

付録 2(加筆中)

0.1 Gauss 積分の一般化に関する考察

x を n 次ベクトル, M を $n \times n$ 対称行列とする. このとき

$$\int \frac{d^n \mathbf{x}}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot M \cdot \mathbf{x} - \mathbf{x} \cdot \mathbf{J}\right) = (\det M)^{-1/2} e^{\mathbf{J}^T M^{-1} \mathbf{J}/2}$$

が成立する.

(証明)

まず以下のように変形ができることを認める.(実際に簡単に計算して確認ができる.)

$$\frac{1}{2} \mathbf{x}^T M + \mathbf{x} \mathbf{J} = \frac{1}{2} (\mathbf{x}^T + \mathbf{J}^T M^{-1}) M (\mathbf{x} + M^{-1} \mathbf{J}) - \frac{1}{2} \mathbf{J}^T M^{-1} \mathbf{J}$$

次に変数変換

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + M^{-1} \mathbf{J}$$

とすれば, この変数変換によるヤコビアンは明らかに 1 であるから, 命題の左辺は

$$(LHS) = \int \frac{d^n \mathbf{x}'}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left\{ (\mathbf{x}')^T M \mathbf{x}' - \frac{1}{2} \mathbf{J}^T M \mathbf{J} \right\}\right]$$

すなわち

$$= \frac{\exp\left\{\frac{1}{2} \mathbf{J}^T M \mathbf{J}\right\}}{(2\pi)^{n/2}} \int d^n \mathbf{x} \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x})^T M \mathbf{x}\right]$$

と書き直せる. 今 M を対角化する特殊直交行列 $O \in SO(n, \mathbb{C})$ として線型変換 (変数変換)

$$\mathbf{x} \mapsto O \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

を行う. また M' を M の対角化とすると当然 $M' = O^T M O$ と書ける.

この線型変換に関するヤコビ行列は \mathbf{x}, \mathbf{y} の各行列成分 $x_i, y_j (i, j = 1, \dots, n)$ とすると

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} o_{11} & o_{12} & \cdots & o_{1n} \\ o_{21} & o_{22} & \cdots & o_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ o_{n1} & & \cdots & o_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

ここで適当な i に対して, 全微分の定義より

$$\begin{aligned} dy_i &= \frac{\partial y_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial y_i}{\partial x_2} dx_2 + \cdots + \frac{\partial y_i}{\partial x_n} dx_n \\ &= o_{i1} dx_1 + o_{i2} dx_2 + \cdots + o_{in} dx_n \end{aligned}$$

よって結局

$$\begin{bmatrix} dy_1 \\ dy_2 \\ \vdots \\ dy_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} o_{11} & o_{12} & \cdots & o_{1n} \\ o_{21} & o_{22} & \cdots & o_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ o_{n1} & & \cdots & o_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ \vdots \\ dx_n \end{bmatrix}$$

故に

$$dy_1 dy_2 \cdots dy_n = \det(\mathbf{O}) dx_1 dx_2 \cdots dx_n$$

$\mathbf{O} \in SO(n, \mathbb{C})$ としていたから $\det(\mathbf{O}) = 1$. 故に

$$d^n \mathbf{x} = d^n \mathbf{y}$$

$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{O}\mathbf{x}$ の変数変換においてヤコビアンは 1 である. よって

$$\begin{aligned} (LHS) &= \frac{\exp\left\{\frac{1}{2}\mathbf{J}^T \mathbf{M} \mathbf{J}\right\}}{(2\pi)^{n/2}} \int d^n \mathbf{x} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{O}\mathbf{x})^T \mathbf{M}(\mathbf{O}\mathbf{x})\right] \\ &= \frac{\exp\left\{\frac{1}{2}\mathbf{J}^T \mathbf{M} \mathbf{J}\right\}}{(2\pi)^{n/2}} \int d^n \mathbf{x} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x})^T \mathbf{M}'(\mathbf{x})\right] \end{aligned}$$

\mathbf{M}' は対角化されているから、 $(\mathbf{M}')_{ii} = \lambda_i$ とすると

$$\begin{aligned} &= \frac{\exp\left\{\frac{1}{2}\mathbf{J}^T \mathbf{M} \mathbf{J}\right\}}{(2\pi)^{n/2}} \prod_{j=1}^n \int dx_j \exp\left[-\frac{1}{2}x_j^2 \lambda_j\right] \\ &= e^{\mathbf{J}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{J}/2} \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \end{aligned}$$

ここで $\mathbf{M}' = \mathbf{O}^T \mathbf{M} \mathbf{O}$ の両辺の行列式を取ると $\det(\mathbf{M}) = \det(\mathbf{M}') = (\prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}})^{-2}$. 以上より命題は示された.

