dt\\
&=\int_{t_1}^{t_2} dt\left\{\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\right\}\delta q(t)+\left[\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta q(t)\right]_{t_1}^{t_2}\\
&=\frac{\partial L}{\partial \dot q}\delta q_2=p_2\delta q_2\qquad (p_2\equiv\partial L/\partial\dot q_2)
\end{aligned}\tag{5.1.18}$$

[2] p を運動量とすれば、運動量保存則は空間の併進対称性と結びついていることがでてくる。詳しい議論は『いろもの物理 Tips 集』http://homepage3.nifty.com/iromono/PhysTips/index.html を参照されたい。

となるので、(5.1.17) に入れて

$$\frac{\partial S}{\partial q_2} = p_2 \tag{5.1.19}$$

を得る。これが時刻 t_2 を固定して $q(t_2)$ をわずかにずらせた時の S の変化だ。作用 S を座標 q で偏微分したものは対応する運動量 p（共役運動量）に等しいことを意味する。
(5.1.15) と (5.1.17) より

$$\frac{\partial S}{\partial t_2} + p_2 \frac{dq_2}{dt_2} - L(q(t_2), \dot{q}(t_2)) = 0 \tag{5.1.20}$$

となり、ハミルトン関数を $H(q,p) \equiv p\dot{q} - L$ で定義すれば

$$\frac{\partial S}{\partial t_2} + H\left(q_2, \frac{\partial S}{\partial q_2}\right) = 0 \tag{5.1.21}$$

と表される。t_2 をあらためて t と書くと

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = 0 \tag{5.1.22}$$

となる。この式は**ハミルトン・ヤコビの方程式**と呼ばれる。自由度 n の力学系でハミルトン関数が時間 t を陽に含む場合には

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_1, \cdots, q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial S}{\partial q_n}, t\right) = 0 \tag{5.1.23}$$

と表される[3]。S をハミルトンの主関数という。

ちょっと抽象的な話が続いたので、調和振動子の運動をハミルトン・ヤコビの方程式で書くとどうなるかを見ておこう。ラグランジアンは $L = (m/2)(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)$ で、ハミルトン関数は $H = p^2/2m + (k/2)q^2$ と表される。ただし、$\omega = (k/m)^{1/2}$。$p = \partial S/\partial q$ なので調和振動子のハミルトン・ヤコビの方程式は (5.1.22) より

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}kq^2 = 0 \tag{5.1.24}$$

この偏微分方程式は q と t の変数分離法で解けて、初期値 $t = 0$: $q = q_0$ とすると $q = q_0 \cos\omega t$ が得られる。ついでにハミルトンの主関数は

$$S = \frac{m\omega}{2\sin\omega t}\{(q^2 + q_0^2)\cos\omega t - 2qq_0\} \tag{5.1.25}$$

と求められる。

5.2　量子力学

- K氏：古典力学では $\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0$ を満たす L は運動方程式であるオイラー・ラグランジュの方程式を満たした。量子力学の世界では $\delta E[\psi] = 0$ を満たす ψ は、シュレーディンガー方程式を満たすことを以下に示そう。ハミルトニアンを H、系の任意の状態を ψ として

$$E[\psi] = \frac{\langle\psi|\, H \,|\,\psi\rangle}{\langle\psi|\,\psi\rangle} \tag{5.2.1}$$

[3]『解析力学』(http://ocw.tsukuba.ac.jp/) や『正準変換を使わない Hamilton-Jacob 方程式の導出』(http://mira.bio.fpu.ac.jp/tadas/export/phys/hj.pdf)、『解析力学講義ノート 8』(http://www-het.phys.sci.osaka-u.ac.jp/ higashij/lecture/am03/lec8.pdf) を参考にした。

という量を考える[4]。これは系のエネルギーの期待値を与えるが、ここでは $E[\psi]$ は状態関数 ψ の汎関数とみなす。(5.2.1) を次のように書き換えておく。

$$E\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle \tag{5.2.2}$$

ψ の変分を $\delta\psi$ とし $\psi \to \psi + \delta\psi$ としたとき、汎関数 $E[\psi]$ の変分を計算すると

$$\begin{aligned} \delta(E\langle\psi|\psi\rangle) &= \delta E\langle\psi|\psi\rangle + E\delta\langle\psi|\psi\rangle = \delta\langle\psi|H|\psi\rangle \\ \therefore\ \delta E\langle\psi|\psi\rangle &= \delta\langle\psi|H|\psi\rangle - E\delta\langle\psi|\psi\rangle \end{aligned} \tag{5.2.3}$$

