

基礎方程式とその意味を考える

蘆田祐人

2025 年 3 月 5 日

概要

本講義では、物理学における「基礎方程式」を掘り下げその意味を考える。拡散方程式と波動方程式を軸にして、物質やエネルギーの流れを記述する方程式を扱う。基本的事項を学んだのち、教科書では必ずしも扱われない、いくつかの興味深い話題に焦点を当て深掘りする。特に、拡散方程式や波動方程式と、量子力学の Schrödinger 方程式・非エルミート物理・くりこみ群・機械学習との関連について考える。

目次

1	ランダムウォークと拡散方程式	4
1.1	一粒子のランダムウォーク	4
1.2	拡散方程式	6
1.3	保存則からの導出	6
1.4	方程式の意味・定性的理解	7
1.4.1	拡散方程式	7
1.4.2	一様外場下の拡散	11
1.4.3	ポテンシャル下の拡散 (Smoluchowski 方程式)	11
1.4.4	Einstein の関係式	12
2	拡散方程式を解く	14
2.1	有限区間 (変数分離法)	14
2.2	無限空間 (Fourier 変換)	15
2.2.1	数学的準備	15
2.2.2	拡散方程式	16
2.3	Green 関数	18
3	量子力学と拡散方程式	19
3.1	Schrödinger 方程式と拡散方程式	19
3.2	一様外力下のブラウン運動と非エルミート物理	23
3.3	ポテンシャル中のブラウン運動と量子粒子	25
4	くりこみ群と拡散方程式	30
4.1	くりこみ変換：中心極限定理を例に	30
4.2	くりこみ群・拡散方程式・機械学習	35
5	波動方程式	40
5.1	方程式の意味・定性的理解	40
5.2	Schrödinger 方程式の非拡散解	42

はじめに

複数の変数を持つ関数について、一つの変数のみに関する微分を偏微分という。例えば波動関数 $\psi(x, t)$ は位置 x と時刻 t を変数にもつ関数であり、 $\partial_t \psi$ は時間に対する偏微分である^{*1}。特に、量子力学の講義で学ぶように、自由粒子の Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t)$$

で与えられる。時間を形式的に虚数にする ($t \rightarrow -it$) と、微小な粒子の不規則な運動（ブラウン運動）や熱伝導を記述する拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t)$$

が得られる。両者は共に時間の一階微分と空間の二階微分を関係付ける偏微分方程式であり、講義で説明するように密接な関係がある。また素粒子物理学や統計物理学の理論手法である「くりこみ群」の基礎方程式は、拡散方程式を拡張したものともみなせる。

左辺を一階ではなく二階の時間微分とすると、バイオリンの弦の振動や音波・水面波・電磁波などの伝搬を記述する波動方程式

$$\partial_t^2 u(x, t) = v^2 \partial_x^2 u(x, t)$$

が得られる。このように物理学に現れる基礎方程式のほとんどは何らかの偏微分方程式で記述される。いずれも、着目する物理量の時間微分と空間微分を関係づけることで、多様な物理現象を記述する。本講義ではこれらの基礎方程式の意味を理解し、目次に挙げたいくつかの話題について深掘りする。

成績評価について（前半パート）

以下の二つの課題の答案をまとめて、6月17日(火)までに UTOL にて提出すること。レポートには必ず氏名と学籍番号を明記すること。表紙は不要。

- ・ 課題1：講義ノートの「問題」から一つ以上選び解答せよ。
- ・ 課題2：好きな偏微分方程式について、自由に問題設定（初期条件や境界条件など）を行い、その意味や解について議論せよ。解は解析的に導いても、数値的に求めても良い。講義で扱った偏微分方程式でなくても構わない。

成績評価は川口先生担当の後半パートと合わせて行う。

^{*1} 本講義では断りがない限り、 $\partial_t \psi = \frac{\partial \psi}{\partial t}$, $\partial_x^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$ と略記する。

1 ランダムウォークと拡散方程式

1.1 一粒子のランダムウォーク

水中に浮遊した微粒子を顕微鏡で観察すると、フラフラと不規則に動き回っている。これは周りに存在する無数の水分子が、微粒子に衝突することで乱雑な力を及ぼすためである。水分子は熱運動をしており個々の分子はそれぞれ異なる速度を持っているが、その集団としての統計的振る舞いは、温度などの物理量を通じて特徴づけられる。

ここではブラウン運動のモデルとしてランダムウォークを考える。簡単のため、粒子は一次元空間上を時間間隔 τ ごとに

1. 確率 $\frac{1}{2}$ で右に距離 a だけ移動 ($\delta x = a$)
2. 確率 $\frac{1}{2}$ で左に距離 a だけ移動 ($\delta x = -a$)

するものとする。 δx は変位を表す確率変数で、時刻 $t = 0$ で粒子は $x = 0$ に存在する。時間が n ステップ経過した後の位置は $t = n\tau$ として

$$x(t) = \delta x_1 + \delta x_2 + \cdots + \delta x_n. \quad (1.1)$$

各ステップでの移動距離 δx_i ($i \in \{1, 2, \dots, n\}$) と、その二乗 $(\delta x_i)^2$ の期待値は

$$\langle \delta x_i \rangle = \frac{1}{2} \cdot a + \frac{1}{2} \cdot (-a) = 0 \quad (1.2)$$

$$\langle (\delta x_i)^2 \rangle = \frac{1}{2} \cdot a^2 + \frac{1}{2} \cdot (-a)^2 = a^2 \quad (1.3)$$

なので、時刻 t での変位 $x(t)$ 、およびその二乗 $(x(t))^2$ の期待値は

$$\langle x(t) \rangle = \langle \delta x_1 \rangle + \langle \delta x_2 \rangle + \cdots + \langle \delta x_n \rangle = 0 \quad (1.4)$$

$$\langle (x(t))^2 \rangle = \langle (\delta x_1)^2 \rangle + \langle (\delta x_2)^2 \rangle + \cdots + \langle (\delta x_n)^2 \rangle + \sum_{i \neq j} 2 \langle \delta x_i \delta x_j \rangle = na^2 \quad (1.5)$$

となる。ここで各ステップの移動距離は独立なため、 $i \neq j$ について $\langle \delta x_i \delta x_j \rangle = \langle \delta x_i \rangle \langle \delta x_j \rangle = 0$ であることを用いた。拡散定数

$$D = \frac{a^2}{2\tau} \left[\frac{\text{長さ}^2}{\text{時間}} \right] \quad (1.6)$$

を定義すれば

$$\langle (x(t))^2 \rangle = 2Dt \quad (1.7)$$

を得る。一定の速度で移動する物体の移動距離は当然 t に比例する。これに対して、ランダムウォークする粒子では変位 $\sqrt{\langle (x(t))^2 \rangle}$ が $\sqrt{t}$ に比例しており、この意味で粒子の分布が「ゆっくり」と拡がっていく（＝拡散する）ことがわかる。典型的なランダムウォークの軌跡の例を図1に示す。

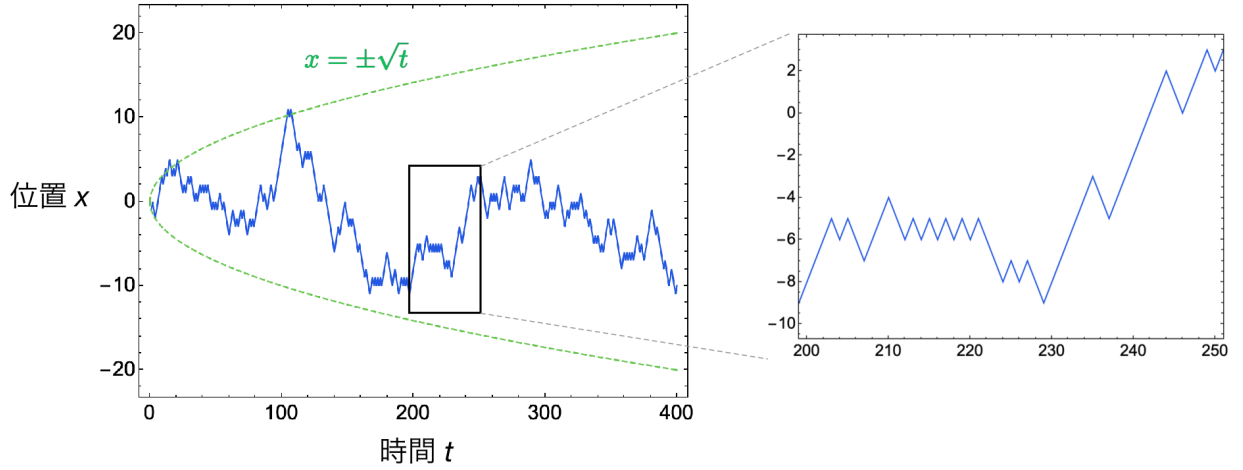


図1 一次元格子をランダムウォークする粒子。 $a = 1, \tau = 1$.

このことをより明示的にみるため、時刻 t に粒子を区間 $[x, x + \Delta x]$ に見出す確率を $p(x, t)\Delta x$ として、確率密度 $p(x, t)$ を導入する。1 ステップでの確率の変化を考えると

$$p(x, t + \tau) = \frac{1}{2} [p(x + a, t) + p(x - a, t)] \quad (1.8)$$

を得る。再び、時刻 $t = 0$ で $x = 0$ に位置する粒子が n ステップ時間発展する場合を考える。 $x = la$ (l は整数) として*2、時刻 $t = n\tau$ での確率密度を考えると

$$p(x, t) \cdot 2a = {}_nC_{\frac{n+l}{2}} \left(\frac{1}{2}\right)^n = \frac{n!}{2^n \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!} \quad (1.9)$$

を得る。変位と経過時間が十分に大きく ($n \gg |l| \gg 1$) 時間と空間の離散性が近似的に無視できる状況を考えよう。この時、確率密度は

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (1.10)$$

と表せる。つまり十分時間が経過した後の粒子の位置分布はガウス分布に従い、その分散が時刻 t に比例して増大する。

問題：式 (1.9) から (1.10) を導出せよ。

ヒント：次の Stirling の公式を用いても良い

$$m! \simeq \sqrt{2\pi m} \left(\frac{m}{e}\right)^m, \quad m \gg 1. \quad (1.11)$$

*2 長さが a ではなく $2a$ である理由は各自考えてみよう。ヒント： n と l の偶奇が一致しない場合、 $p(x, t) = 0$ である。

1.2 拡散方程式

さて前節では離散的な位置と時間を考えたが、実際の物理系では連続な位置と時間を考えるのが自然である。このような連続極限を

$\frac{a^2}{\tau}$ を一定に保ちつつ $a \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0$ とする

として定義しよう。実際、確率密度 $p(x, t)$ の Taylor 展開より

$$p(x, t + \tau) \simeq p(x, t) + \tau \partial_t p(x, t) \quad (1.12)$$

$$p(x \pm a, t) \simeq p(x, t) \pm a \partial_x p(x, t) + \frac{a^2}{2} \partial_x^2 p(x, t) \quad (1.13)$$

を得るが、これを時間発展の式 (1.8) に代入して、上で定義した連続極限をとれば、次の偏微分方程式（拡散方程式）を得る：

$$\partial_t p(x, t) = D \partial_x^2 p(x, t) \quad (1.14)$$

さて前節の最後で議論した、ステップ数に関する極限 ($n \gg |l| \gg 1$) は、時間と距離の刻み幅を（時間方向をより「細かく」刻むという約束の下に）多くする極限と考えれば、上に述べた連続極限と等価なはずである。言い方を換えれば、前節で導いた結果 (1.10) は拡散方程式 (1.14) を満たすと期待される（実際そうになっていることはすぐに確かめられる）。次節では、Fourier 変換の方法を用いた式 (1.10) の導出を与え、解 (1.10) が拡散方程式の一般解を表すのに用いる Green 関数に他ならないことを見る（詳細は後節を参照のこと）。

1.3 保存則からの導出

前節では、ブラウン運動のミクロなモデルとしてランダムウォークを考え、その連続極限をとることで拡散方程式を導出した。一方で、拡散方程式自体はブラウン運動のみならず、熱伝導や流体力学など様々な分野で普遍的に現れる方程式である。従ってミクロな詳細に依存しない導出が存在して然るべきである。以下では保存則といくつかの仮定から拡散方程式を導く。

時間 t と位置 x の関数 $u(x, t)$ を考え、ある領域 A 上の積分 $\int_A dx u(x, t)$ が保存している状況を考えよう。具体的な物理系での対応物としては、例えば表 1 を見よ。領域 A として区間 $[x, x + \Delta x]$ を考えると保存則から

区間上における保存量の変化 = その境界を通じて流入/流出した量

	$u(x, t)$	保存則	$j(x, t)$
ブラウン運動	確率分布	確率の保存	確率流
熱伝導	温度分布	エネルギー保存	熱流
流体	密度分布	粒子数保存	粒子流

表1 拡散方程式に従う色々な物理系.

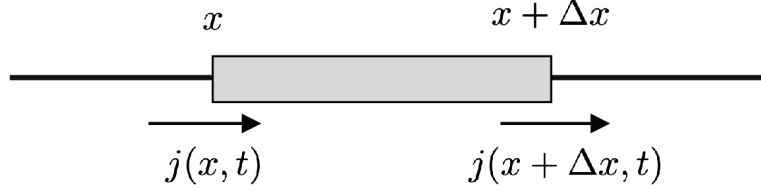


図2 区間 $[x, x + \Delta]$ での保存量の変化。

である。保存量の流れを表す関数を（ x 軸正方向の流れを正として） $j(x, t)$ とすれば、このことは

$$\frac{d}{dt} \int_x^{x+\Delta x} dx u(x, t) = j(x, t) - j(x + \Delta x, t) \quad (1.15)$$

と数式を用いて表せる（図2を参照）。流れ $j(x, t)$ について次の仮定を行う：

1. 流れ $j(x, t)$ は勾配 $\partial_x u(x, t)$ に比例する
2. 流れ $j(x, t)$ は $u(x, t)$ が大きい方から小さい方へ生じる

$u(x, t)$ が平坦であることは、分布が均等で系が平衡状態にあることを意味する。そのような状況では流れ $j(x, t)$ が存在しないと考えるのが自然である。つまり、 $j(x, t)$ は $u(x, t)$ の空間微分の関数である。そのうち主要な項は一階微分である $\partial_x u$ と考えられる。結局、流れの表式として次を得る

$$j(x, t) = -D \partial_x u(x, t), \quad D > 0. \quad (1.16)$$

ここで係数 D が正なのは仮定2の帰結である。式(1.15)に代入して、 $\Delta x \rightarrow 0$ の極限をとると、式(1.15)の左辺は $\partial_t u(x, t) \Delta x$ で近似でき、再び拡散方程式を得る：

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t). \quad (1.17)$$

1.4 方程式の意味・定性的理解

1.4.1 拡散方程式

拡散方程式の意味を考えれば、具体的な計算は行わずとも解の定性的理解は行える。そのため拡散方程式の右辺を次のように離散化して書き直そう：

$$\partial_x^2 u(x, t) \simeq \frac{1}{\Delta x} [\partial_x u(x + \Delta x/2, t) - \partial_x u(x - \Delta x/2, t)] \quad (1.18)$$

$$\simeq \frac{1}{(\Delta x)^2} [u(x + \Delta x, t) - u(x, t) - (u(x, t) - u(x - \Delta x, t))] \quad (1.19)$$

$$= \frac{2}{(\Delta x)^2} \left[\frac{u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t)}{2} - u(x, t) \right]. \quad (1.20)$$