練習

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 e^{-(x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}.$$

を求めよ.

(回答)

$$\begin{aligned} &x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \\ &= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ &\equiv \mathbf{x}^T \mathbf{M} \mathbf{x} \end{aligned}$$

と書ける. P を M 対角化する特殊直交行列として、 M' を M の対角化として

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} 2 & & \\ & \frac{1}{2} & \\ & & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

と書ける. 線型変換

$$x \mapsto px = x'$$

として, この時 Jacobi 行列式は 1 であるから積分は

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 e^{-x^T M x} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx'_1 dx_2 dx_3 e^{-(Px)^T M (Px)}. \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dx_2 dx_3 e^{-x^T (P^T M P) x}. \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 e^{-(2x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{2}x_3^2)}. \end{aligned}$$

変形し

$$\begin{aligned} &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2x^2} \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \right) \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2x^2} \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \right)^2 \\ &= \pi^{3/2} \sqrt{2} \end{aligned}$$

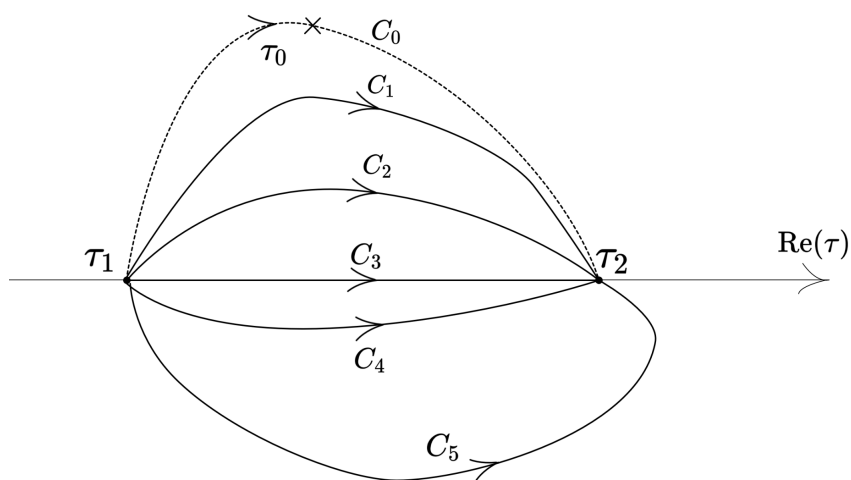
(複素関数の) 鞍点法

鞍点法とは次のタイプの積分

$$I(z) = \int_C d\tau g(\tau) e^{zf(\tau)}$$

に対して, 被積分関数の e の肩の関数値の寄与が積分値の大部分であることを利用した近似方法である. これにはもし $f(\tau)$ が実関数であれば複素関数へ解析接続を行い, 複素関数の性質「複素積分は始点と終点さえ決定すれば, 極を踏まない限り経路に依らない。」事実を利用する.

以下始点 τ_1 から始まり τ_2 で終わる積分を考える.(以下図)



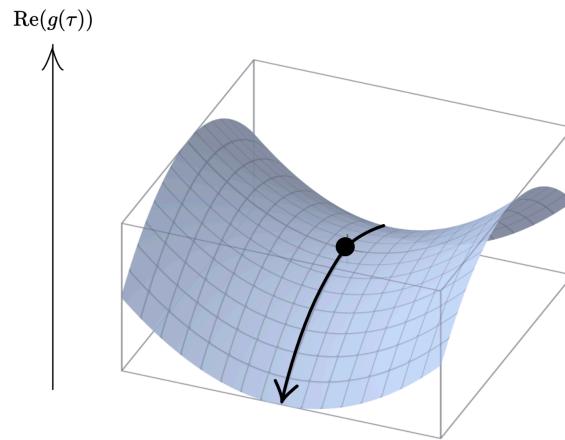
この時、上で述べた事実より

$$\int_{C_1} g(z)dz = \int_{C_2} g(z)dz = \dots = \int_{C_n} g(z)dz$$

であり、特に C_3 については実積分 $\tau = x + iy$ として $\int_{\tau_1}^{\tau_2} f(x)dx$ となるが、実はこれらの経路をうまく選ぶことで (今これを C_0 とする.)、ある点 (τ_0 とする.) 近傍の値を取るだけで全体の近似値—それもかなり近いもの—を得る方法が存在する。