$\delta\psi$ の 2 次以上を無視すると

$$\begin{aligned} &\delta\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi+\delta\psi|H|\psi+\delta\psi\rangle - \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\delta\psi|H|\psi\rangle + \langle\psi|H|\delta\psi\rangle \\ &\delta\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi+\delta\psi|\psi+\delta\psi\rangle - \langle\psi|\psi\rangle = \langle\delta\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\delta\psi\rangle \end{aligned} \tag{5.2.4}$$

となる。これを (5.2.3) に入れると

$$\begin{aligned} \delta E\langle\psi|\psi\rangle &= \langle\delta\psi|H|\psi\rangle + \langle\psi|H|\delta\psi\rangle - E\left\{\langle\delta\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\delta\psi\rangle\right\} \\ &= \langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle \\ \therefore\ \delta E &= \frac{\langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \end{aligned} \tag{5.2.5}$$

$\langle\psi|\psi\rangle \neq 0$ なので $E[\psi]$ が停留値 $\delta E = 0$ をとる条件は

$$\langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle = 0 \tag{5.2.6}$$

となる。$|\delta\psi\rangle$ は任意の変分なので $|\delta\psi\rangle$ を $i\,|\delta\psi\rangle$ で置き換えても問題ない。そうすると (5.2.6) は、$i\,|\delta\psi\rangle \leftrightarrow -i\,\langle\delta\psi|$ の関係に留意して

$$\begin{aligned} i\ \langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle - i\ \langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle = 0 \\ \therefore\quad \langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle - \langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle = 0 \end{aligned} \tag{5.2.7}$$

となる。そこで、(5.2.6) と (5.2.7) を組み合わせると

$$\langle\psi|H-E|\delta\psi\rangle = 0, \qquad \langle\delta\psi|H-E|\psi\rangle = 0 \tag{5.2.8}$$

となる。$\delta\psi$ は任意の変分なので、$\delta E = 0$ となる条件として

$$\langle\psi|H-E| = 0, \quad (H-E)\,|\psi\rangle = 0 \tag{5.2.9}$$

あるいは

$$(H^\dagger - E^*[\psi])\,|\psi\rangle = 0, \quad (H - E[\psi])\,|\psi\rangle = 0 \tag{5.2.10}$$

を得る。H はエルミート演算子 ($H^\dagger = H$)、E は実数なので、これらの式は

$$(H-E)\,|\psi\rangle = 0 \tag{5.2.11}$$

[4] ブラケット記法については量子力学のコーナーの『ブラ・ケット算法』や『座標表示と運動量表示について』のレポートを参照されたし。

と表すことができるね。以上のことから、$\delta E[\psi]=0$ を与える ψ はシュレーディンガー方程式 $(H-E)\left|\psi\right\rangle=0$ を満足しなければならないことが示された。 以上の議論を要約すると、変分方程式

$$\delta E[\psi]=0 \tag{5.2.12}$$

は固有値方程式

$$H\left|\psi\right\rangle=E\left|\psi\right\rangle \tag{5.2.13}$$

と同等であるということだね。

- コニー：なるほど、$E[\psi]$ に停留値を与える ψ はすべて H の固有関数で、E はそれぞれの固有関数に対応した固有値 ($H\psi=E\psi$) ということね。
- K 氏：同様の結論はラグランジュの未定乗数法を使っても得られる。エネルギー $E[\psi]$ が極小値をとる必要条件として、積分形の付加条件

$$\int\psi^*\psi d\tau=1\longrightarrow\langle\psi|\,\psi\rangle=1 \tag{5.2.14}$$

のもとで

$$\delta\int\psi^*H\psi d\tau=0\longrightarrow\delta\langle\psi|\,H|\,\psi\rangle=0 \tag{5.2.15}$$

とする。これはラグランジュの未定乗数を λ として次の変分計算と同じになる。

$$\delta\left(\int\psi^*H\psi d\tau-\lambda\int\psi^*\psi d\tau\right)=0\longrightarrow\delta\langle\psi|\,H|\,\psi\rangle-\delta(\lambda\langle\psi|\,\psi\rangle)=0 \tag{5.2.16}$$