最後の式を見れば、 $\partial_x^2 u$ の符号が「位置 x の近くでの平均値 $\frac{u(x+\Delta x, t) + u(x-\Delta x, t)}{2}$ と、 x での値 $u(x, t)$ との大小関係」で決まっている。図3に示すように、これは $u(x, t)$ の凹凸度合いを表している。従って拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t) \quad (1.21)$$

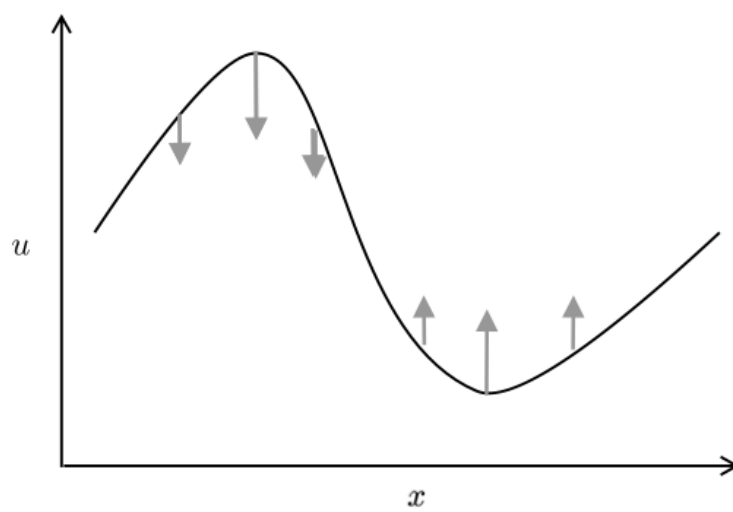
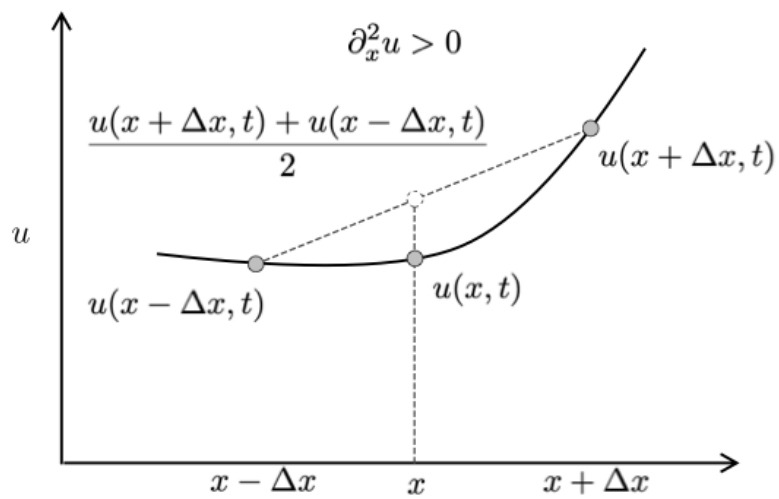
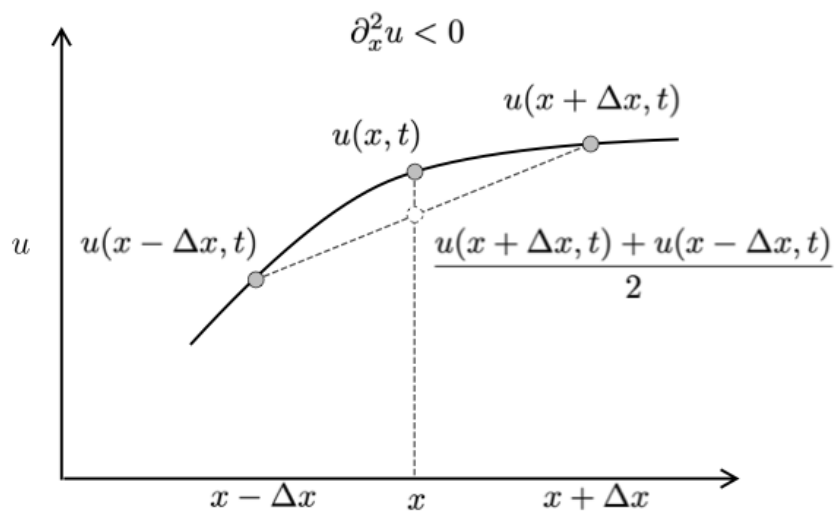


図3 拡散方程式の意味。

の意味は

$$u(x, t) \text{ の時間変化率} = \text{位置 } x \text{ での } u(x, t) \text{ の凹凸の度合い}$$

と理解できる。 $u(x, t)$ が上に膨らんでいれば（上に凸であれば） $\partial_x^2 u(x, t) < 0$ であり、係数 D は正であるので、時刻が少し進むと $u(x, t)$ は減少する。逆に $u(x, t)$ が下に膨らんでいれば（下に凸であれば） $\partial_x^2 u(x, t) > 0$ であり、時刻が少し進むと $u(x, t)$ は増加する（図3を参照）。いずれにしても時間変化とともに凹凸が減少する方向に $u(x, t)$ は変化し、 $u(x, t)$ の「デコボコ」が解消されてゆくことがわかる。この直感的な理解をベースにいくつかの例を考えてみよう。

例 1

長さ L の区間上の拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t), \quad x \in [0, L] \quad (1.22)$$

を考え、両端で境界条件

$$u(x = 0, t) = u(x = L, t) = 0 \quad (1.23)$$

を満たすとする。例えば、両端でブラウン粒子を吸収する壁が存在する場合、あるいは長さ L の導体棒が両端で同一温度の熱源に接している状況を想像すれば良い。

何らかの初期状態からはじめて、時刻が十分経過すれば定常解に到達すると期待される。上の議論より、時間発展により凸凹が次第に解消してゆく。凸凹度合いが激しいほど（つまり $|\partial_x^2 u|$ が大きいほど）、 $u(x, t)$ の時間変化率は大きいため、より微細な凹凸の構造から消えてゆくはずである（図4を参照）。最終的に、定常解は凸凹が完全にならされた平坦なものとなる。つまり定常解は*³

$$u_{ss}(x) = 0, \quad x \in [0, L] \quad (1.24)$$

と求まる。

例 2

次に上と同じ方程式で、境界条件が

$$u(x = 0, t) = c_1, \quad u(x = L, t) = c_2, \quad 0 < c_1 < c_2 \quad (1.25)$$

の場合を考える。例えば、導体棒が左右で温度の異なる熱源に接している状況を考えれば良い。上と同様の議論より、定常解は凸凹がならされた平坦なものと期待される。そのようなもののうち境界条件を満たすものとして、線形な

$$u_{ss}(x) = c_1 + (c_2 - c_1) \frac{x}{L} \quad (1.26)$$

が定常解と推測できる。実際、これは $\partial_x^2 u_{ss} = 0$ であり拡散方程式の定常解である。

*³ 添字の ss は定常状態（steady state）の略である。

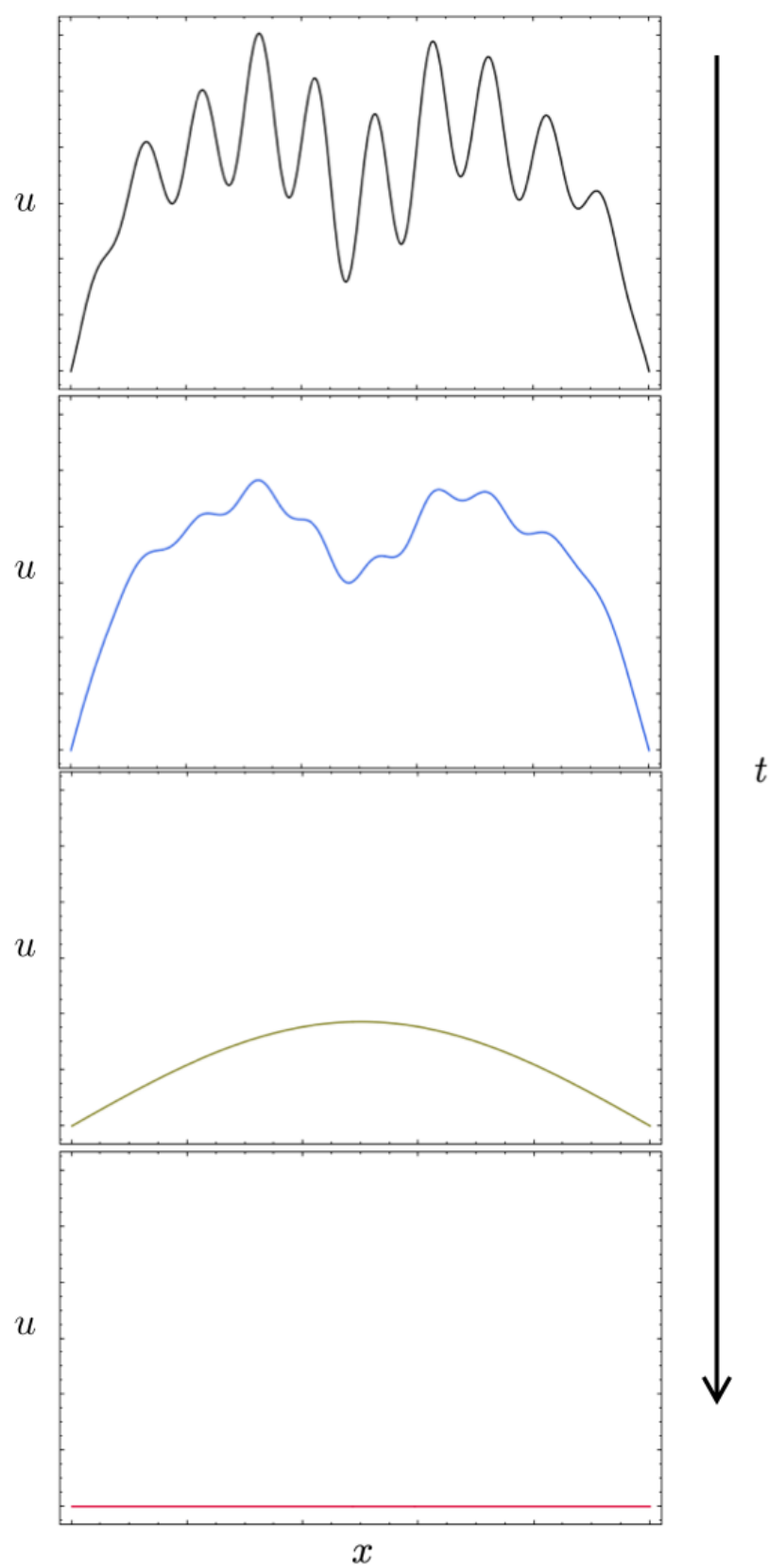


図4 固定端境界条件 (1.23) の下での拡散方程式における解の振る舞い。

1.4.2 一様外場下の拡散

次に一様な流れが存在する状況での拡散を考える。前節で考えたように、流れを表す関数 $j(x, t)$ は空間に関する一階微分 $-\partial_x u$ で記述される。従って、時間発展方程式に流れの項を加えた

$$\partial_t u(x, t) = -v\partial_x u(x, t) + D\partial_x^2 u(x, t), \quad -\infty < x < \infty \quad (1.27)$$

を考えれば良い。変数 v は速さの次元を持った量である。具体的には（一様外場などの影響により）平均速度 v を持って運動するブラウン粒子を想像すれば良い。実際、 $x \rightarrow x - vt$ として速度 v で移動する慣性系に移れば、粒子の平均速度が 0 の通常の拡散問題に帰着される。例えば、上で考えた解 (1.10) で $x \rightarrow x - vt$ とした

$$u(x, t) = \frac{u_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{4Dt}\right) \quad (1.28)$$

は確かに方程式 (1.27) を満たす（確かめてみよう）。このように、時間が経過すると拡散により分布の空間的な広がり徐々には増大しつつ、同時に一様な速度 v で流れる。しかし、常に流れが存在しているため、粒子は空間を流れ続け、時間に依存しない定常解にはいつまでも到達しない。

以上の議論は空間が無限に広い場合には正しい。しかし、境界条件を課すことで解の振る舞いは定性的に変化する。具体的な状況を考えるため、速度は負方向（ $v < 0$ ）で、 $x = 0$ に流れを遮る壁が存在し、粒子（あるいは熱）が $x < 0$ には流入できないとする：

$$\partial_t u(x, t) = -v\partial_x u(x, t) + D\partial_x^2 u(x, t), \quad 0 \leq x < \infty \quad (1.29)$$

$$u(x, t) = 0, \quad x < 0. \quad (1.30)$$

つまり、一様な流れ $v < 0$ がある下での、 $x \geq 0$ の半無限空間上でのブラウン運動を考える。この場合、無限空間とは異なり、流れを阻害する壁が存在するため、いつまでも粒子が流れ続けるという状況は実現しない。従って、十分時間が経過すると何らかの定常解に到達するはずである。式 (1.27) のうち拡散項 $D\partial_x^2 u(x, t)$ は分布の凹凸を嫌い、対流項 $-v\partial_x u(x, t)$ は x 軸負方向への流れを表し、壁付近では粒子を堆積させる作用を持つ。この二つの効果がバランスすることで、次の解が定常解として実現する：

$$u_{ss}(x) = u_0 \exp\left(-\frac{x}{d}\right), \quad x \geq 0, \quad d = -\frac{D}{v} > 0. \quad (1.31)$$

つまり流れの影響で粒子は壁からおおよそ d 程度の距離に存在し、壁から離れるにしたがい存在確率が指数的に単調減少する。解 (1.31) が式 (1.29) の定常解であることはすぐに確かめられる。

1.4.3 ポテンシャル下の拡散（Smoluchowski 方程式）

最後に、より一般のポテンシャル中での拡散を記述する方程式を考える：

$$\partial_t u(x, t) = -\mu\partial_x (F(x)u(x, t)) + D\partial_x^2 u(x, t), \quad (1.32)$$

$$F(x) = -\partial_x V(x). \quad (1.33)$$

ここで μ は $\left[\frac{\text{時間}}{\text{質量}}\right]$ の次元を持ち易動度と呼ばれる量、 $V(x)$ は粒子が感じるポテンシャル、 $F(x)$ は対応するポテンシャル力である。例えば、上で述べた一様外場は「重力」ポテンシャル $V(x) = fx$

の力に対応し、流れの速度 v は外力 f と

$$v = -\mu f \quad (1.34)$$

により関係づく。つまり μ は粒子の「外力からの影響されやすさ (= 応答)」を特徴付ける量である。

ポテンシャル $V(x)$ が適切な条件を満たせば、式 (1.32) は次の定常解を持つ (確かめてみよう)：

$$u_{ss}(x) = u_0 \exp\left(-\frac{\mu V(x)}{D}\right). \quad (1.35)$$

ここでは後の議論で重要となる調和ポテンシャルの場合を考えよう：

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2. \quad (1.36)$$

k はバネ定数である。方程式は

$$\partial_t u(x, t) = \mu k \partial_x (xu(x, t)) + D \partial_x^2 u(x, t), \quad (1.37)$$