もし積分路 C_0 の τ_0 近傍の値だけを取り出せて、それが積分 $\int_{C_0} f(\tau)d\tau$ のほぼ全てであるならば、この値をもってして実積分 C_3 を求められたらと思うて良い。とまで言える。ではそのような点はどのようなもので、その点に対してどのような積分路をとればよいのであろう。

この点 τ_0 は馬のくらのような見た目からは鞍点と呼ばれており (以下図)



複素関数 $g(\tau)$ の実部 $\text{Re}(g(\tau))$ の極大なる点のことである。この極大点から図の矢印向きに積分路を滑り降りるようにとることで、被積分関数 $e^{g(\tau)}$ の取る値のほとんどが \exp の急激増加、もしくは減少する性質ゆえ、このただ一つの点から決まり、これにより近似が成立する。何度もいうようにこの方法で得られた値は、複素関数の積分は路に依らない事実より実積分へすぐに応用が可能である。念の為に形式的な定義などを改めて下に示す。

鞍点法

鞍点法とは積分値の近似方法であり、下のようなタイプの積分

$$I(z) = \int_C d\tau g(\tau) e^{zf(\tau)}$$

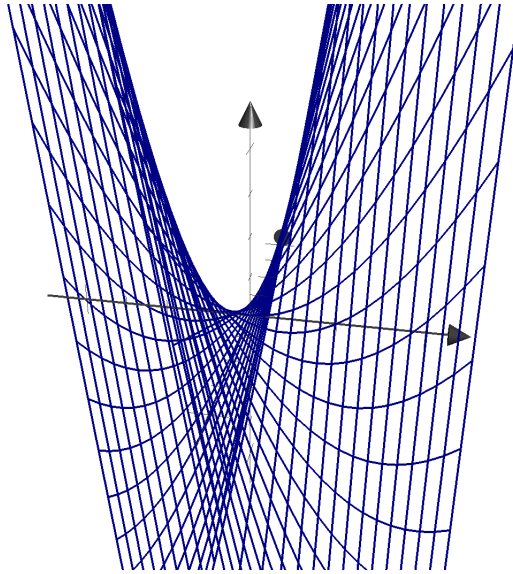
の値の被積分関数の e の肩の関数値の寄与がほとんどであることを利用し、路を上手く選んでその最も寄与のある一つの点をピンポイントに代入することにより、大まかな値を得る方法である。その点を鞍点(あんでん)とよび τ_0 として $\left. \frac{df}{d\tau} \right|_{\tau=\tau_0} = 0$ となる点である。これにより積分 I は

$$\cong \frac{\sqrt{2\pi} g(\tau_0) e^{zf(\tau_0)} e^{i\alpha}}{|zf''(\tau_0)|^{1/2}}$$

と近似される。特に $z \rightarrow \infty$ に対して近くなる。

(証明)

$\tau = x + iy$, $\psi(\tau) = zf(\tau) = u + iv$ とする。鞍点 τ_0 から $u(x, y) = \text{Re}(\psi(\tau))$ が、最も急降下する方向に積分路をとると $v(x, y)$ は一定値をとる(複素関数の性質)。下の図を x, y に対する $u(x, y)$ のグラフとすると、水平になっている面の中心が鞍点であり、そこから最も急降下する方向に積分路を取るイメージ。



一旦ここでは $z \in \mathbb{R}$ として $f(\tau)$ を τ_0 周りで Taylor 展開すると

$$\begin{aligned} f(\tau) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(\tau_0)}{k!} (\tau - \tau_0)^k \\ &= f(\tau_0) + f'(\tau_0)(\tau - \tau_0) + \frac{1}{2}f''(\tau_0)(\tau - \tau_0)^2 + \dots \end{aligned}$$