後の計算は上でやったのと同じだから省略するが、未定乗数 λ は H の固有値となり、ψ はシュレーディンガー方程式を満たす。

さて、ハミルトニアン H の固有値を小さいほうから $E_0,\,E_1,\,E_2,\cdots$ とし、その固有関数をそれぞれ $\phi_0,\,\phi_1,\phi_2,\cdots$ としよう。そうすると $E[\psi]$ は

$$E[\psi]\geq E_0 \tag{5.2.17}$$

となることを以下に示そう。任意の規格化された ψ は H の固有関数系で展開できるので

$$\psi=\sum_i c_i\phi_i,\quad \sum_i|c_i|^2=1 \tag{5.2.18}$$

$E[\psi]$ は

$$E[\psi]=\ \langle\psi|\,H|\,\psi\rangle=\sum_{j.i}c_i^*c_j\left\langle i\left|H\right|j\right\rangle=\sum_i\left|c_i\right|^2E_i \tag{5.2.19}$$

と展開でき、

$$E_0=\sum_i\left|c_i\right|^2E_0 \tag{5.2.20}$$

とおけるので、これを上の両辺よりそれぞれ差し引くと

$$\begin{aligned}&E[\psi]-E_0=\sum_n\left|c_i\right|^2(E_i-E_0)\geq 0\\&\therefore\ E[\psi]\geq E_0\end{aligned} \tag{5.2.21}$$

なお、ψ が規格化されていない場合は

$$E[\psi]=\frac{\langle\psi|\,H|\,\psi\rangle}{\langle\psi|\,\psi\rangle}\geq E_0 \tag{5.2.22}$$

となる。

- コニー：$E[\psi]$ は変分計算によるエネルギーの期待値で、一方、E_0 は系の基底エネルギーだわね。ψ が系の固有関数 ϕ_0 に等しければ等号が成立するけど、そうでない近似関数であれば E は E_0 の上限を与えるということね。

- K氏：そうだね。ところで簡単な系以外で正確な固有関数を求めることはほとんど絶望的なので近似関数（試行関数）をつかった変分法がよく用いられる。詳しい計算例などは量子力学のテキストに譲るとして、そのステップは次の通りだ。

  (1) 物理的考察から、いくつかのパラメータ $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ を含む試行関数 ψ を選ぶ。

  (2) エネルギー期待値 $E(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n) = \int \psi^* H\psi d\tau / \int \psi^* \psi d\tau$ を計算する。

  (3) $\partial E/\partial\alpha_i = 0\,(i = 1, 2, \cdots, n)$ となるようにパラメータ α_i を決めていく。

  (4) 得られた ψ を使って E を求める。

  このようにして得られたエネルギー E は $E \geq E_0$ であること以外、どの程度真値からずれているかを知ることは一般には困難という限界がある。

• **Ex-14** 1 次元調和振動子のハミルトニアンは $H = -(\hbar^2/2)d^2/dx^2 + (1/2)kx^2$ で与えられる。基底状態の波動関数をパラメータ $a\,(a > 0)$ として $\psi(x) = e^{-ax^2}$ と近似して変分法により基底状態のエネルギーを求めよ。

• **Ans-14** 基底状態のエネルギーの期待値は

$$E(a) = \int \psi^* H\psi dx \Big/ \int \psi^* \psi dx$$

$$\begin{aligned}
\int \psi^* H\psi dx &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right]e^{-ax^2}dx \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}4a^2 + \frac{1}{2}k\right)\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2ax^2}dx + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)(-2a)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}dx \\
&= \left(-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{k}{2}\right)\frac{1}{4a}\left(\frac{\pi}{2a}\right)^{1/2} + \frac{a\hbar^2}{m}\left(\frac{\pi}{2a}\right)^{1/2} \\
\int \psi^* \psi dx &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}dx = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^{1/2} \\
\therefore\ E(a) &= \frac{a\hbar^2}{2m} + \frac{k}{8a}
\end{aligned}$$

ここで公式 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2}dx = (\pi/2a)^{1/2}$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2ax^2}dx = (1/4a)(\pi/2a)^{1/2}$ を使った。

$$\frac{dE(a)}{da} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{k}{8a^2} = 0 \longrightarrow a = \frac{(mk)^{1/2}}{2\hbar}$$

$$\therefore\ \psi(x) = \exp\left[-\frac{(mk)^{1/2}}{2\hbar}x^2\right], \qquad E = \frac{h\omega}{4\pi} = \frac{h\nu}{2}$$