であり、式 (1.35) より定常解は

$$u_{ss} = u_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma = \sqrt{\frac{D}{\mu k}} \quad (1.38)$$

というガウス分布になる。つまり、分布の凹凸を解消する拡散項 $D \partial_x^2 u(x, t)$ と、変位に比例する外力項 $\mu k \partial_x (xu(x, t))$ がバランスした結果、 $x = 0$ にピークを持ち、おおよそ σ 程度の広がりを持った分布が定常解として実現する。

さて量子力学の調和振動子における基底状態波動関数もガウス分布で与えられたことを思い出そう。実はこのことは偶然ではない。Schrödinger 方程式で時間を虚数に解析接続し「虚時間発展」を考えることで、量子力学の調和振動子の問題が、調和ポテンシャル中のブラウン運動の問題に帰着する。量子力学の調和振動子でのエネルギー固有値は、ブラウン運動での緩和レートを特徴付ける。エネルギーが低い状態ほど長い寿命を持ち、いかなる初期状態も最終的にはガウス分布に到達することが明らかとなる。この点については後で詳しく議論する。

1.4.4 Einstein の関係式

引き続きポテンシャル中の拡散 (1.32) を考えよう。拡散が熱運動に由来する場合には定常解 (1.35) は熱平衡分布に一致すべきである。統計力学によれば、温度 T の熱平衡状態は次のカノニカル分布で与えられる^{*4}：

$$u_{eq}(x) \propto \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T}\right). \quad (1.39)$$

ここで k_B は気体定数 R とアボガドロ定数 N_A の比であり、ボルツマン定数と呼ばれる：

$$k_B = \frac{R}{N_A}. \quad (1.40)$$

^{*4} 添字の eq は平衡 (equilibrium) の略である。

つまり粒子はおよそ $k_B T$ 程度のエネルギーを熱浴から受け取っており、それより高いエネルギーを持つ確率は指数的に小さくなる。一方で式 (1.35) によれば、定常解において粒子はおよそ D/μ 程度のエネルギーを有している。この両者が等しいことから、次の Einstein の関係式を得る：

$$D = \mu k_B T \quad (1.41)$$

ここで拡散定数 D は、外力がない場合のブラウン粒子の拡散度合い ($\sqrt{\langle x^2(t) \rangle} = \sqrt{2Dt}$) を表す量であった。一方で、易動度 μ は外力に対する粒子の応答 ($v = -\mu f$) を特徴付ける。この一見異なる物理量が比例しており、その比例係数が熱平衡下で粒子が持つ熱エネルギー $k_B T$ で決まっていることを意味するのが Einstein の関係式である*5。

問題：定常解 (1.35) における粒子のエネルギー期待値

$$\langle V(x) \rangle = \frac{\int dx V(x) u_{ss}(x)}{\int dx u_{ss}(x)} \quad (1.42)$$

を、重力ポテンシャル

$$V(x) = fx, \quad x \geq 0 \quad (1.43)$$

と調和ポテンシャル

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2, \quad -\infty < x < \infty \quad (1.44)$$

の場合についてそれぞれ計算せよ。得られた結果と Einstein の関係式との関連について簡潔に述べよ。ただし次のガウス積分の公式を用いてもよい：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-ay^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}, \quad a > 0. \quad (1.45)$$

*5 これは熱平衡状態に弱い摂動が加わった時の系の応答を扱う一般論である「線形応答理論」の一例である。

2 拡散方程式を解く

拡散方程式の意味についておおよその理解が得られたところで、以下ではより具体的にこの問題を解いてゆく。

2.1 有限区間（変数分離法）

まず有限区間上の拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t), \quad x \in [0, L] \quad (2.1)$$

を変数分離法で解くことを考える。つまり $u(x, t)$ が x のみの関数 $X(x)$ と t のみの関数 $T(t)$ に分離できるような解を探す：

$$u(x, t) = X(x)T(t). \quad (2.2)$$

このような解は一般に無数あるが、線形な偏微分方程式では、式 (2.2) のように書ける基本解の重ね合わせとして任意の解を表すことができる。

話を具体的にするために、ここでは以下の境界条件を課す

$$u(x = 0, t) = u(x = L, t) = 0. \quad (2.3)$$

上で述べたように、これは例えば境界にブラウン粒子を吸収する壁が存在する場合に対応する。拡散方程式に $u(x, t) = X(x)T(t)$ を代入して、両辺を $X(x)T(t)$ で割ると^{*6}

$$\frac{d_t T(t)}{T(t)} = \frac{D d_x^2 X(x)}{X(x)}. \quad (2.4)$$

左辺は t のみの関数で右辺は x のみの関数である。 x と t は独立な変数であるから、これは t, x に依存しない何らかの定数に一致しなければならない：

$$\frac{d_t T(t)}{DT(t)} = \frac{d_x^2 X(x)}{X(x)} = \text{const.} \quad (2.5)$$

後ですぐに確認するように、境界条件を任意の時刻で満たすためにはこの定数は負でなくてはならない。従って右辺の定数を $-k^2$ (k は実数) とすれば

$$d_t T(t) = -k^2 DT(t) \quad (2.6)$$

$$d_x^2 X(x) = -k^2 X(x) \quad (2.7)$$

を得る。これらを満たす解は

$$u(x, t) = \exp(-k^2 Dt) [A \sin(kx) + B \cos(kx)] \quad (2.8)$$

と書ける。境界条件より $B = 0$ および $k_n = \frac{n\pi}{L}$ (n は整数) でなくてはならない^{*7}。よって一般解として

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \exp(-\gamma_n t) \sin(k_n x), \quad \gamma_n = \frac{\pi^2 n^2 D}{L^2} \quad (2.9)$$

^{*6} $d_t = \frac{d}{dt}$ や $d_x^2 = \frac{d^2}{dx^2}$ は一変数関数の微分記号の略記である。

^{*7} もし式 (2.5) の右辺を正とすると、 k は虚数となり、式 (2.8) の $\sin, \cos$ は $\sinh, \cosh$ で置換されるが、これは境界条件を満たし得ない。

が得られる。それぞれの基本解の緩和レート γ_n は n^2 に比例して大きくなる。これは、 n が大きく、より凹凸度合いが激しい成分から早く減衰することを意味し、前述の直感的な理解と一致する。係数 A_n は $t = 0$ の初期状態で決まる定数であるが、この表式を得ることは演習問題とする。

問題：解 (2.9) における係数 A_n を初期時刻の関数 $u(x, 0)$ を用いて表せ。

2.2 無限空間 (Fourier 変換)

前節では有限区間上での拡散方程式の一般解を得た。ここではこの議論を無限空間上に展開する。そのためにまずいくつか数学的準備を行う。

2.2.1 数学的準備

量子力学でも学んだように、適切な条件のもとで関数 $f(x)$ は平面波 e^{ikx} の重ね合わせとして表現できる。これを数式で表すと

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} \quad (2.10)$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}(k) e^{ikx} \quad (2.11)$$

となる。波数 k を引数に持つ関数 $\tilde{f}(k)$ は、 $f(x)$ を平面波で展開した際の展開係数に対応し「関数 $f(x)$ の Fourier 変換」と呼ぶ。いくつか例を考えよう。

例 1：ガウス関数

まず次のガウス関数

$$\tilde{f}(k) = e^{-\alpha k^2}, \quad \alpha > 0 \quad (2.12)$$

を展開係数として持つような関数 $f(x)$ を考えよう。ガウス関数の積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2 - by} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}, \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad \text{Re } a > 0 \quad (2.13)$$

を用いれば、式 (2.11) より

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\alpha}\right) \quad (2.14)$$

を得る。つまり、ガウス関数 $\tilde{f}(k)$ の Fourier 変換 $f(x)$ は、同じくガウス関数であるが $f(x)$ の分散 2α は、 $\tilde{f}(k)$ の分散 $1/(2\alpha)$ と逆比例の関係にある。

例 2：デルタ関数

さて、それでは全ての波数の成分を一律に持つ場合 (つまり $\tilde{f}(k) = 1$) の Fourier 変換は存在するだろうか？ この場合、素朴には上記の積分が収束せず関数 $f(x)$ が定義できないように思える。そこで一律な振幅 $\tilde{f}(k) = 1$ を、以下のような極限として表現してみよう：

$$\tilde{f}(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \exp(-\epsilon k^2). \quad (2.15)$$

ここで $\epsilon \rightarrow +0$ は「正の値を保ちながらゼロに近づける極限」を表している。このように解釈すれば、一様振れ幅 $\tilde{f}(k) = 1$ を持つ関数 $f(x)$ が次の意味できちんと定義できる：

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(-\epsilon k^2) e^{ikx} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\epsilon}\right) \quad (2.16)$$

$\delta(x)$ は $x = 0$ で無限大の値をとり、 $x \neq 0$ ではゼロとなるような関数で、デルタ関数と呼ばれる。このように関数列の極限として定義される関数を、一般に超関数と呼ぶ。以下ではこの意味で一様振れ幅 $\tilde{f}(k) = 1$ の Fourier 変換を解釈し、極限は省略して単に

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \quad (2.17)$$

と表す。関数列の選び方は色々あるが、いずれの場合もデルタ関数 $\delta(x)$ は次の性質を満たす：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) \delta(x) = g(0) \quad (2.18)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (2.19)$$

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|} \delta(x - x_i), \quad g(x_i) = 0 \quad (2.20)$$

これらの関係式は上の定義より確かめられる。

2.2.2 拡散方程式

以上の準備をもとに、本題である無限空間上の拡散方程式に話を戻そう：

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t), \quad -\infty < x < \infty. \quad (2.21)$$

前節と同様に、変数分離型の解 $u(x, t) = X(x)T(t)$ を考えると

$$\frac{d_t T(t)}{DT(t)} = \frac{d_x^2 X(x)}{X(x)} = \text{const.} \quad (2.22)$$

を得る。いま興味があるのは任意の時刻で $\int_{-\infty}^{\infty} dx u(x, t)$ が有限な解である*⁸。これは物理的には、例えばブラウン粒子の確率が全空間で規格化されているために満たされなければならない条件である。このためには右辺の定数が負でなくてはならない。方程式を前節と同様に解くことで、一般解は次のように平面波解の重ね合わせとして書ける*⁹：

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx - k^2 D t}. \quad (2.23)$$

展開係数 $A(k)$ を決定するために、初期時刻 $t = 0$ での関係式

$$u(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx} \quad (2.24)$$

*⁸ このための必要条件として、境界条件 $u(x, t) \rightarrow 0$, $|x| \rightarrow \infty$ を満たす解を暗にここでは考えている。

*⁹ 前節と異なり、波数 k が離散変数ではなく連続変数なのは考えている空間が有限でなく無限だからである。

を考える。これを Fourier 変換すれば

$$A(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx u(x, 0) e^{-ikx} \quad (2.25)$$

が得られる。式 (2.23) に代入すれば^{*10}

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' u(x', 0) e^{-ikx'} \right] e^{ikx - k^2 Dt} \quad (2.26)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' u(x', 0) \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x') - k^2 Dt} \right] \quad (2.27)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right) u(x', 0) \quad (2.28)$$

を得る。ここでガウス積分の公式 (2.13) を用いた。よって無限空間上の拡散方程式の一般解として

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' p(x, t|x', 0) u(x', 0) \quad (2.29)$$

$$p(x, t|x', t') = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t')}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4D(t-t')}\right), \quad t \geq t' \quad (2.30)$$

を得る。ここで導入した関数 $p(x, t|x', t')$ は、次を満たす：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx p(x, t|x', t') = 1, \quad p(x, t|x', t') \xrightarrow{t-t' \rightarrow +0} \delta(x-x'). \quad (2.31)$$

つまり

$p(x, t|x', t')$ = 時刻 t' に位置 x' にいる粒子が、時刻 t に位置 x にいる確率

として解釈できる。実際、式 (2.30) は $x' = 0, t' = 0$ とすれば、以前にランダムウォークで考えた解 (1.10) に他ならない。式 (2.29) が確かに拡散方程式を満たすことは、この条件付き確率分布が

$$(\partial_t - D\partial_x^2) p(x, t|x', t') = 0 \quad (2.32)$$

を満たすことから明らかである。

^{*10} 式 (2.25) の変数 x は積分で用いるダミー変数である点に注意しよう。

2.3 Green 関数

前節で導いた関数 $p(x, t|x', t')$ は、インパルス入力に対する応答を記述する Green 関数としての意味も持つ。このことを見るために Green 関数を

$$G(x, t|x', t') = \begin{cases} p(x, t|x', t') & t \geq t' \\ 0 & t < t' \end{cases} \quad (2.33)$$

で定義しよう。これが次の方程式を満たすことが示せる：

$$(\partial_t - D\partial_x^2) G(x, t|x', t') = \delta(x - x')\delta(t - t'). \quad (2.34)$$

Green 関数を用いれば外部からの「入力」 $f(x, t)$ が存在する拡散方程式の一般解を得ることができる：

$$\partial_t u(x, t) = D\partial_x^2 u(x, t) + f(x, t) \quad (2.35)$$

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dt' G(x, t|x', t') f(x', t') \quad (2.36)$$

特に、分布がデルタ関数の撃力（インパルス入力）の場合

$$f(x', t') = \delta(x' - x_0)\delta(t' - t_0) \quad (2.37)$$

を考えると

$$u(x, t) = G(x, t|x_0, t_0) = \begin{cases} p(x, t|x_0, t_0) & t \geq t_0 \\ 0 & t < t_0 \end{cases}. \quad (2.38)$$

である。つまり、時刻 t_0 でのインパルス入力に対する応答が Green 関数 $G(x, t|x_0, t_0)$ に他ならない。入力後 $t \geq t_0$ での応答は条件付き確率分布 $p(x, t|x_0, t_0)$ で与えられ、入力前 $t < t_0$ では応答がないため $u(x, t) = 0$ であり、因果律を満たしている。

問題：式 (2.34) の両辺が任意の時刻で一致することを示せ。

ヒント：両辺を時刻 t について区間 $[t' - \epsilon, t' + \epsilon]$ で積分してみよう。ここで $\epsilon > 0$ は微小量である。

3 量子力学と拡散方程式

さてこれまで扱ってきた拡散方程式は、基本的にはブラウン運動など、量子効果が重要でない古典系の運動を記述する方程式である。しかし、実は拡散方程式と量子力学で登場する Schrödinger 方程式の間には密接な関係がある。この点について以下では掘り下げてみよう^{*11}。

3.1 Schrödinger 方程式と拡散方程式

前節でみたように、時刻 t_0 での初期状態を $u(x_0, t_0)$ とする拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t), \quad -\infty < x < \infty \quad (3.1)$$

の解は

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 p(x, t|x_0, t_0) u(x_0, t_0), \quad t \geq t_0 \quad (3.2)$$

$$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}\right), \quad (3.3)$$

により与えられる。これと量子力学の講義で学んだ自由粒子の Schrödinger 方程式

$$i\partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t) \quad (3.4)$$

を見比べてみよう。両者は共に時間の一階微分と空間の二階微分を関係付ける偏微分方程式であり、次の置換

$$t \rightarrow it, \quad D \rightarrow \frac{\hbar}{2m}, \quad u(x, t) \rightarrow \psi(x, t) \quad (3.5)$$