ここで τ_0 は鞍点 (面が水平になる点) であるから $f'(\tau_0) = 0$. さらに 2 次近似にて

$$f(\tau) \sim f(\tau_0) + \frac{1}{2}f''(\tau_0)(\tau - \tau_0)^2$$

と書ける. $(\frac{1}{2}f''(\tau_0)(\tau - \tau_0)^2)$ は $u(x, y)$ が急減少する方向に路をとるとき, 増減表で慣れているように負の実数であることがわかる. また $u = \text{Re}(\psi)$ が急減少する τ_0 を通るこの路において, $\text{Im}(\psi)$ は定数であるから, $f(\tau)$ は実数関数と見なすことができる.) のちの便利のため t を実数のパラメータとして

$$\begin{aligned} f(\tau) - f(\tau_0) &\sim \frac{1}{2}f''(\tau_0)(\tau - \tau_0)^2 \\ &\equiv -\frac{t^2}{2z} \end{aligned}$$

とする. ここで鞍点 τ_0 を中心に半径 δ の極座標をとる.

$$\tau - \tau_0 = \delta e^{i\alpha}$$

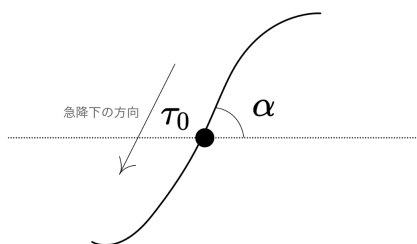
(α は偏角.) これを上に入代入して

$$-\frac{t^2}{2z} = \frac{f''(\tau_0)}{2} \delta^2 e^{2i\alpha}$$

これより t は

$$t = \pm |zf''(\tau_0)|^{1/2} \delta$$

ここで τ_0 を通り, f がもっとも急速に減少する方向に角度 α をとる.



このとき t が増加するように t の増す向きを定めると正となる. 積分の大部分は ($z \rightarrow \infty$ であるほど) τ_0 付近で与えられる. 次のように t に対して $-\infty$ から $+\infty$ まで積分しても対して違いはなく、

$$\begin{aligned} I(z) &= \int_C d\tau g(\tau) e^{zf(\tau)} \\ &\sim \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{dt} dt g(\tau_0) e^{z(f(\tau_0) + \frac{f''(\tau_0)}{2}(\tau - \tau_0)^2)} \\ &= g(\tau_0) e^{zf(\tau_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{dt} dt e^{-\frac{t^2}{2}} \end{aligned}$$

(第二行目は被積分関数へ $\tau = \tau_0$ を代入した t についての広義積分を行っているが、寄与は希薄である.) ここで

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\tau}{dt}\right) &= \left(\frac{dt}{d\delta} \frac{d\delta}{d\tau}\right)^{-1} \\ &= e^{i\alpha} (zf''(\tau_0))^{-1/2} \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned} I(z) &\sim g(\tau_0) e^{zf(\tau_0)} e^{i\alpha} |f''(\tau_0)|^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-\frac{t^2}{2}}}{\sqrt{z}} \\ &= \frac{g(\tau_0) e^{zf(\tau_0)} e^{i\alpha} \sqrt{2\pi}}{|zf''(\tau_0)|^{1/2}} \end{aligned}$$

以上にて求められた.(最後は Gauss 積分をつかった.)

例えば Gamma 関数のスターリング近似もこの方法にて得られる.

ガンマ関数の近似

$$\Gamma(z+1) \sim \sqrt{2\pi} z^{z+\frac{1}{2}} e^{-z}$$

ガンマ関数は

$$\Gamma(z+1) \equiv \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^z$$

と定義されている. $t = z\tau$ として

$$= z^{z+1} \int_0^{\infty} d\tau \tau^z e^{-z\tau}$$

$\tau^z = e^{z \log \tau}$ であるから

$$= z^{z+1} \int_0^{\infty} d\tau e^{z(\log \tau - \tau)}$$

ここで $f(\tau) \equiv \log \tau - \tau$ とすれば $f'(\tau) = \frac{1}{\tau} - 1$. よって鞍点は $\tau_0 = 1$ である. 鞍点中心の半径 ϵ の極座標表示は $\tau - 1 = \epsilon e^{i\alpha}$. これを $f(\tau)$ へ代入し