5.2.1　リッツの変分法

- K氏：試行関数を任意に選んだ n 個の直交関数 $\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_n$ の線形結合

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \cdots + c_n\phi_n \tag{5.2.23}$$

で表し、展開係数 c_i を調節して $E[\phi]$ を最小化する方法を**リッツの変分法**とか**レーリー・リッツの変分法**と呼んでいる[5]。エネルギーの期待値は次式で与えられる。

$$E[\psi]=\frac{\langle\psi|\,H\,|\,\psi\rangle}{\langle\psi|\,\psi\rangle}=\frac{\displaystyle\sum_{i,j=1}^{n}c_i^*c_j\,\langle\phi_i|\,H\,|\,\phi_j\rangle}{\displaystyle\sum_{i=1}^{n}c_i^*c_j\,\langle\phi_i|\,\phi_j\rangle}=\frac{\displaystyle\sum_{i,j=1}^{n}c_i^*c_jH_{ij}}{\displaystyle\sum_{i=1}^{n}c_i^*c_i},\qquad H_{ij}=\langle\phi_i|\,H\,|\,\phi_j\rangle \tag{5.2.24}$$

また、

$$\frac{\partial}{\partial c_i^*}\sum_{i,j=1}^{n}c_i^*c_jH_{ij}=\sum_{j=1}^{n}c_jH_{ij}\quad\frac{\partial}{\partial c_i^*}\sum_{i=1}^{n}c_i^*c_i=c_i \tag{5.2.25}$$

変分パラメータ c_i^* の変化に対して $E[\psi]$ が極値をとる条件は次の連立方程式が成立すること。

$$\frac{\partial}{\partial c_i^*}E[\psi]=0\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{5.2.26}$$

(5.2.24) より

$$\begin{aligned}E\sum_{i=1}^{n}c_i^*c_i&=\sum_{i,j=1}^{n}c_i^*c_jH_{ij}\\ \therefore\ \frac{\partial E}{\partial c_i^*}\sum_{i=1}^{n}c_i^*c_i+Ec_i&=\sum_{j=1}^{n}c_jH_{ij}\end{aligned} \tag{5.2.27}$$

ここで $\partial E/\partial c_i^*=0$ とおくと、パラメータ c_i を未知数とする次の同次連立方程式が得られる。

$$\begin{aligned}c_1(H_{11}-E)+c_2H_{12}+\cdots+c_nH_{1n}&=0\\ c_1H_{21}+c_2(H_{22}-E)+\cdots+c_nH_{2n}&=0\\ &\vdots\\ c_1H_{n1}+c_2H_{n2}+\cdots+c_n(H_{nn}-E)&=0\end{aligned} \tag{5.2.28}$$

これは行列を使えば次の形の書ける。

$$\begin{bmatrix}H_{11}-E & H_{12} & \cdots & H_{1n}\\ H_{21} & H_{22}-E & \cdots & H_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn}-E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_4\end{bmatrix}=\mathbf{0} \tag{5.2.29}$$

パラメータ c_i がすべて 0 でない解をもつための必要十分条件は行列式

$$\begin{vmatrix}H_{11}-E & H_{12} & \cdots & H_{1n}\\ H_{21} & H_{22}-E & \cdots & H_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn}-E\end{vmatrix}=0 \tag{5.2.30}$$

(5.2.30) を**永年行列式**と呼んでいる。これは E の n 次方程式で、n 個の解を小さいほうから順番に $E_1,E_2,\cdots,E_n$ とし、真のエネルギー固有値 $\mathcal{E}$ を小さい順番に $\mathcal{E}_1,\mathcal{E}_2,\cdots,\mathcal{E}_n$ とすれば、常に $E_i\geq\mathcal{E}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ となる。

[5] 本当は $Eckart$ の変分法が正しい言い方だろう。C.Eckart, $Phys.\,Rev$, $36, 878(1930)$

- コニー：E_1 を系の基底状態のエネルギーとすると $E_2, \cdots, E_n$ は励起状態のエネルギーということになるわけ？

- K 氏：そうなんだ、あくまて近似値だけどリッツの変分法では基底状態のエネルギー値はもとより励起状態のエネルギー値も求まるという大変重宝なものなんだね。なお、各状態に対応した $\psi_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ は E_i を (5.2.28) に入れて $\{c_i\}$ を求めることで決定できる。この際、$\langle\psi_i|\,\psi_i\rangle = 1$ という規格化条件を忘れてはいけないけどね。