を形式的に行えば、拡散方程式は Schrödinger 方程式に帰着する^{*12}。

このことは何を意味するのだろうか？式 (3.2) と (3.3) で上の置換を行うと

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 T(x, t|x_0, t_0) \psi(x_0, t_0), \quad t \geq t_0 \quad (3.6)$$

$$T(x, t|x_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t_0)}} \exp\left(\frac{im(x-x_0)^2}{2\hbar(t-t_0)}\right), \quad (3.7)$$

という式を得る。ここに現れた $T(x, t|x_0, t_0)$ という量の意味を理解するため、ブラケット表示を

^{*11} 講義がこの章の内容に入るまでに、量子力学の初歩について各自予習を行っておくことを勧めます。例えば濱口先生の昨年の講義資料をぜひ読んでみてください（リンクはこちら）。

^{*12} このような操作は解析接続として知られており、注意深く行えばきちんと正当化できる。今の場合には、 t を一般の複素数として、ガウス積分 (2.13) が常に収束するような経路に沿って t を実数から純虚数に変化させれば良い。具体的には、経路の終点で変数 t を、微小な $\eta > 0$ について $t - i\eta$ ととり、計算の最後に $\eta \rightarrow +0$ の極限をとるものと解釈すれば良い。

用いて波動関数を書き直してみよう：

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle \quad (3.8)$$

$$= \langle x | \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (3.9)$$

$$= \int dx_0 \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \langle x_0 | \psi(t_0) \rangle \quad (3.10)$$

$$= \int dx_0 \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \psi(x_0, t_0) \quad (3.11)$$

ここで関係式

$$\int dx_0 |x_0\rangle \langle x_0| = 1 \quad (3.12)$$

と、時刻 t_0 から t までの時間発展がハミルトニアン^{*13}

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{p} = -i\hbar\partial_x \quad (3.13)$$

で生成されるユニタリ変換

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \quad (3.14)$$

で与えられることを用いた。式 (3.6) と (3.11) を見比べれば、 $T(x, t|x_0, t_0)$ という量が

$$T(x, t|x_0, t_0) = \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle \quad (3.15)$$

と表せる。つまり

$$T(x, t|x_0, t_0) =$$

状態 $|x_0\rangle$ が時刻 t_0 から t まで時間発展した後に、状態 $|x\rangle$ に遷移する確率振幅

という物理的な意味を持つ^{*14}。

問題：自由粒子の遷移確率振幅 $T(x, t|x_0, t_0)$ が式 (3.7) で与えられることを、 $\langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle$ を直接計算することで確かめよ。

ヒント：運動量基底を考え、ガウス積分の公式 (2.13) および運動量固有状態 $|p\rangle$ に関する次の関係式を用いよ：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = 1, \quad \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ixp/\hbar}. \quad (3.16)$$

これを踏まえてもう一度、拡散方程式と Schrödinger 方程式を見比べてみよう。話を具体的にするために、それぞれの初期状態として $t_0 = 0$ に $x_0 = 0$ 付近に a 程度の広がりを持って局在したガウス波束を考える。拡散方程式の解 (3.2) と Schrödinger 方程式の解 (3.6) は、いずれも初期位置 $x_0 \sim 0$ から x まで伝搬する基本解の重ね合わせとして構成される。特に、位置 x が初期状態の広がり a より十分離れていれば、それぞれの解は

$$\left\{ \begin{array}{l} u(x, t) \\ \psi(x, t) \end{array} \right\} \propto \exp\left(\text{係数} \times \frac{x^2}{t}\right), \quad |x| \gg a \quad (3.17)$$

^{*13} 厳密には $\langle x | \hat{p} = -i\hbar\partial_x | x \rangle$ の意味。

^{*14} 確率は振幅の二乗 $|T(x, t|x_0, t_0)|^2$ で与えられることに注意しよう。

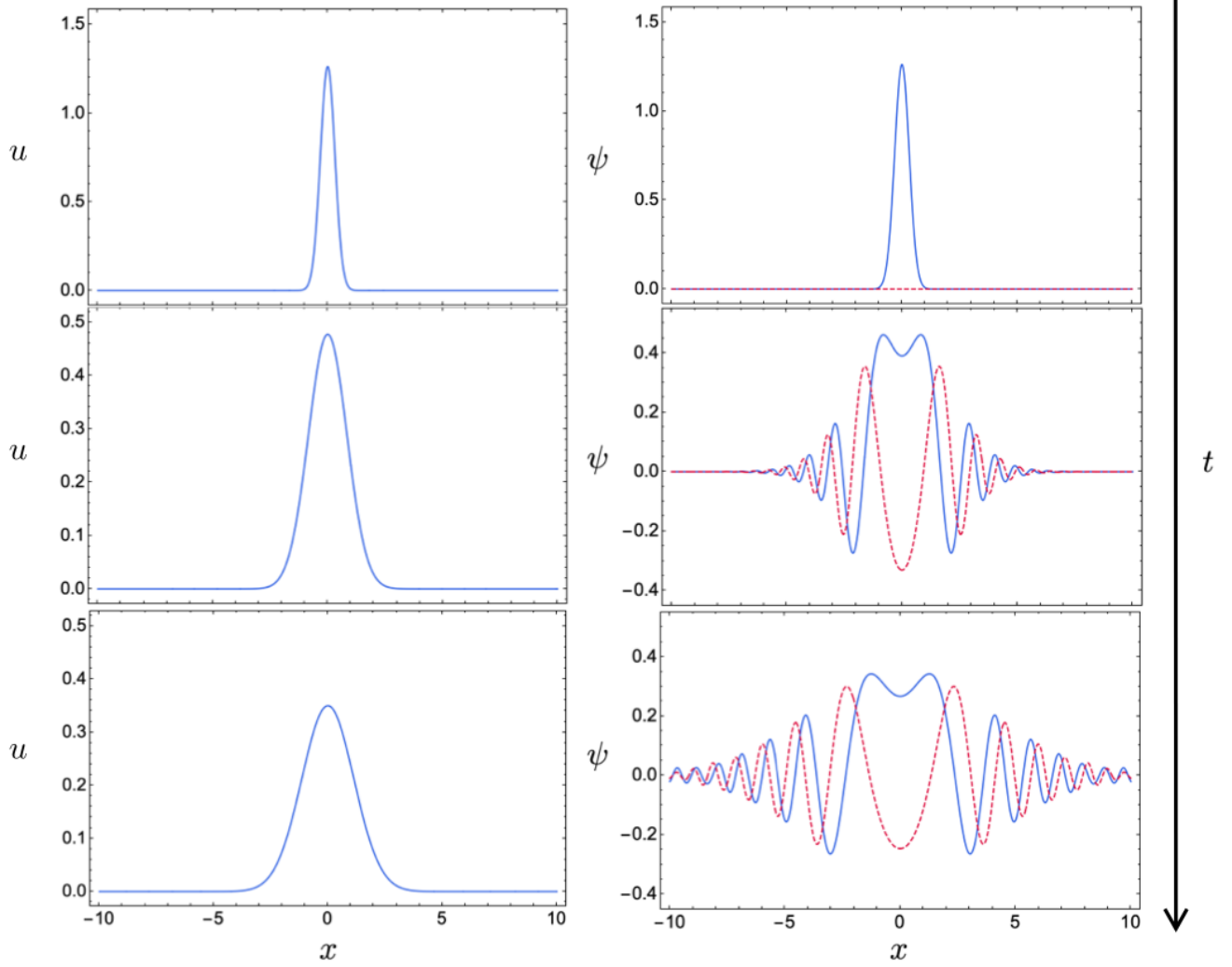


図5 ガウス波束を初期状態とする (左) 拡散方程式と (右) Schrödinger 方程式での解の振る舞い。右図では青線が波動関数 $\psi(x, t)$ の実部、赤点線が虚部を表す。

という形をしている。両者の違いは、拡散方程式ではこの「係数」が実数、Schrödinger 方程式では虚数である点だ。この違いにより解の性質は定性的に変わる（図5を参照）。

まず拡散方程式では係数は負の実数であり、 x が初期位置 $x_0 \sim 0$ から離れるほどその振幅が指数的に減衰する。減衰の度合いは式 (3.17) の分散で決まっており、波束の分散は $\sqrt{t}$ に比例して「ゆっくり」と広がる。これは前節で見た通りである。

一方で、Schrödinger 方程式の解

$$\psi(x, t) \propto \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right), \quad |x| \gg a \quad (3.18)$$

は虚数係数を持つため減衰せず、初期位置から離れるほど激しく振動する。この意味を考えるために、解に運動量演算子を作用させてみよう：

$$\hat{p}\psi(x, t) = -i\hbar\partial_x\psi(x, t) = p(x)\psi(x, t), \quad p(x) = \frac{mx}{t}. \quad (3.19)$$

つまり x の近くでは、 $\psi(x, t)$ は運動量 $p(x)$ を持つ状態 $e^{ip(x)x/\hbar}$ のように振舞う。形式的には

$p(x)$ は「粒子が位置 x 付近にいるという条件付きでの運動量期待値」を意味する：

$$p(x) = \frac{\int_x^{x+\Delta x} dx \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t)}{\int_x^{x+\Delta x} dx |\psi(x, t)|^2}. \quad (3.20)$$

ここで $p(x) = mx/t$ という量は古典力学では「 $x_0 = 0$ から出発して、時刻 t に位置 x にいる自由粒子が持つ運動量」に他ならない。より大きい運動量を持つ成分がより早く伝搬し、より遠くに到達する。運動量が大きいくほど波動関数の振動は激しい。これが式 (3.18) で初期位置から離れるほど波動関数が激しく振動することの物理的意味である。

初期状態は異なる運動量を持つ状態の重ね合わせ

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{\psi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p^2}{2m\hbar}t}, \quad (3.21)$$

であった。上の描像に従えば、運動量 $p = p(x)$ の成分が時刻 t で位置 x に到達する。実際、この成分は式 (3.18) で見たように

$$\exp\left(i\frac{p(x)}{\hbar}x - i\frac{p^2(x)}{2m\hbar}t\right) = \exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right) \quad (3.22)$$

という振動する因子を持つ。

この考察をもとに波束がどのように広がるか考えてみよう。式 (3.19) で見たように、運動量 $p = p(x)$ を持つ成分が時刻 t に位置 x まで到達する。波束は典型的に $\sqrt{\langle p^2 \rangle}$ 程度の運動量を持つと考えれば、時刻 t での波動関数 $\psi(x, t)$ はおよそ

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \frac{\sqrt{\langle p^2 \rangle}}{m}t, \quad \Delta x \gg a \quad (3.23)$$

程度の距離まで到達すると考えられる。このように、Schrödinger 方程式では $\langle x^2 \rangle \propto t^2$ と等速運動的に波束が広がる^{*15}。これは $\langle x^2 \rangle \propto t$ のように分布が広がる拡散方程式よりも遥かに早い。

さて式 (3.7) の指数関数の肩に出てくる

$$\frac{m(x - x_0)^2}{2(t - t_0)} \quad (3.24)$$

という量だが、これは解析力学で学ぶように、古典力学の Lagrangian L を時間積分した作用 $S_{\text{cl}} = \int dt L$ という量に対応する。特に、 $S_{\text{cl}} \gg \hbar$ という「古典極限」においては関係式

$$T(x, t|x_0, t_0) \propto e^{iS_{\text{cl}}[x_{\text{cl}}]/\hbar} \quad (3.25)$$

が一般的に成立する。ここで x_{cl} は古典的に実現する粒子の軌跡を表し、作用の積分はこの軌跡に沿って行う。量子効果が重要となる $S_{\text{cl}} \sim \hbar$ という状況ではこのような古典軌道のみではなく、ありとあらゆる軌道 $x(t)$ について遷移確率振幅を足し合わせる必要がある^{*16}。

^{*15} このような波束の運動は実験的にも最近直接観測されている [Phys. Rev. Lett. 134, 083403 (2025)]。

^{*16} 詳細については量子力学の経路積分を勉強してみよう（例えば [Feynman and Hibbs, 量子力学と経路積分, みすず書房 (1995)]）。

問題：一次元無限空間を考える。ガウス波束

$$\psi(x_0, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x_0^2}{4\sigma^2}}. \quad (3.26)$$

が初期状態の場合に、自由粒子の Schrödinger 方程式を解くことで時刻 t の波動関数 $\psi(x, t)$ を求めよ。位置分散が関係 (3.23) を満たすことを確かめよ。

ヒント：式 (3.6), (3.7) やガウス積分の公式 (2.13) を用いても良い。

3.2 一様外力下のブラウン運動と非エルミート物理

ブラウン運動と量子力学の対応について引き続き考えよう。ここでは前にも考えた一様外力下のブラウン運動

$$\partial_t u(x, t) = -v\partial_x u(x, t) + D\partial_x^2 u(x, t), \quad v < 0 \quad (3.27)$$

を考える。この場合にも前節のように量子力学の問題と対応づけることはできるだろうか？

形式的には前と同様に

$$t \rightarrow it, \quad D \rightarrow \frac{\hbar}{2m}, \quad u(x, t) \rightarrow \psi(x, t) \quad (3.28)$$

と置換すれば

$$i\partial_t \psi(x, t) = v\partial_x \psi(x, t) - \frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t), \quad -\infty < x < \infty \quad (3.29)$$

という、一見 Schrödinger 方程式に似た方程式が得られる。しかし、これは通常の意味での Schrödinger 方程式にはなり得ない。その理由を説明するために、運動量演算子が $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ と表せたことを思い出して式を書き直してみよう：

$$i\hbar\partial_t \psi(x, t) = \hat{H}_{\text{eff}} \psi(x, t) \quad (3.30)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = iv\hat{p} + \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (3.31)$$

ここで一見ハミルトニアンのような演算子 $\hat{H}_{\text{eff}}$ が得られるが、これは外力に由来する $iv\hat{p}$ という項のせいでエルミート性を満たさない：

$$\hat{H}_{\text{eff}} \neq \hat{H}_{\text{eff}}^\dagger = -iv\hat{p} + \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (3.32)$$

ハミルトニアンのエルミート性は量子力学の確率を保存するための基本的要請であり、このために方程式 (3.29) は Schrödinger 方程式とは解釈できない。

では上で得られた方程式 (3.29) は全く無意味なのであろうか？実は量子力学の方程式としてではなく、電磁波や古典流体の物理現象を、式 (3.29) と数学的に等価な方程式で記述できる場面が多くある^{*17}。それらの状況ではエルミート性の破れ（これを非エルミート性という）に由来して、むしろ量子力学では通常見られないような不思議な現象がしばしば生じる。以下では、そのような例の一つとしてブラウン運動の問題とも密接に関連する「エルミート性の破れに伴う、固有値の境界条件に対する特異な鋭敏性」を紹介する。

^{*17} この場合、 ψ は波動関数ではなく、 $\hbar$ はもはやプランク定数としての意味は持たないが、以下では引き続き形式的に同じ記号を用いる。

無限空間

無限空間 $-\infty < x < \infty$ における方程式 (3.29) を考える。運動量固有状態 $|p\rangle$ を用いると、 $\hat{H}_{\text{eff}}$ の固有値が

$$\hat{H}_{\text{eff}}|p\rangle = E(p)|p\rangle, \quad -\infty < p < \infty \quad (3.33)$$

$$E(p) = ivp + \frac{p^2}{2m} \neq E^*(p) \quad (3.34)$$

と求まる。エルミートな場合には固有値は実数であったが、今の場合は外力が引き起こす流れの項により、エルミート性が破れているため、複素固有値となることに注意しよう (図6)。