$$f(\tau) = \log(1 + \epsilon e^{i\alpha}) - (1 + \epsilon e^{i\alpha})$$

対数のテイラー展開 $\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$ より

$$\sim -\frac{(\epsilon e^{i\alpha})^2}{2} - 1$$

これより $\alpha = 0$ のときが最小であるから

$$\Gamma(z+1) = z^{z+1} \int_0^\infty d\tau e^{2(\log z - 1)\tau} \sim \sqrt{2\pi} e^{-z} z^{z+\frac{1}{2}}$$

と求まる. Gamma 関数の場合、たまたま $\alpha = 0$ となった.

Jee 先生の鞍点法

Jee 先生の付録 3 の考察

$$I = \int_0^{\infty} dq e^{-(1/\hbar)f(q)}$$

を $q = a$ で鞍点とすると、 $q = a$ 周りでの $f(q)$ の Taylor 展開は

$$f(q) = f(a) + f'(a)(q-a) + \frac{1}{2}f''(a)(q-a)^2 + \dots$$

$q = a$ は鞍点であるから $f'(a) = 0$. また二次で近似して

$$f(q) \sim f(a) + \frac{1}{2}f''(a)(q-a)^2$$

これより積分は

$$\begin{aligned} I &= \int dq e^{-(1/\hbar)f(q)} \\ &\sim \int dq e^{-(1/\hbar)(f(a) + \frac{1}{2}f''(a)(q-a)^2)} \\ &= e^{-(1/\hbar)f(a)} \int dq e^{-\frac{1}{2\hbar}f''(a)(q-a)^2} \end{aligned}$$

と書ける. 変数変換 $q \rightarrow q - a$ より

$$= e^{-(1/\hbar)f(a)} \int dq e^{-\frac{1}{2\hbar}f''(a)q^2}$$

あとは普通に Gauss 積分をすればよく

$$\begin{aligned} &= e^{-(1/\hbar)f(a)} \sqrt{\pi \cdot \left(\frac{f''(a)}{2\hbar}\right)^{-1}} \\ &= e^{-(1/\hbar)f(a)} \left(\frac{2\pi\hbar}{f''(a)}\right)^{1/2} \dots (*) \end{aligned}$$

となる. 一方で上で求めた公式

$$I(z) = \int_C d\tau g(\tau) e^{zf(\tau)} \cong \frac{\sqrt{2\pi}g(\tau_0) e^{zf(\tau_0)} e^{i\alpha}}{|zf''(\tau_0)|^{1/2}}$$

に対して

$$\begin{cases} z = -\frac{1}{\hbar} \\ g(\tau) = 1 \end{cases}$$

として

$$\begin{aligned} I &= \frac{\sqrt{2\pi}e^{-\frac{1}{\hbar}f(a)}e^{i\alpha}}{\left|-\frac{1}{\hbar}\right|^{1/2}|f''(a)|^{1/2}} \\ &= \frac{\sqrt{2\pi\hbar}e^{-\frac{1}{\hbar}f(a)}e^{i\alpha}}{|f''(a)|^{1/2}} \dots (**) \end{aligned}$$

となる. (*) は鞍点に対する路の角度が $\alpha = 0$ となる前提で近似を行っているので、実際 (**) が正確である.

多変数関数に対する鞍点法

多変数の鞍点法

$a = (a_1, a_2, \dots, a_N)$ を $f = f(q_1, q_2, \dots, q_N)$ の鞍点とする. このとき

$$I = \int dq_1 dq_2 \dots dq_N e^{-(1/\hbar)f(q_1, \dots, q_N)}$$

$$\sim e^{-(1/\hbar)f(a)} \left(\frac{(2\pi\hbar)^N}{\det f''(a)} \right)^{1/2} e^{-O(\hbar^{1/2})}$$

となる. ただし $\det f''(a) \equiv \det((\nabla \otimes \nabla)f(a))$

$$= \det \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(a)}{\partial q_1^2} & \frac{\partial^2 f(a)}{\partial q_1 \partial q_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(a)}{\partial q_1 \partial q_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(a)}{\partial q_N \partial q_1} & \frac{\partial^2 f(a)}{\partial q_N \partial q_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(a)}{\partial q_N^2} \end{bmatrix}$$