5.3　量子化学

5.3.1　分子軌道法 (Molecular Orbital Method)

- K 氏：　最後に量子化学への応用として分子軌道法について少し触れておこう[6]。分子は電子が分子全体に拡がった分子軌道 ψ^{MO} をもち、この軌道は既知の n 個の原子軌道 $\{\chi_i\}$ の線形結合で表されると仮定する（LCAO 近似：Linear Combination 0f Atomic Orbitals)。

$$\psi^{MO} = c_1\chi_1 + c_2\chi_2 + \cdots + c_n\chi_n = \sum_{i=1}^{n} c_i\chi_i \tag{5.3.1}$$

以後 ψ^{MO} を単に ψ と書くことにする。分子の共有結合エネルギーは

$$E[\psi] = \frac{\langle\psi|\,H|\,\psi\rangle}{\langle\psi|\,\psi\rangle} = \frac{\displaystyle\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j \langle\chi_i\,|H|\,\chi_j\rangle}{\displaystyle\sum_{i=1}^{n} c_i^* c_j \langle\chi_i|\,\chi_j\rangle} = \frac{\displaystyle\sum_{i,j=1}^{n} c_i^* c_j H_{ij}}{\displaystyle\sum_{i=1}^{n} c_i^* c_i S_{ij}}, \qquad 、H_{ij} = \langle\chi_i\,|H|\,\chi_j\rangle \tag{5.3.2}$$

で表される。化学結合が形成される場合は，原子と原子のそれぞれの軌道は直交しなくなるので、$i \neq j$ の場合、$\langle\chi_i|\,\chi_j\rangle \neq 0$ となることに注意。これは各原子軌道の重なり（非直交性）具合を表していると考えられるので、$S_{ij} = \langle\chi_i|\,\chi_j\rangle = \int \chi_i^*\chi_j d\tau$ を**重なり積分**と呼んでいる。また、H_{ij} の中で $H_{ii} = \langle\chi_i\,|H|\,\chi_i\rangle = \int \chi_i^* H\chi_i d\tau$ を**クーロン積分**と呼んで通常 α で表され、$H_{ij} = \langle\chi_i\,|H|\,\chi_j\rangle = \int \chi_i^* H\chi_j d\tau\,(i \neq j)$ を**共鳴積分**と呼んで通常 β で表される。

- コニー：具体的な計算例を上げていただけるかしら？

- K 氏：そうだね、水素分子イオン $H_2{}^+$ の場合を見てみよう。水素イオン分子は A、B2 個の陽子と 1 個の電子からなっている。分子軌道を ψ として

$$\psi = c_A\chi_A + c_B\chi_B \tag{5.3.3}$$

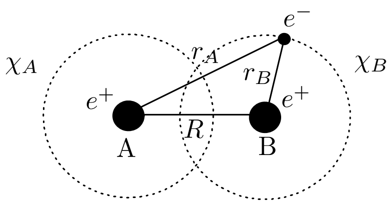
とおく。ハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_A} + \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o R^2} \tag{5.3.4}$$

r_A, r_B を陽子 A, B と電子との距離、R は陽子間の距離を表す。原子軌道はボーア半径を a_B とすると

$$\chi_A = (a_B/\sqrt{\pi})e^{-r_A/a_B},\ \chi_B = (a_B/\sqrt{\pi})e^{-r_B/a_B} \tag{5.3.5}$$

[6]詳細は「量子力学のコーナーの『Mathematica による Huckel の分子軌道計算』や『(対話)Mathematica による Huckel の分子軌道計算』のレポートを参照されたい。



LCAO 法の場合、普通の第 0 近似では $S_{ij} = 0 (i \neq j)$ として計算を簡略化するが、ここでは残しておく。永年行列式は

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta - ES \\ \beta - ES & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \tag{5.3.6}$$

となり、これを E について解くと

$$E_a = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}, \quad E_b = \frac{\alpha + \beta}{1 + S} \tag{5.3.7}$$

が得られる。

詳細な計算結果は脚注に記したレポートを参照されたいが、E_a は R の増加に伴って単調に減少し、E_b は Morse 関数に似た極小を示す。それぞれに対応した分子軌道は

$$\psi_a = \frac{\chi_A - \chi_B}{\sqrt{2(1 - S)}}, \quad \psi_b = \frac{\chi_A + \chi_B}{\sqrt{2(1 + S)}} \tag{5.3.8}$$