半無限境界条件

次に前節で考えたのと同様に、 $x = 0$ に流れを遮る壁が存在する場合を考えよう。つまり半無限空間での方程式を以下のように考える：

$$i\partial_t\psi(x, t) = v\partial_x\psi(x, t) - \frac{\hbar}{2m}\partial_x^2\psi(x, t), \quad 0 \leq x < \infty. \quad (3.35)$$

$$\psi(x, t) = 0, \quad x \leq 0 \quad (3.36)$$

この固有値問題を解くために $\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ という定常解を仮定すれば、

$$\frac{E}{2mv^2}\psi(y) = -\partial_y\psi(y) - \partial_y^2\psi(y), \quad y = -\frac{2mv}{\hbar}x \quad (v < 0) \quad (3.37)$$

という方程式を得る。これは

$$\psi(y) \propto e^{-\rho y}, \quad 0 \leq y < \infty \quad (3.38)$$

という解を持ち^{*18}、固有値方程式を解くことで以下のように ρ の値が決定される：

$$\rho^2 - \rho + \frac{E}{2mv^2} = 0 \iff \rho = \rho_{\pm}(E) = \frac{1 \pm \sqrt{1 - \frac{2E}{mv^2}}}{2}. \quad (3.39)$$

このうち $\rho_+(E)$ は $E \rightarrow 0$ の極限で e^{-y} という解を与える。これはブラウン運動の場合にも出てきた「時間に依存しない (従って $E = 0$ を持つ) 定常分布 (1.31)」に対応している。

ここでは無限空間での結果との関連を考えるために、 $E \rightarrow 0$ で一様解 $\rho \rightarrow 0$ となる方の解 $\rho_-(E)$ に着目しよう^{*19}。式 (3.38) が規格化可能な解となるためには

$$\text{Re } \rho_-(E) > 0 \quad (3.40)$$

が必要である。これを満たすような領域を図示すると、無限空間での固有値曲線 $E(p) = ivp + \frac{p^2}{2m}$ で囲まれた複素領域となる (図6)。不思議なことに、半無限境界条件での固有値 E は、無限空間よりも遥かに色々な値を取り得る。

^{*18} 厳密には、 $x = 0$ での境界条件を満たすために $\psi(y) \propto (e^{-\rho_- y} - e^{-\rho_+ y})$ とする。

^{*19} 無限空間では $E \rightarrow 0$ で $p \rightarrow 0$ であり一様解に帰着する。また常に $\text{Re } \rho_+(E) > 0$ が成り立つ。

有限区間（固定端境界条件）

最後に有限区間上で固定端境界条件を課す場合を考えよう：

$$i\partial_t\psi(x,t) = v\partial_x\psi(x,t) - \frac{\hbar}{2m}\partial_x^2\psi(x,t), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (3.41)$$

$$\psi(0,t) = \psi(L,t) = 0. \quad (3.42)$$

導出は演習問題とするが、固有値は離散的な実数値となる

$$E_n\psi_n(x) = \hbar v\partial_x\psi_n(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_n(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (3.43)$$

$$E_n \in \mathbb{R}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.44)$$

不思議なことに、今度は固有値が「とびとびの実数値しかとらない」という結果が得られる（図6）。これは無限空間の固有値とは明らかに異なる。一方で、半無限境界条件の固有値の複素領域には含まれるが、今回の固有値は実数のみであり、 L が大きい極限で一次元領域を占めるだけである。

このように、境界条件を変更しただけで固有値スペクトラムが劇的に変化し得る。物理的には、境界を作ることで流れが遮られ分布が定性的な変更を受けることに由来している。

問題：固定端境界条件における固有値 E_n の表式を求めよ。

ヒント： $\psi(y) = Ae^{-\rho+y} + Be^{-\rho-y}$ と仮定せよ。

詳細に立ち入る時間はないが、このような境界条件に対する固有値スペクトラムの鋭敏性は、 $\hat{H}_{\text{eff}}$ の非エルミート性に由来している。実際、エルミート性が満たされている場合には、境界パラメータの微小な変更などでは固有値が不連続的に変化し得ないことが示せる。例えば有限次元の行列について、次の定理が知られている^{*20}：

Weyl の摂動定理：任意の $n \times n$ エルミート行列 H と V について、 H の j 番目に大きい固有値を λ_j 、 $H + V$ の j 番目に大きい固有値を λ'_j とする。この時

$$|\lambda_j - \lambda'_j| \leq \|V\|, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, n\}. \quad (3.45)$$

ここで右辺は作用素ノルムである

$$\|V\| \equiv \max_{|c|=1} |Vc|. \quad (3.46)$$

3.3 ポテンシャル中のブラウン運動と量子粒子

前節では、流れのあるブラウン運動を考え、エルミート性が破れた演算子（非エルミート演算子）に出会った。量子力学で学んだように、演算子がエルミートならば固有値は全て実であった。しかし、その逆は一般には成り立たない。つまり、非エルミート演算子も実固有値を持ち得る。実際、前節の固定端条件での固有値は実であった。ここでは「非エルミート演算子が実固有値を持

^{*20} 証明は例えば Adv. Phys. 69, 3 (2020) の Appendix A を参照。

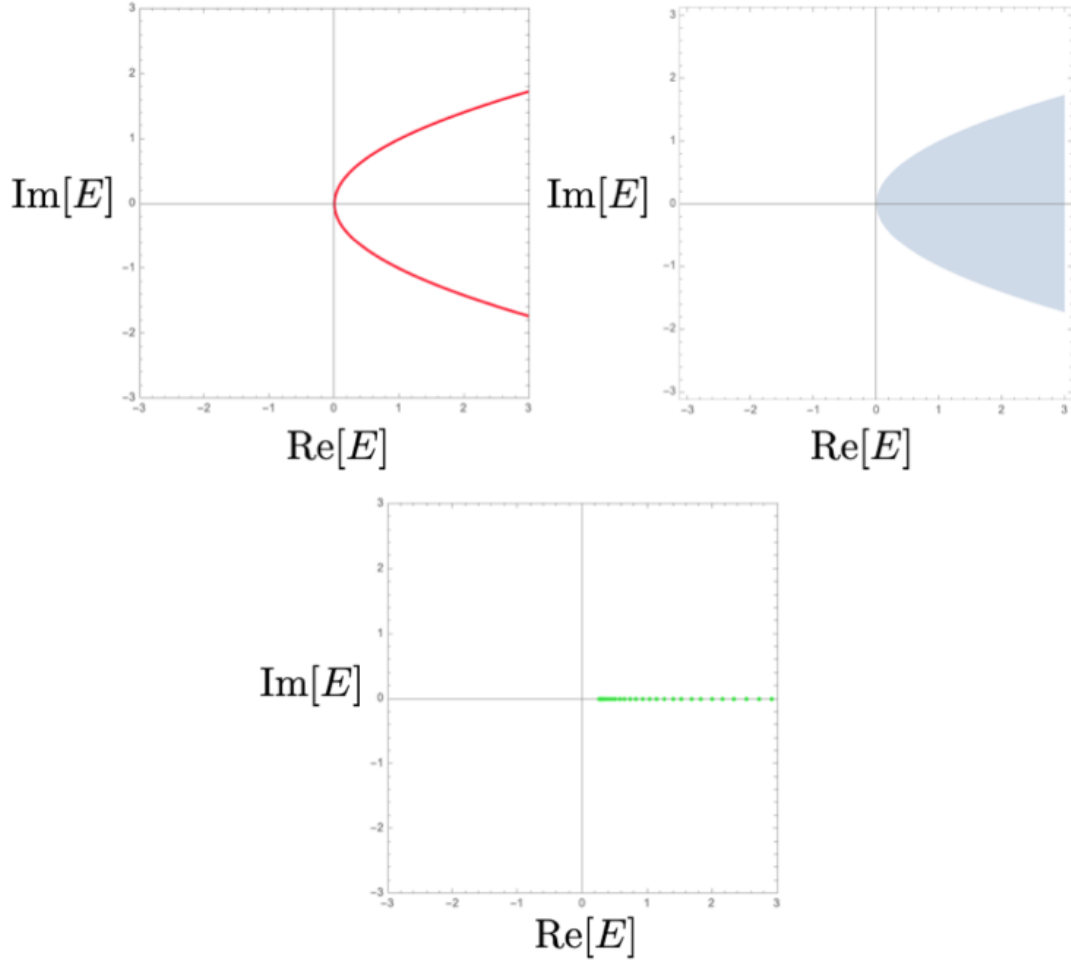


図6 無限空間 (左上)、半無限境界条件 (右上)、有限区間・固定端境界条件 (下) での演算子 (3.31) の固有値スペクトラム。

つ」ことの意味について、もう少し掘り下げてみよう。そのために、例として前節でも議論したポテンシャル中のブラウン運動を取り上げる。

考えるべき方程式は、ポテンシャル中のブラウン運動の拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = \mu \partial_x (u(x, t) \partial_x V(x)) + D \partial_x^2 u(x, t), \quad -\infty < x < \infty \quad (3.47)$$

である。ここでポテンシャル $V(x)$ は

$$V(x) \rightarrow \infty \quad (|x| \rightarrow \infty) \quad (3.48)$$

を満たすとする。上で行ったのと同じ置換

$$t \rightarrow it, \quad D \rightarrow \frac{\hbar}{2m}, \quad u(x, t) \rightarrow \psi(x, t) \quad (3.49)$$

を行って得られる

$$i \partial_t \psi(x, t) = -\mu \partial_x (\psi(x, t) \partial_x V(x)) - \frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t) \quad (3.50)$$

という方程式である。一見 Schrödinger 方程式が得られたように見えるが、

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \hat{H}_{\text{eff}}\psi(x,t) \quad (3.51)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -i\mu\hat{p}\partial_x V(x) + \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (3.52)$$

$$= -\mu\hbar\partial_x^2 V(x) - i\mu\partial_x V(x)\hat{p} + \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (3.53)$$

のように書き直すと、 $-i\mu\partial_x V(x)\hat{p}$ という項があるためにエルミート性が満たされておらず量子力学の Schrödinger 方程式としては解釈できない。では上の非エルミート演算子 $\hat{H}_{\text{eff}}$ は固有値の実性も破っているのだろうか？

実は $\hat{H}_{\text{eff}}$ の固有値は全て実であることが示せる。このことを見るために、次の相似変換を行う^{*21}：

$$\hat{H} = e^{m\mu V(x)/\hbar} \hat{H}_{\text{eff}} e^{-m\mu V(x)/\hbar} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W(x) \quad (3.54)$$

$$W(x) = \frac{m\mu^2}{2} (\partial_x V(x))^2 - \frac{\hbar\mu}{2} \partial_x^2 V(x) \quad (3.55)$$

変換後に得られた演算子 $\hat{H}$ はエルミート性を満たしている

$$\hat{H} = \hat{H}^\dagger. \quad (3.56)$$

従って、変換前の $\hat{H}_{\text{eff}}$ はエルミート性を破っているにも関わらず実固有値しか持たない。ここでを行った議論は一般化することができ「非エルミート演算子の固有値が全て実であるための必要十分条件は、非エルミート演算子をエルミート演算子に写す適切な相似変換が存在すること」が示せる。

問題：相似変換後のハミルトニアン (3.54),(3.55) を導出せよ。

ヒント： $e^{m\mu V(x)/\hbar} \hat{p} e^{-m\mu V(x)/\hbar} = \hat{p} + im\mu\partial_x V(x)$ を用いよ。

例：調和ポテンシャル中のブラウン運動

方程式 (3.50) で調和ポテンシャルの場合を考えてみよう：

$$V(x) = \frac{kx^2}{2}. \quad (3.57)$$

式 (3.54) より、 $\hat{H}_{\text{eff}}$ の固有値は、相似変換後のエルミート演算子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}, \quad \omega = k\mu \quad (3.58)$$

の固有値から求まる。 $\hat{H}$ は量子力学でも学んだ量子調和振動子のハミルトニアン（からゼロ点エネルギー $\hbar\omega/2$ を引いたもの）に他ならない。量子力学での結果を用いれば無次元化した変数

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (3.59)$$

^{*21} 相似変換で固有値スペクトラムは不変である（理由は各自考えてみよう）。また前節での一様外力 ($V(x) \propto x$) の例では、無限・半無限空間だと複素数固有値が出てきたのを思い出そう。つまり相似変換が規格化可能性を保つかどうか重要である。本節では条件 (3.48) から規格化可能であることを暗に仮定している。

により固有関数と固有値が

$$\hat{H}\varphi_n(y) = E_n\varphi_n(y), \quad E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.60)$$

$$\varphi_n(y) = e^{-y^2/2} H_n(y) \quad (3.61)$$

と求まる。ここで $H_n(y)$ は次のエルミート多項式である：

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (3.62)$$

$$H_0(y) = 1, \quad H_1(y) = 2y, \quad H_2(y) = 4y^2 - 2, \quad (3.63)$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y, \quad H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12, \dots \quad (3.64)$$

φ_n に $e^{-m\mu V(x)/\hbar} = e^{-y^2/2}$ を作用させれば、相似変換する前の $\hat{H}_{\text{eff}}$ の固有関数 ψ_n が得られる

$$\psi_n(x) = e^{-m\mu V(x)/\hbar} \varphi_n(y). \quad (3.65)$$

相似変換で固有値は変わらないため

$$\hat{H}_{\text{eff}}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad (3.66)$$

である。まとめると、調和ポテンシャル中の Schrödinger 的な方程式 (3.50) の固有解として

$$\psi_n(x, t) = e^{-in\omega t} e^{-y^2} H_n(y) \quad (3.67)$$

が得られた。

さてこの結果を用いると、出発点として考えていた調和ポテンシャル中のブラウン運動の問題も解くことができる。実際、置換

$$t \rightarrow -it, \quad \frac{\hbar}{2m} \rightarrow D, \quad \psi(x, t) \rightarrow u(x, t) \quad (3.68)$$

を行えば、方程式 (3.50) は元のブラウン運動の問題

$$\partial_t u(x, t) = \omega \partial_x (xu(x, t)) + D \partial_x^2 u(x, t) \quad (3.69)$$

となる。固有解 (3.67) で同じ置換をすれば

$$u_n(x, t) = e^{-n\omega t} e^{-y^2} H_n(y), \quad y = \sqrt{\frac{\omega}{2D}} x, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.70)$$

が調和ポテンシャル中のブラウン粒子の基本解として求まる。 n が大きいほど節が多く凹凸が激しいため早く減衰する。これは拡散方程式の意味を考えた際の直感とも整合する。時刻 $t \rightarrow \infty$ の極限で、 $n \geq 1$ のモードは全て減衰し、最終的には $n = 0$ の定常解が生き残る。前節でも見たように、定常解は量子調和振動子の基底状態に対応し、ガウス分布で与えられる：

$$u_{\text{ss}}(x) \propto u_0(x) = e^{-\frac{\omega}{2D} x^2}. \quad (3.71)$$

さて、鋭い人は $u_n(x, t)$ は粒子の確率密度を表すはずなのに、固有解 (3.70) が負になり得ることに気づいたかもしれない。実は、初期条件 $u(x, 0)$ が全ての x について正ならば、その後の任意