(証明)

N 変数の $a = (a_1, a_2, \dots, a_N)$ 周りでの Taylor 展開は

$$f(q_1, q_2, \dots, q_N) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left\{ \sum_{k=1}^N (q_k - a_k) \frac{\partial}{\partial q_k} \right\}^j f(a)$$

である. ここで a を $f(q) = f(q_1, q_2, \dots, q_N)$ の鞍点とすると

$$= f(a) + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=1}^N (q_k - a_k) \frac{\partial}{\partial q_k} \right\}^2 f(a) + \dots$$

二次で近似し

$$\sim f(a) + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=1}^N (q_k - a_k) \frac{\partial}{\partial q_k} \right\}^2 f(a)$$

ここで展開して

$$= f(a) + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\nu=1}^N (q_\nu - a_\nu)^2 \frac{\partial^2}{\partial q_\nu^2} f(a) + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} (q_i - a_i)(q_j - a_j) \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} f(a) \right\}$$

と書ける. これより

$$I \sim e^{-(1/\hbar)f(a)} \int dq_1 \dots dq_N e^{-\frac{1}{2\hbar} \left[\sum_{\nu=1}^N (q_\nu - a_\nu)^2 \frac{\partial^2}{\partial q_\nu^2} f(a) + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} (q_i - a_i)(q_j - a_j) \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} f(a) \right]}$$

今ここで全ての μ に対して変数変換 $q_\mu \rightarrow q_\mu - a_\mu$ を行い

$$= e^{-(1/\hbar)f(a)} \int dq_1 \dots dq_N e^{-\frac{1}{2\hbar} \left[\sum_{\nu=1}^N q_\nu^2 \frac{\partial^2}{\partial q_\nu^2} f(a) + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} q_i q_j \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} f(a) \right]}$$

と書ける. 今 N 次対称行列 (a_{ij}) に対する二次形式は

$$[q_1, \dots, q_N] \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ \vdots & & & \\ a_{N1} & \dots & & a_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_N \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^N a_{kk} q_k^2 + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} a_{ij} q_i q_j$$

と書けることを用いて被積分関数を変形する.

N 変数に対する微分作用素を $\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_N} \right)$ として、 $\mathbf{M} \equiv \nabla \otimes \nabla f|_{q=a}$ とし $\mathbf{M}' \equiv \frac{1}{\hbar} \mathbf{M}$ 、縦ベクトル $\mathbf{q} = [q_1, q_2, \dots, q_N]^T$ とすれば積分 I は

$$I \sim e^{-(1/\hbar)f(a)} \int dq_1 \dots dq_N e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{q}^T \cdot \mathbf{M}' \cdot \mathbf{q})}$$

と書ける. 前に書いた一般化された Gauss 積分の公式

$$\int \frac{d^n \mathbf{x}}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{x} \cdot \mathbf{J}\right) = (\det \mathbf{M})^{-1/2} e^{\mathbf{J}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{J}/2}$$

より

$$I \sim e^{-\frac{f(a)}{\hbar}} (2\pi)^{N/2} \{\det(\mathbf{M}')\}^{-1/2}$$

変形して ($\det(\mathbf{M}) \equiv \det(f''(a))$ である.)

$$\begin{aligned} &= \frac{e^{-\frac{f(a)}{\hbar}} (2\pi)^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\left(\frac{1}{\hbar}\right)^N \det(\mathbf{M})}} \\ &= \frac{e^{-\frac{f(a)}{\hbar}} (2\pi\hbar)^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det(f''(a))}} \end{aligned}$$

あとは適当なあまり $e^{-O(\hbar^{1/2})}$ を加えて (これでよいのか)

$$\begin{aligned} I &= \int dq_1 dq_2 \dots dq_N e^{-(1/\hbar)f(q_1, \dots, q_N)} \\ &\sim e^{-(1/\hbar)f(a)} \left(\frac{(2\pi\hbar)^N}{\det f''(a)} \right)^{1/2} e^{-O(\hbar^{1/2})} \end{aligned}$$

以上にて大まかに示された.