となる。ψ_a は反結合性軌道 (anti-binding orbital)、ψ_b は結合性軌道 (binding orbital) を表し、それぞれの結合エネルギーは E_a, E_b となる。

- コニー：いまの場合は最も簡単な分子だったけど、もっと複雑な分子にも拡張できるわけね。
- K 氏：うん、詳しいことに興味があれば先ほど言ったレポートが参考になると思う。

さて、第 5 話まで続いた変分法のお話もこれで終了だ。長い間お疲れ様でした。

（了）

関連図書

[1] 高橋康監訳・一柳正和訳/C. Lanczos： 解析力学と変分原理, 日刊工業新聞社, 1992

[2] 篠崎寿夫・松永徳衛・吉田政廣：現代工学のための変分学入門, 現代工学社, 2000

[3] 後藤憲一訳/J.W.CRAGGS：変分法 共立出版, 昭和 50 年

[4] 林毅・村外志夫：変分法, コロナ社, 昭和 44 年

[5] 小野寺嘉孝：物理のための応用数学, 裳華房, 1997

[6] 大野公一：量子化学演習, 岩波書店, 2009

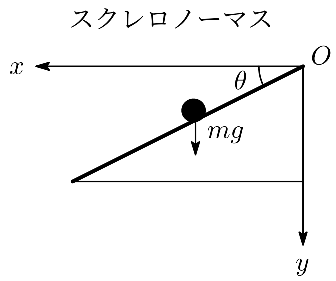
[7] 湯川泰秀・三川禮・伊藤一夫訳/J.D.Roberts：分子軌道法計算入門, 廣川書店, 昭和 43 年

■おまけの蛇足：ホロノミックと非ホロノミックについて

ホロノミックな付加条件[7]というのは

$$f(q_1, q_2, \cdots, q_n, t) = 0 \tag{5.3.9}$$

で表される付加条件で、時間 t を陽に含む場合とそうでない場合の2種類に分類されます。付加条件が時間 t に依存する場合は**レオノーマス**($rheonomous$)、時間に無関係な場合は**スクレロノーマス**($scleronomous$)[8]と呼ばれます。スクレロノーマスの具体的な例として斜面上を滑り落ちる質点の運動を考えてみましょう。



ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - mgy \tag{5.3.10}$$

で表され、質点は斜面上に拘束されているので、拘束条件として

$$f(x, y, \theta) = 0 \longrightarrow y - x\tan\theta = 0 \tag{5.3.11}$$

(5.3.11) から $y = x\tan\theta$、これを (5.3.10) に入れると

$$L = \frac{1}{2}m\frac{\dot{x}^2}{\cos^2\theta} - mgx\tan\theta \tag{5.3.12}$$

となり、付加条件の付かないというか取り込んだラグランジアンが得られます。あとは EL 方程式を解けばよいわけです。

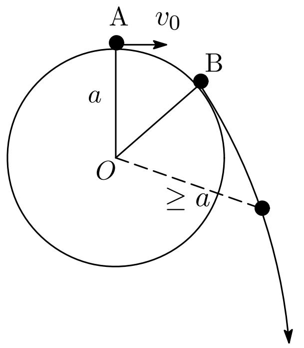
非ホロノミックな付加条件というのは (5.3.9) で表されない付加条件ということで、そのため内容も多様となります。これに対する統一的な扱いはなく、ケースバイケースでホロノミック系の議論をベースにしていろいろ工夫されています。非ホロミック付加条件の簡単な例を少しあげてみます。一つ目は不等号を含む拘束条件のケースで、一様な重力場に置かれた半径 a の滑らかな球面上の北極点Aから質点が初速度 v_0 で滑りはじめる運動の例です（次ページ左図参照）。v_0 があまり大きくなければ質点はある点Bまで球面上を滑っていき、そこから球面を離れて落下していきます。球面の中心を原点にとり質点の座標を x, y, z とすると、この場合の拘束条件は