の時刻 t で $u(x, t)$ が正であることがきちんと示せる。具体的には、調和ポテンシャル中のブラウン粒子を記述する偏微分方程式 (3.69) の Green 関数

$$G(x, t|x', 0) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi D(1 - e^{-2\omega t})}} \exp \left[-\frac{\omega}{2D(1 - e^{-2\omega t})} (x - x'e^{-\omega t})^2 \right] \quad (3.72)$$

を用いることで、解が

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G(x, t|x', 0) u(x', 0), \quad t \geq 0 \quad (3.73)$$

と与えられる。

問題：偏微分方程式 (3.69) の解が式 (3.73), (3.72) で与えられることを示せ。

ヒント： $u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x, t)$ と展開して係数 A_n を初期条件から決定せよ。必要であれば次の公式を用いよ：

$$\int dy e^{-y^2} H_n(y) H_m(y) = \begin{cases} \sqrt{\pi} 2^n n! & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (3.74)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) H_n(y)}{n!} \left(\frac{z}{2} \right)^n = \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} \exp \left[-\frac{(x^2 + y^2)z^2 - 2xyz}{1 - z^2} \right] \quad (3.75)$$

4 くりこみ群と拡散方程式

拡散方程式の意味について考察し、その量子力学との関連について議論してきた。本節では拡散方程式とくりこみ群の関連について深掘りする。くりこみ群とは、理論物理学が生み出した方法論の一つで、素粒子物理学から統計物理学に至る様々な分野で用いられる普遍的かつ強力な手法である。くりこみ群を本格的に学ぼうとすると、場の量子論や統計力学の知識が必要となるが、ここではできる限りこれまで学んできたことをベースにくりこみ群の基本的なアイデアを理解することを目指す。

4.1 くりこみ変換：中心極限定理を例に

くりこみ変換の説明として、Ising 模型など統計物理の典型的問題を例にするのが定番である。しかしこの講義を履修している学生の多くは統計力学は未履修なはずなので、ここでは学部前期課程の講義でも（おそらく）扱う題材である中心極限定理を例にくりこみ変換について紹介する [G. Jona-Lasinio, Phys. Rep. 352 439 (2001)]。以下で見るように、これは前節で扱った直交多項式の良い応用例にもなっている。

何らかの同一分布 $p(x)$ から生成される独立な乱数 $x_1, x_2, \dots, x_N$ を考える。簡単のため平均値は 0 で、分散は 1 とする^{*22}：

$$\int dx xp(x) = 0, \quad \int dx x^2 p(x) = 1. \quad (4.1)$$

中心極限定理の主張は次の通りである：

$$\frac{\sum_{i=1}^N x_i}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} p_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right]. \quad (4.2)$$

つまり $\sqrt{N}$ で規格化した乱数の「平均値」が、 N が大きい極限で分散 1 のガウス分布 p_G に従う。

この平均値をとる操作を、全ての変数について一気に行うのではなく、小刻みに二変数ずつ行うことを考える。つまり次の「くりこみ変換」の繰り返しとして平均値をとる操作を表す：

$$x_1 \leftarrow \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, \quad x_2 \leftarrow \frac{x_3 + x_4}{\sqrt{2}}, \quad \dots \quad (4.3)$$

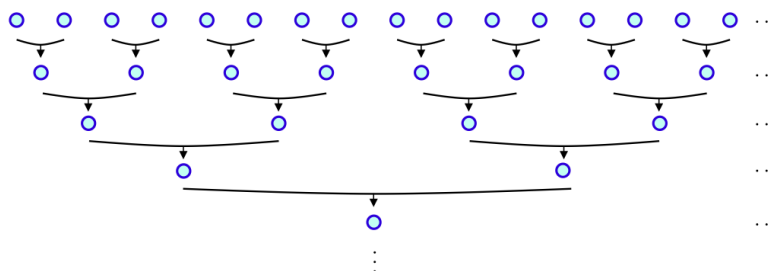


図7 くりこみ群と中心極限定理。

^{*22} これは変数の定数シフト・定数倍を行うことでいつでも可能である。

これは一次元上に並べられた独立な乱数 $x_1, x_2, \dots$ の左から二変数ずつ平均をとり、得られた値を次の操作における変数 $x_1, x_2, \dots$ とし、再び二変数ずつ平均をとり $\dots$ という操作の繰り返しとみなせる (図7)。いわば並べられた乱数を「粗視化」する操作ともみなせる。くりこみ変換を一回行うごとに変数の数は半分となる。例えばもとの変数の数が $N = 2^L$ の場合は、くりこみ変換を L 回行えば全変数に関する平均をとったことになる。

さてこのような操作を n 回行った後に得られる分布を $p_n(x)$ とする。くりこみ変換により分布は次のように変化する：

$$p_{n+1}(x) = \int dx_1 dx_2 \delta\left(x - \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}\right) p_n(x_1) p_n(x_2) \quad (4.4)$$

$$= \sqrt{2} \int dx_1 p_n(x_1) p_n(\sqrt{2}x - x_1). \quad (4.5)$$

ここでデルタ関数の公式 (2.19) を用いた。この変換は分布の規格化と一次・二次モーメントを保存する (確かめてみよう)：

$$\int dx x^m p_{n+1}(x) = \int dx x^m p_n(x), \quad m \in \{0, 1, 2\}. \quad (4.6)$$

上式の操作をくりこみ変換 $\mathcal{R}$ と表記して

$$p_{n+1} = \mathcal{R}p_n \quad (4.7)$$

としばしば表す。くりこみ変換で不変な分布を固定点と呼ぶ。今の場合、式 (4.2) のガウス分布 p_G が固定点となる：

$$p_G = \mathcal{R}p_G. \quad (4.8)$$

初期分布を色々な分布に選んだときの具体例を図8に示す。いずれの場合もくりこみ変換を行うに伴い、次第に形が崩れ、固定点であるガウス分布にどんどん近づいてゆく様子がわかる。

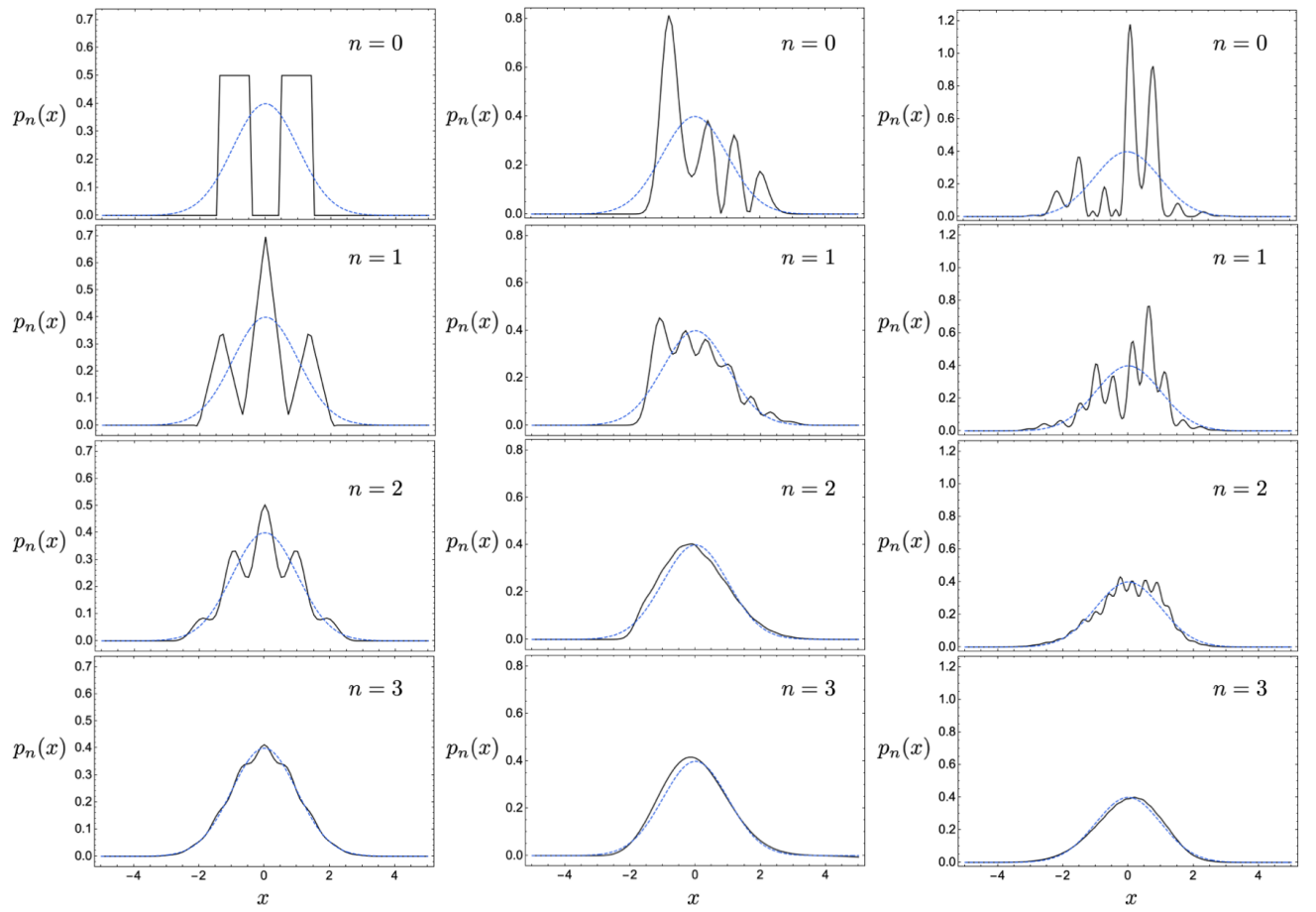


図8 色々な初期分布のくりこみ変換 (4.7) による変化。青点線は固定点のガウス分布。

固定点付近での分布の変化を調べるために、確率分布 $p_n(x)$ が

$$p_n(x) = p_G(x)(1 + \epsilon q_n(x)) \quad (4.9)$$

と展開できると仮定する。ここで ϵ は微小で、 $q_n(x)$ は何らかの多項式である。保存則 (4.6) より q_n は

$$\int dx p_G(x) x^m q_n(x) = 0, \quad m \in \{0, 1, 2\} \quad (4.10)$$

を満たす。従って、 q_n をエルミート多項式で展開すると 0, 1, 2 次の項は消えて

$$q_n(x) = \sum_{m=3}^{\infty} c_m^{(n)} H_m(x) \quad (4.11)$$

と表せる (式 (3.74) を参照)。くりこみ変換をほどこすと

$$p_{n+1} = \mathcal{R}p_n = p_G(1 + \epsilon \mathcal{L}q_n) + O(\epsilon^2) \quad (4.12)$$

を得る。ここで q_n に作用する線形演算子 $\mathcal{L}$ は次で定義される：

$$q_{n+1}(x) = (\mathcal{L}q_n)(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int dy \exp\left(-\frac{(x - \sqrt{2}y)^2}{2}\right) q_n(\sqrt{2}x - y) \quad (4.13)$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int dz \exp(-z^2) q_n\left(z + \frac{x}{\sqrt{2}}\right) \quad (4.14)$$

$$= \sum_{m=3}^{\infty} c_m^{(n+1)} H_m(x) \quad (4.15)$$

$q_n(x)$ のエルミート多項式による展開係数を

$$\mathbf{c}^{(n)} = \begin{pmatrix} c_3^{(n)} \\ c_4^{(n)} \\ c_5^{(n)} \\ c_6^{(n)} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

のようにベクトルとして表せば、上式のくりこみ変換は

$$\mathbf{c}^{(n+1)} = R\mathbf{c}^{(n)} \quad (4.17)$$

として次の行列 R

$$R = \begin{pmatrix} 2^{-1/2} & 0 & * & 0 & \cdots \\ 0 & 2^{-1} & 0 & * & \cdots \\ 0 & 0 & 2^{-3/2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 2^{-5/2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

を用いて表現できる。単位行列 I を含めた行列の集合 $\{I, R, R^2, \dots\}$ は数学的には群をなすため^{*23}、これらの写像の集合を「くりこみ群」と呼ぶことにする。行列 R は上三角行列であり、その固有値は対角成分より

$$\lambda_m = 2^{1-\frac{m}{2}} < 1 \quad m = 3, 4, 5, \dots \quad (4.19)$$

^{*23} 厳密には半群をなす。

と求まる。くりこみ変換を n 回行くと

$$\mathbf{c}^{(n)} = R^n \mathbf{c}^{(0)} \quad (4.20)$$

というベクトルが得られる。そのノルムは、 $2^{-1/2} < \lambda < 1$ を満たすある定数 λ について

$$\left| \mathbf{c}^{(n)} \right| < \lambda^n \left| \mathbf{c}^{(0)} \right| \quad (4.21)$$

と指数的に減衰する^{*24}。つまり（摂動展開 (4.9) が有効な限り）どんな初期値 $\mathbf{c}^{(0)}$ から始めても、最終的には固定点であるゼロベクトルに「流れて」ゆく：

$$\mathbf{c}^{(n)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbf{0} \implies p_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} p_G \quad (4.22)$$

このようなくりこみ変換に伴う、分布関数中のパラメータあるいは分布そのものの変化を「くりこみ群の流れ（フロー）」と呼ぶ。

問題：くりこみ変換 $q_{n+1}(x) = (\mathcal{L}q_n)(x)$ により、展開係数 $\mathbf{c}^{(n)}$ が式 (4.18),(4.17) に従って変化することを確かめよ。

ヒント：必要であれば式 (3.74) 及び次の公式を用いよ：

$$H_n(x+y) = \sum_{l=0}^n {}_n C_l H_l(x) (2y)^{n-l} \quad (4.23)$$

$$x^n = \frac{n!}{2^n} \sum_{l=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{H_{n-2l}(x)}{l!(n-2l)!} \quad (4.24)$$

以上をまとめると

くりこみ変換 = 短いスケールの自由度の粗視化に伴う理論の変化を表す写像

であり

くりこみ群の方法 =

くりこみ変換のつなぎ合わせにより、長いスケールの普遍的振る舞いを明らかにする手法

となる。上の例では、隣り合う乱数の平均をとることで短いスケールの自由度を粗視化し、より長いスケールの自由度を記述する有効理論（この場合は確率分布そのもの）を、くりこみ変換 (4.7) により求めている。多数回のくりこみ変換をつなぎ合わせてくりこみ群の流れを追っていくと、固定点（上の例ではガウス分布）に流れ着く（式 (4.22) を参照）。このことは出発点の初期分布に依らず成立する。一般的な言葉で言い換えれば、

固定点 =

（短いスケールが従うミクロな理論の詳細によらず）長いスケールでの振る舞いを普遍的に記述する有効理論

^{*24} 証明は、例えば [Fannes et al., Commun. Math. Phys. 144, 443 (1992)] の Lemma 5.2 を参照。

といえる。このように微視的な詳細に依存しない普遍的な性質を浮き彫りに出来る点が、くりこみ群という理論手法の強みである。

さて、図示したくりこみ変換に伴う分布の変化は、前節で議論した拡散方程式における振る舞いに非常に似ている。実はこれは偶然ではなく、くりこみ群と拡散方程式には具体的な対応関係がある。次節ではこの点について紹介する。