*途中で Gauss 積分の一般式を用いたが、この導出はまさに二次形式の標準形の方法である. 今後はたとえ公式を失念しようとも二次形式の標準形を求める作業を丹念に行えば問題ない.

*関数は必ずしも鞍点をもつとは限らない. 鞍点を判別するには、ヘッセ行列式の符号を調べればよい. 今後鞍点を持たない関数を扱うかはわからないが...

鞍点法の応用 (2)

$$H_\nu^{(1)}(z) = \frac{1}{\pi i} \int_{0(C)}^{-\infty} e^{(z/2)(\tau - \tau^{-1})} \frac{d\tau}{\tau^{\nu+1}}$$

$$\sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i\{z - \nu(\pi/2) - \pi/4\}}$$

となることを示せ.

(証明)

$$\begin{cases} g(\tau) = \tau^{-\nu-1} \\ f(\tau) = \frac{1}{2}(\tau - \tau^{-1}) \end{cases}$$

とする. これにより鞍点法の公式にあった形で

$$H_\nu^{(1)}(z) = \frac{1}{\pi i} \int_0^{-\infty} g(\tau) e^{zf(\tau)} d\tau$$

$$\Leftrightarrow \pi i H_\nu^{(1)}(z) = \int_0^{-\infty} g(\tau) e^{zf(\tau)} d\tau$$

と書ける. ここで

$$f'(\tau) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\tau^2} \right).$$

であるから, $\tau = \tau_0 = \pm i$ が鞍点となる. (ただし積分路を上半平面にとっているので, $\tau_0 = i$ とする.) 2 回微分も公式で必要になるから計算しておき, まとめて

$$f'(\tau) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\tau^2} \right), f''(\tau) = -\frac{1}{\tau^3}$$

となる. これより $\tau_0 = i$ を代入し

$$f(\tau_0) = i, \quad f''(\tau_0) = -i$$

今 f を τ_0 中心に展開し, 二次近似にて

$$f(\tau) \sim f(\tau_0) + \frac{1}{2} f''(\tau_0) (\tau - i)^2.$$

を得る. すなわち

$$= i - \frac{i}{2} (\tau - i)^2$$

ここで $\tau - i = \varepsilon e^{i\alpha}$ として (i 中心の極形式), 最終的に

$$\frac{\varepsilon^2}{2} \sin 2\alpha + i \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \cos 2\alpha \right).$$

とかけるが, 鞍点から最速急降下する路において f は実関数として振る舞うので実部だけをとりだし

$$\sim \frac{\varepsilon^2}{2} \sin 2\alpha$$

となる. これを最小にする α は明らかに

$$2\alpha = \frac{3}{2}\pi, \Rightarrow \alpha = \frac{3}{4}\pi.$$

である. 以上公式に必要な値をまとめて

$$\begin{cases} g(\tau_0) = (\tau_0)^{-\nu-1} = (e^{\frac{\pi}{2}i})^{-\nu-1} \\ f''(\tau_0) = -i \\ f(\tau_0) = i \\ \alpha = \frac{3}{4}\pi. \end{cases}$$

そして公式へ代入することで

$$H_\nu^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{-\frac{\pi}{2}i} e^{-\frac{\pi}{2}i(\nu+1)} e^{iz} e^{\frac{3}{4}\pi i}$$

以上にて示された.

鞍点法の応用 (3)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tau e^{z(\tau^2+\tau+1)} d\tau \sim -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{z}} e^{\frac{3}{4}z + \frac{\pi}{2}i}$$

簡単に示す. $g(\tau) = \tau$, $f(\tau) = \tau^2 + \tau + 1$ とすることにて, 鞍点 $\tau_0 = -\frac{1}{2}$ と求められる. 微分などを計算していき, まとめて

$$\begin{aligned} f(\tau_0) &= \frac{3}{4}, f''(\tau_0) = 2, \tau_0 = -\frac{1}{2} \\ g(\tau_0) &= -\frac{1}{2}, \end{aligned}$$