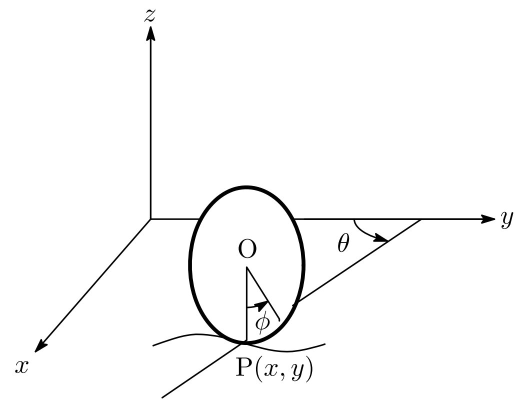
$$x^2 + y^2 + z^2 \geqq a^2 \tag{5.3.13}$$

となります。この例以外に、半径 a の球殻に封じられた気体分子の運動なども球殻内部だけを運動するように拘束されるので、各分子の座標には $x^2 + y^2 + z^2 \leqq a$ という非ホロノミックな拘束条件が付い

[7]興味のある方は、ゴールドスタイン「古典力学」（吉岡書店）や大貫義郎「解析力学」（岩波書店）等を参照されたし。

[8]$rheonom$ とか $scleronom$ という用語は $Boltzmann$ にはじまるとされる。$rheonom$ の $rheo$ は"流れ"を意味し、時間と共に拘束条件の式の形が流動的に変化するという意味合いが、$scleronom$ の $sclero$ は"硬い"という意味で、拘束条件が時間的に固定しているという意味合いを表していると考えられる。





てきます。

2 つ目の例として積分不可能な拘束条件というのがあります。よく引き合いにだされる例として半径 a の円盤が盤面を常に垂直に保ちながら水平な $x-y$ 平面上を滑らずに転がる運動があります（上右図参照)。この運動を記述する座標として円盤の中心座標 x, y と円盤の軸周りの回転角 ϕ、そして円盤の回転軸と y 軸のなす角 θ をとることができます。円盤の中心の速度の大きさは

$$v = a\dot{\phi} \tag{5.3.14}$$

その x, y 成分は

$$\dot{x} = v\cos\theta = a\cos\theta\cdot\dot{\phi}, \quad \dot{y} = -v\sin\theta = -a\sin\theta\cdot\dot{\phi} \tag{5.3.15}$$

この 2 つから

$$\begin{cases} dx - a\cos\theta\cdot d\phi = 0 \\ dy + a\sin\theta\cdot d\phi = 0 \end{cases} \tag{5.3.16}$$

という拘束条件を表す微分方程式が得られます。これを積分して $f_1(x,y,\theta,\phi)=0,\ f_2(x,y,\theta,\phi)=0$ というホロノミックな条件式に変形できればいいのですが、それはできません。というのは (5.3.16) の θ は変数で、これを規定する条件がないため、問題全体を実際に解かなければ積分を実行できないことになります。具体的にみていきましょう。いまそれが仮に可能だとして、ホロノミックな条件式の全微分をとると

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial x}dx + \frac{\partial f_1}{\partial y}dy + \frac{\partial f_1}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial f_1}{\partial \phi}d\phi = 0 \\ \frac{\partial f_2}{\partial x}dx + \frac{\partial f_2}{\partial y}dy + \frac{\partial f_2}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial f_2}{\partial \phi}d\phi = 0 \end{aligned} \tag{5.3.17}$$

となります。この式と (5.3.16) を比較すると、(5.3.16) には $d\theta$ をもつ項がないので $\partial f_i/\partial\theta = 0 (i=1,2)$ でなければなりません。このことは何を意味しているのかというと、x, y, ϕ の値を一定に保ったまま、OP 軸の回りに円盤を回転させれば円盤の向きは勝手に変えられ、このとき θ は x, y, ϕ の値に無関係に任意の値をとることができるということです。逆に、$f_i = 0$ が成り立つとすれば f_i は θ を含むことができず、それゆえ θ に関する偏微分 $\partial f_i/\partial\theta$ は 0 になることを意味します。しかし、θ を含まない拘束条件 $f_1(x,y,\phi)=0, f_2(x,y,\phi)=0$ からは $\sin\theta$, $\cos\theta$ を使って表された (5.3.16) を導けないことは明らかで、(5.3.16) を積分してホロノミックな条件式に変形することはできないというになります。

可積分性という観点からいえば、ホロノミックな拘束条件は可積分で $f(q_1, q_2, \cdots, q_n, t) = 0$ という形で表されますが、非ホロノミックな拘束条件は可積分ではないので、そのような形では表されないということになります。

**** 蛇足終わり