4.2 くりこみ群・拡散方程式・機械学習

変数に相関がないと、くりこみ群の固定点がガウス分布で与えられることを前節で見た。これは中心極限定理の帰結であり、同じ結論は変数が独立でない場合でも（適切な意味で）相関が十分弱ければ成立する。しかし、変数が互いに強い相関を持つ場合には、一般に競合する色々な固定点が実現する。普遍的な理論手法であるくりこみ群は、そのような場合により真価を発揮する。

前節の議論を拡張するため、一般に相関を持つ変数 x_j を考え、それをフーリエ変換した波数表示の変数

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N x_j e^{ikja}, \quad 0 \leq k \leq \Lambda_0 \equiv \frac{2\pi}{a} \quad (4.25)$$

を導入する。ここで a は格子定数、 j は一次元格子サイトのラベルである。変数 ϕ_k は何らかの確率分布に従うが、簡単のため

$$P_{\Lambda_0} \equiv P_{\Lambda_0} \left[\{\phi_k\}_{0 \leq k \leq \Lambda_0} \right] \quad (4.26)$$

と略記する。ここで添字 Λ_0 は関数形を指定すると共に、そこに含まれる変数 ϕ_k の波数の最大値も表している。

理論物理学の典型的な問題は、次で定義される変数 ϕ_k の相関関数を計算することである：

$$\langle \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_n} \rangle_{\Lambda_0} \equiv \int \prod_{0 \leq k \leq \Lambda_0} d\phi_k \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_n} P_{\Lambda_0}. \quad (4.27)$$

特に、多くの問題では非常に長いスケールの現象、つまり低波数の自由度を記述する有効理論に興味がある^{*25}。この有効理論を知るためにくりこみ群の考え方が有用である。前節でも行った「短いスケールの粗視化」を行うために、ここでは波数表示の変数を

$$\phi = \begin{cases} \phi^< & |k| \leq \Lambda \\ \phi^> & |k| > \Lambda \end{cases} \quad (4.28)$$

という風に、適切なカットオフ運動量 Λ を設定し、短いスケール $\phi^>$ と長いスケール $\phi^<$ に分割する。「短いスケールの粗視化」により得られる理論の変化は、 $\phi^>$ を積分することで

$$P_{\Lambda}[\phi^<] = \int \prod_{\Lambda < k \leq \Lambda_0} d\phi_k P_{\Lambda_0} \quad (4.29)$$

と記述される。これが波数表示での「くりこみ変換」に相当する。定義より、 Λ 以下の波数モードの相関関数は全て不変に保たれていることに注意しよう。つまり有効理論 $P_{\Lambda}[\phi^<]$ に対する相関

^{*25} 例えば前節で考えた全変数の「平均値」の統計分布を考えることは、波数 $k=0$ の成分 $\phi_{k=0}$ の有効理論を考えることに他ならない。

関数を

$$\langle \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_n} \rangle_{\Lambda} \equiv \int \prod_{0 \leq k \leq \Lambda} d\phi_k \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_n} P_{\Lambda}, \quad |k_i| \leq \Lambda \quad (4.30)$$

と表せば

$$\langle \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_n} \rangle_{\Lambda} = \langle \phi_{k_1} \phi_{k_2} \cdots \phi_{k_n} \rangle_{\Lambda_0} \quad (4.31)$$

が常に成立する。つまり、くりこみ変換により短いスケール $\phi^>$ の自由度は積分されて「くりこまれた」が、長いスケール $\phi^<$ の振る舞いは影響を受けずにきちんと有効理論 $P_{\Lambda}[\phi^<]$ で記述が行えている。

さて、ここで定義したくりこみ変換を前節のように「小刻みに」行うことを考えよう。そのためには上で導入したカットオフ Λ を初期値 Λ_0 からスタートし、無限小のくりこみ変換を多数回繰り返すことで Λ を徐々に小さくしてゆけば良い。このように、くりこみ変換をつなぎ合わせて長いスケールの普遍的な性質を明らかにするプロセスが、くりこみ群に他ならない。「無限小のくりこみ変換」を記述するためには、確率分布に対する偏微分方程式を用いるが、実はこれが拡散方程式と深く関連している。

話を具体的にするため

$$P_{\Lambda_0} \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_k k^2 |\phi_k|^2 + V(\phi) \right] \quad (4.32)$$

という形で分布が表せると仮定しよう^{*26}。拡散方程式との関連を明らかにするため、次の「対数くりこみ群スケール」を導入しよう：

$$t = \ln \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \iff \Lambda(t) = \Lambda_0 e^{-t}, \quad t \geq 0 \quad (4.33)$$

つまり $t = 0$ から t が増えるに従い、指数的にカットオフ $\Lambda(t)$ が減少してゆく。後で見るように、変数 t は偏微分方程式の「時間」に対応する変数と解釈できる。上で行った「短いスケール $\phi^>$ を積分で除去する」操作を、ここではゆらぎを抑制する項を加えることで実現する：

$$P_{\Lambda(t)} \propto P_{\Lambda_0} e^{-\frac{1}{2} \sum_k M_k^2(t) |\phi_k|^2} \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_k (k^2 + M_k^2(t)) |\phi_k|^2 + V_{\Lambda(t)}(\phi) \right]. \quad (4.34)$$

ここで $M_k(t)$ は時間に依存しており、 M を非常に大きい定数として

$$M_k(t) = \begin{cases} 0 & |k| \ll \Lambda(t) \\ M & |k| \gg \Lambda(t) \end{cases}, \quad (4.35)$$

を満たす。つまり、カットオフ $\Lambda(t)$ に比べ長いスケールについては影響を及ぼさず、短いスケールについては $M_k(t)$ がゆらぎを強く抑制する項として働き

$$|\Delta \phi^>| \simeq \frac{1}{\sqrt{M}} \sim 0 \quad (4.36)$$

とみなせる。結果として短いスケールの自由度 $\phi^>$ が実効的に理論から除去される。

さてこのような除去を行った結果、式 (4.34) 中の項である $V_{\Lambda(t)}(\phi)$ が t とともに変化してゆく。くりこみ群がきちんと矛盾なく定義されるためには、長いスケール $\phi^<$ の性質が不変に保たれ

^{*26} 例えば理論物理学で出会う問題の多くは、典型的にはこのように書き下せる。

る必要があった。このために「うまく」 $V_{\Lambda(t)}(\phi)$ を変化させる必要がある。導出は省略するが、式 (4.31) を満足するという条件から、分布 $P_{\Lambda(t)}$ が従う偏微分方程式 (Polchinski 方程式) が

$$\frac{\partial P_{\Lambda(t)}}{\partial t} = \sum_k [\mu_k(t) \partial_{\phi_k} (\phi_k P_{\Lambda(t)}) + D_k(t) \partial_{\phi_k}^2 P_{\Lambda(t)}] \quad (4.37)$$

と求まる。ここで係数

$$\mu_k(t) = \frac{2M_k(t)\partial_t M_k(t)}{k^2 + M_k^2(t)}, \quad D_k(t) = \frac{M_k(t)\partial_t M_k(t)}{(k^2 + M_k^2(t))^2} \quad (4.38)$$

を定義した。これは前節でも登場した調和ポテンシャル中のブラウン運動を記述する方程式 (3.69) の拡張とみなせる。特に、 μ_k はブラウン運動の易動度とバネ定数の積に、 D_k は拡散定数に対応するが、今回はこれらが時間に依存して変化する。方程式 (4.37) の時刻 t に関する発展を考えることが、くりこみ群の流れを追うことに対応する。調和ポテンシャル中のブラウン運動でも扱ったように、定常分布はガウス分布で与えられた。今の場合、係数 μ_k, D_k は $M_k(t)$ に比例しているため、高波数モードからこの定常分布に近づいてゆく。つまり大雑把には確率分布が

$$P_{\Lambda(t)} \sim P[\phi^<] P_G[\phi^>], \quad (4.39)$$

と分離でき、高波数モードはガウス分布 P_G に従う：

$$P_G[\phi^>] \propto \exp \left[- \sum_{\Lambda(t) < k} \frac{D_k}{\mu_k} |\phi_k|^2 \right] \simeq \exp \left[- \frac{M^2}{2} \sum_{\Lambda(t) < k} |\phi_k|^2 \right]. \quad (4.40)$$

ただし、低波数モード $\phi^<$ の分布 $P[\phi^<]$ は長いスケールの振る舞いを記述する有効理論を与え、一般にガウス分布とは異なる非自明な理論である。くりこみ群の流れを長時間追ってゆくと、次第にこの有効理論が固定点へと流れてゆく。固定点の理論は、非常に長いスケールの（出発点の理論のミクロな詳細に依存しない）普遍的な振る舞いを捉えた理論となっている。以上が、素粒子物理学の場の量子論（標準模型）や、統計物理学の臨界現象において大きな成功を収めたくりこみ群と呼ばれる手法のアイデアである。

ではくりこみ群は理論物理という（特殊な？）分野でのみ有用な手法なのだろうか。実はくりこみ群の考え方自体は、上で見た通り非常に普遍的なアイデアに基づいており、その応用範囲は物理学にとどまらない。ここでは他分野への応用例として、機械学習の生成モデルとの関連を簡単に紹介する。

いま $L \times L$ ピクセルの二次元画像をデータとして考える。各ピクセルはそれぞれの色を表す数値を持っている。ピクセルの位置を i でラベルして、 i 番目のピクセルの色を表す数値を x_i とする^{*27}。一つの画像は $N = L^2$ 個の変数 $\{x_i\}_{i=1}^N$ で構成される。

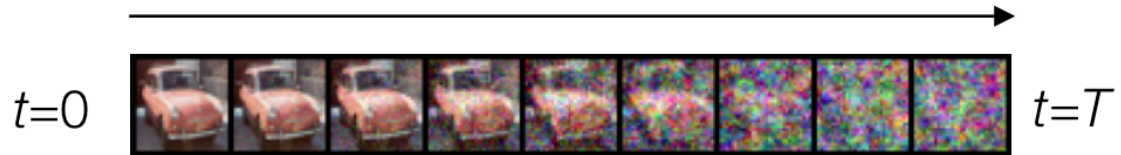
何らかの特徴的な画像を生成する確率分布 P_{Λ_0} を考えよう。くりこみ群を用いて方程式 (4.37) による分布の流れを考える。いま画像のサイズは有限であるため、波数に最小単位 $\delta k = 2\pi/L$ が

^{*27} 実際には、色を指定するには RGB それぞれの強度を示す三つの数値が必要である。

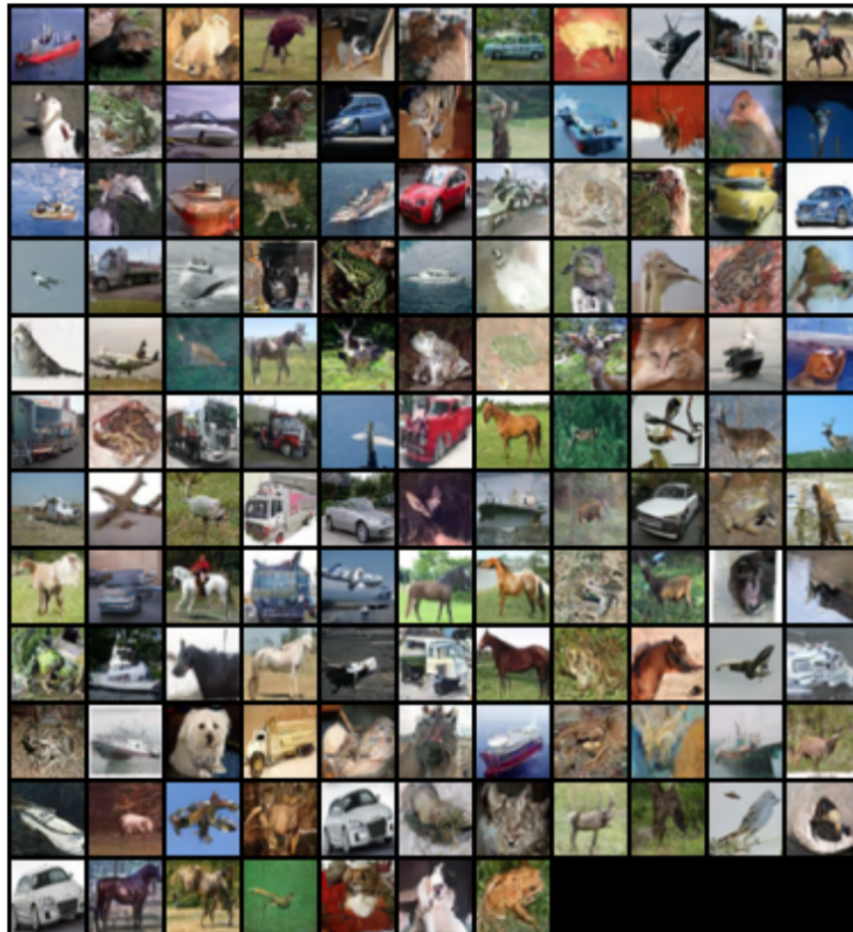
画像データセット

$$\phi = \text{[red car], [boat], [horse], ...}$$

順方向：くりこみ変換による粗視化



逆方向：「逆」くりこみ変換による画像の生成



「逆」くりこみ変換で生成された画像の例

図9 くりこみ群方程式による画像の粗視化と、その逆過程による画像の生成。(増木貫太氏 (東大) の提供)

存在する。従って条件 $\Lambda(t) < \delta k$ が満たされるような長時間領域を考えると、全ての波数モード ϕ_k がくりこまれガウス分布に流れてゆく。

乗り物や動物の画像を集めたデータセットを用い、このような変換をした結果を図9に示す。時刻 t が進むにつれて（つまりくりこみ変換を行うにつれて）画像の細かい構造から次第に「ぼやけて」ゆき、最終的にはノイズだけの画像が得られる。これはくりこみ群により、全ての自由度を除去しきった結果、各ピクセルの数値がガウス分布に従って揺らいでいるためである。

これでは、くりこみ変換で画像を壊しただけで特に面白くない。実は、このくりこみ群の流れを逆に辿ることで、画像の生成が可能となることが機械学習の分野で最近分かってきている。時間を遡るために、いわば「逆」くりこみ変換が必要となる。くりこみ変換は「高波数モードを除去する」という不可逆な操作を伴うため、逆変換は一見難しそうに思える。しかし上で得たくりこみ群方程式 (4.37) は、偏微分方程式であり、無限小のくりこみ変換を繋ぎ合わせたものであった。そしてそれぞれの無限小のステップは可逆なプロセスである。このことを利用して、くりこみ群の流れを「逆流」することができる。

話を具体的にするため、区間 $t \in [0, T]$ の順方向の流れを考え、それを逆に辿る方向の時間を $\tau = T - t$ とする。逆に辿る際の確率分布を

$$P_\tau = P_{\Lambda(T-t)} \quad (4.41)$$

と表す。 $\partial_\tau = -\partial_t$ より、方程式 (4.37) を τ を用いて書くと

$$\frac{\partial P_\tau}{\partial \tau} = - \sum_k [\mu_k(\tau) \partial_{\phi_k} (\phi_k P_\tau) + D_k(\tau) \partial_{\phi_k}^2 P_\tau] \quad (4.42)$$