鞍点中心に極形式 $\tau + 1/2 = \varepsilon e^{i\alpha}$ として

$$\begin{aligned} f &= \left(\varepsilon e^{i\alpha} - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(\varepsilon e^{i\alpha} - \frac{1}{2}\right) + 1 \\ &= \varepsilon^2 e^{2i\alpha} + \frac{3}{4}. \\ &= \left(\varepsilon^2 \cos 2\alpha + \frac{3}{4}\right) + i\varepsilon^2 \sin 2\alpha. \\ &\sim \varepsilon^2 \cos 2\alpha + \frac{3}{4}. \end{aligned}$$

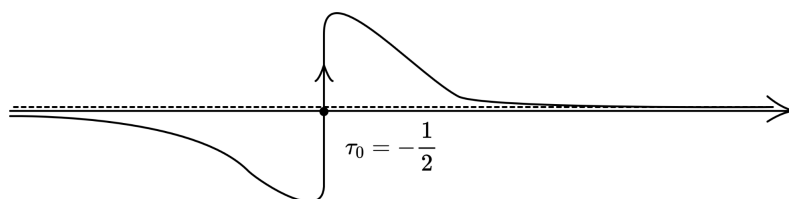
ともとまる. これを最小にする α は

$$\alpha = \frac{\pi}{2}$$

である. よって公式へ代入し

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \tau e^{z(\tau^2+\tau+1)} d\tau &\sim \frac{\sqrt{2\pi} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) e^{\frac{3}{4}\pi} e^{\frac{\pi}{2}i}}{|z \cdot 2|^{1/2}} \\ &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{z}} e^{\frac{3}{4}z + \frac{\pi}{2}i} \end{aligned}$$

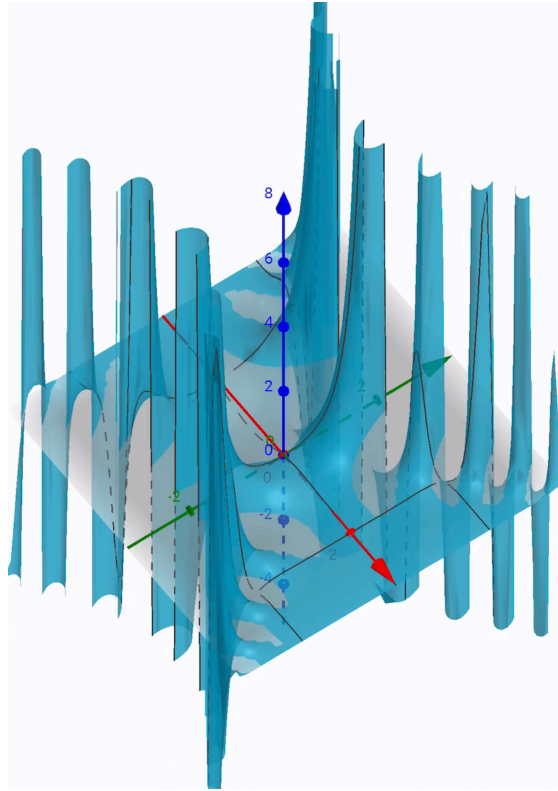
波線が実積分, 実線が鞍点法の積分路.



(Q,E,D)

メモ $f(z) = ze^{-(z^2+z+1)}$ のとき、 $\operatorname{Re}(f(z))$ は

$$\operatorname{Re} f = u(x, y) = e^{-(x^2-y^2+x+1)} \{x \cos(2xy + y) + y \sin(2xy + y)\}$$



確かに $\tau = \frac{1}{2}$ で鞍点になってる感じがする...

— 鞍点法の近似が微妙に終わった例 —

自分はコンピュータで区分求積法により ($dx = 10^{-5}$ あたり)

$$\int_0^{\infty} dx x^3 e^{-x^3+x^2+x+1} \sim 12.176 \dots$$

と見積もった. 鞍点法にて計算したところ $\frac{\pi}{\sqrt{2}}e^2$ となったが、これは 16.4143 くらいであり、誤差にしては大きすぎる. どこに問題があったのだろうか. 今回の計算で被積分関数のかたは三次であるから、鞍点の候補は 2 つ現れる. ($x_1 = -\frac{1}{3}, x_2 = 1$). 正の無限へ積分するのだから、 $x = 1$ を鞍点と採用し計算してみると偏角 $\alpha = 0$ ともとまる. これについて時間がある時に自分で考えてみる予定である.