となる。これを拡散方程式として解釈するには、拡散定数が正となるように書き直す必要がある。これは

$$\frac{\partial P_\tau}{\partial \tau} = \sum_k [-\partial_{\phi_k} (f_k(\tau, \phi) P_\tau) + D_k(\tau) \partial_{\phi_k}^2 P_\tau] \quad (4.43)$$

とすれば行える。ここでブラウン粒子にかかる力に対応する項 f_k は

$$f_k(\tau, \phi) = \mu_k(\tau) \phi_k + 2D_k(\tau) \partial_{\phi_k} \ln P_\tau \quad (4.44)$$

と定義されている。調和ポテンシャルによる力 $\mu_k(\tau) \phi_k$ に加えて、 $2D_k(\tau) \partial_{\phi_k} \ln P_\tau$ というポテンシャル力が存在する。後者は $\partial_{\phi_k} \ln P_\tau$ を通じて、分布自身に依存することに注意しよう。ここで登場した量 $\partial_{\phi_k} \ln P_\tau$ は機械学習の分野ではスコアと呼ばれる。

詳細に立ち入る時間はないが、このスコアをニューラルネットワークにより学習することができる。具体的には、画像データをくりこみ変換で壊してゆく「順方向」を数値的にシミュレートし、その様子を学習することでスコアが推定できる。訓練後のスコアを式 (4.43) に代入すればくりこみ群の流れの「逆過程」を再現できる。これによりノイズだけの画像から、学習データに似た構造を有した画像が生成される（図9）。いわば「逆くりこみ変換による生成 AI」が実現できる。このように、普遍的かつ強力な理論手法であるくりこみ群の考え方は、理論物理学にとどまらず様々な分野に波及している。

5 波動方程式

ここまで拡散方程式

$$\partial_t u(x, t) = D \partial_x^2 u(x, t)$$

を中心に議論してきた。これは時間の一階微分と、空間の二階微分を関係付ける偏微分方程式であった。この左辺を一階ではなく二階の時間微分とすると、バイオリンの弦の振動や、音波・水面波・電磁波などの伝搬を記述する波動方程式

$$\partial_t^2 u(x, t) = v^2 \partial_x^2 u(x, t)$$

が得られる。以下ではこの方程式について掘り下げてみよう。

5.1 方程式の意味・定性的理解

波動方程式は、例えば弦の振動における張力の釣り合いを考えることで導出できる（図10）。いま弦の微小区間 $[x, x + \Delta x]$ を考える。この区間の弦の上下方向の運動方程式は

$$\rho \Delta x \partial_t^2 u(x, t) = T \sin(\theta(x + \Delta x, t)) - T \sin(\theta(x, t)) \quad (5.1)$$

で与えられる。ここで ρ は線密度、 T は張力、 θ は弦の水平方向に対する角度であり、弦の上下方向の変位 $u(x, t)$ と

$$\tan(\theta(x, t)) = \partial_x u(x, t) \quad (5.2)$$

により関係づく。角度 θ が十分小さいとすれば、Taylor 展開することで

$$\rho \Delta x \partial_t^2 u(x, t) = T [\partial_x u(x + \Delta x, t) - \partial_x u(x, t)] \quad (5.3)$$

となる。

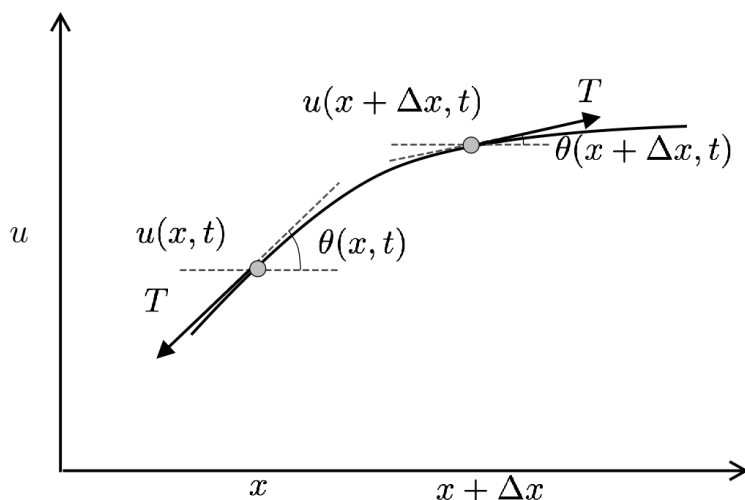


図10 波動方程式の導出。

$\Delta x \rightarrow 0$ とすれば波動方程式

$$\partial_t^2 u(x, t) = v^2 \partial_x^2 u(x, t) \quad (5.4)$$

を得る。ここで v は速さの次元を持つ物理量で

$$v = \sqrt{\frac{T}{\rho}} > 0 \quad (5.5)$$

と定義される。

波動方程式の意味を考えよう。まず右辺が $\partial_x^2 u(x, t) > 0$ を満たす（下に凸）ならば、弦が上向きに加速度を持つ。従って、凸凹を解消する方向に弦は動き出す。前回と違うのは、左辺が時間の二階微分であるため、速度ではなく加速度を引き起こす点である。凹凸が急なほど弦の時間変化は激しくなるが、加速度の違いとして現れるため、凹凸が速度変化に直結していた拡散方程式とは異なり撃力的な変化は生じない。つまり弦は慣性を持って運動する。また二階微分であるため、初期条件を定めるには、位置と速度の二つを指定する必要がある。

波動方程式を解くには

$$(\partial_t - v\partial_x)(\partial_t + v\partial_x)u(x, t) = 0 \quad (5.6)$$

と分解できることに気づけば良い。つまり

$$(\partial_t - v\partial_x)u(x, t) = 0 \quad \text{または} \quad (\partial_t + v\partial_x)u(x, t) = 0 \quad (5.7)$$

という解を見つければ良い。これは変数 x, t について、 $x + vt$ あるいは $x - vt$ という形を通してのみ依存するような関数として簡単に構成できる：

$$u(x, t) = \phi_R(x - vt) + \phi_L(x + vt). \quad (5.8)$$

ここで ϕ_R は右向きに伝搬し、 ϕ_L は左向きに伝搬する解である。拡散方程式との顕著な違いは、右向き・左向きそれぞれの成分が波形を保ったまま（つまり形を一切崩すことなく）一定速度 v で移動する点である。

さて波が形を保つ理由をもう少し掘り下げるために、Fourier 変換を行い、平面波解の重ね合わせとして表してみよう：

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx - i\omega(k)t} \quad (5.9)$$

波動方程式に代入すれば、展開係数 $A(k)$ は

$$-\omega^2(k)A(k) = -v^2 k^2 A(k) \quad (5.10)$$

を満たす。よって振動数は波数に線形に依存する^{*28}：

$$\omega(k) = vk. \quad (5.11)$$

^{*28} $\omega(k) = -vk$ も解であり、これは左に伝わる進行波解に対応する。ここでは簡単のため右進行波について考えている。

さて $\cos(kx - \omega(k)t) = \cos(k(x - vt))$ という形の進行波解を考えると、位相が一定となる点は

$$kx - \omega(k)t = \text{一定} \rightarrow x = \frac{\omega(k)}{k}t + \text{定数} \quad (5.12)$$

を満たし、速度 $v = \omega(k)/k$ で移動する。これを一般に位相速度と呼ぶ。波動方程式では v が k に依存しないため、全ての波数 k について位相速度が一定である。つまり式 (5.9) に含まれる全ての進行波成分が同じ速度で移動する。これが波形が崩れずに波が伝わる理由である。

5.2 Schrödinger 方程式の非拡散解

さて、最後に再び自由粒子の Schrödinger 方程式

$$i\partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t), \quad -\infty < x < \infty \quad (5.13)$$

を考えよう。前節と同様に、Fourier 変換することで波動関数を平面波解の重ね合わせで表す：

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k) e^{ikx - i\omega(k)t}, \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (5.14)$$

この場合、位相速度は

$$v(k) = \frac{\omega(k)}{k} \propto k \quad (5.15)$$

であり、波動方程式とは異なり波数 k に依存してそれぞれの平面波解が異なる速度で伝搬する。これが前節で波動関数の時間発展を考えた際に、波形が保たれず、徐々に広がり崩れた理由である。

では Schrödinger 方程式 (5.13) を考える限り、波形を保って伝搬する「非拡散解」は本当に実現できないのだろうか。上の議論を踏まえると、平面波解の重ね合わせとして波動関数を表す限り、このような解を構成するのは無理そうである。しかし、考える関数のクラスを広げると、実は Schrödinger 方程式 (5.13) も波形を保つ非拡散解を持つことが示せる。

このことを見るため、加速度の次元を持つ量

$$a = \left[\frac{\text{長さ}}{\text{時間}^2} \right] \quad (5.16)$$

を導入し、位置と時間を無次元化するのが便利である：

$$y = \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} x, \quad \tau = \left(\frac{4ma^2}{\hbar} \right)^{\frac{1}{3}} t. \quad (5.17)$$

無次元化した変数 y, τ により、Schrödinger 方程式 (5.13) は

$$i\partial_\tau \psi(y, \tau) = -\frac{1}{2} \partial_y^2 \psi(y, \tau) \quad (5.18)$$

となる。これが次の非拡散解を持つ [M. V. Berry and N. L. Balazs, Am. J. Phys. 47, 264 (1979)]：

$$\psi(y, \tau) = \text{Ai} \left(y - \left(\frac{\tau}{2} \right)^2 \right) \exp \left[i \left(\frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12} \right) \right]. \quad (5.19)$$

ここで Ai はエアリー関数と呼ばれ、次式で定義される

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \cos \left(\frac{k^3}{3} + kz \right). \quad (5.20)$$

$\text{Ai}(z)$ は次の常微分方程式を満たす：

$$d_z^2 \text{Ai}(z) - z \text{Ai}(z) = 0 \quad z \in \mathbb{R}. \quad (5.21)$$

式 (5.19) の後半の位相因子 $e^{i\left(\frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12}\right)}$ の物理的意味は後述する。式 (5.19) が確かに Schrödinger 方程式を満たすことは、時間の一階微分

$$i\partial_\tau \psi = \left[-\frac{i\tau}{2} \text{Ai}' - \left(\frac{y}{2} - \frac{\tau^2}{4} \right) \text{Ai} \right] e^{i\left(\frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12}\right)} \quad (5.22)$$

と空間の一階微分

$$\partial_y \psi = \left(\text{Ai}' + \frac{i\tau}{2} \right) e^{i\left(\frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12}\right)} \quad (5.23)$$

および二階微分

$$\partial_y^2 \psi = \left(\text{Ai}'' + i\tau \text{Ai}' - \frac{\tau^2}{4} \text{Ai} \right) e^{i\left(\frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12}\right)} \quad (5.24)$$

$$= \left(y \text{Ai} + i\tau \text{Ai}' - \frac{\tau^2}{2} \text{Ai} \right) e^{i\left(\frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12}\right)} \quad (5.25)$$

を計算し、見比べることで確かめられる。

解 (5.19) の二乗を計算すると

$$|\psi(y, \tau)|^2 = \text{Ai}^2 \left(y - \left(\frac{\tau}{2} \right)^2 \right) \quad (5.26)$$

となっており、確かに波動関数の絶対値の波形は一定に保たれる。波動関数の引数が一定という条件は

$$y - \left(\frac{\tau}{2} \right)^2 = \text{一定} \iff x = \frac{at^2}{2} + \text{定数}. \quad (5.27)$$

と表せるため、解の絶対値は、波形を保ったまま一定加速度で移動していることがわかる (図11)。

鋭い人は、このことが量子力学で学んだエーレンフェストの定理に矛盾するのではないか、という疑問を抱くだろう。復習しておく、エーレンフェストの定理とは、ポテンシャル $V(x)$ 中を運動する質量 m の量子粒子に関する期待値 $\langle \dots \rangle$ について

$$m d_t^2 \langle x \rangle = \langle -\partial_x V \rangle \quad (5.28)$$

という、古典力学の運動方程式を模した式が成立するというものであった。今の場合、自由粒子を考えているため $V = 0$ であり右辺はゼロである。従ってエーレンフェストの定理によれば、波束の中心 $\langle x \rangle$ は等速直線運動をするはずである。しかし、上の非拡散解は等加速度運動をしており

$$m d_t^2 \langle x \rangle \stackrel{?}{=} a \quad (5.29)$$

という式が一見成り立っていそうである。このことがエーレンフェストの定理と矛盾しているように見える。一体議論のどこに落とし穴があるのだろうか？

問題：非拡散解 (5.19) が、なぜエーレンフェストの定理に反しているように見えるか説明せよ。

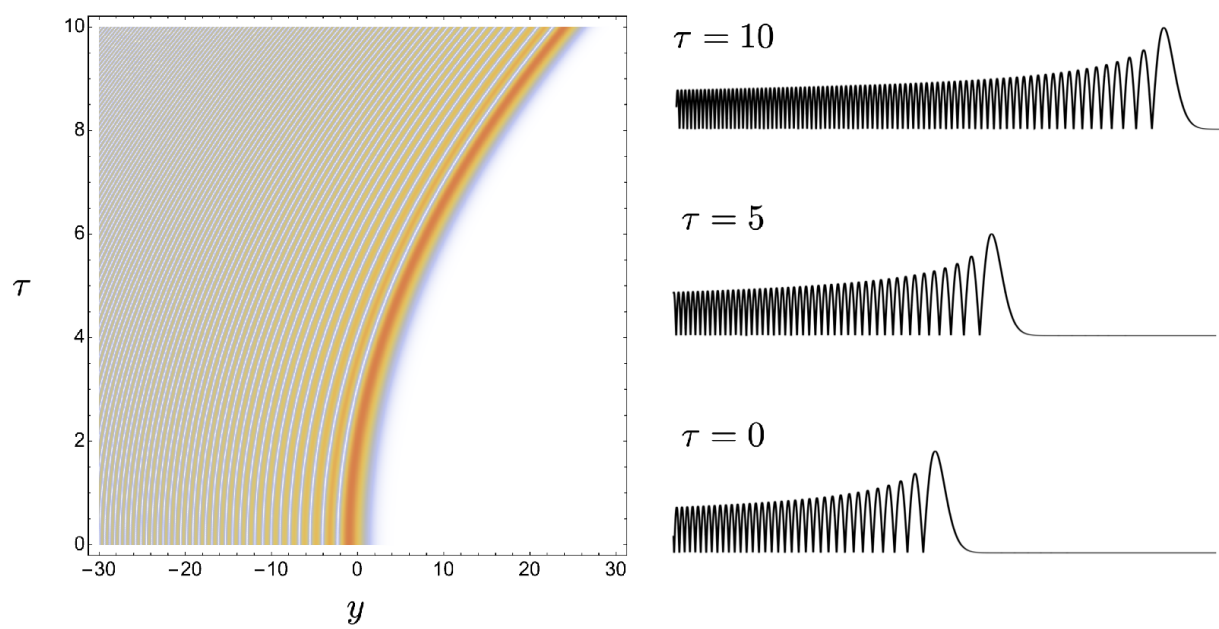


図11 Schrödinger 方程式の非拡散解。

非拡散解 (5.19) の意味について深掘りするため、次のような座標系に移動しよう：

$$x' = x - \frac{at^2}{2}, \quad t' = t. \quad (5.30)$$

無次元化した変数

$$y' = \left(\frac{2m^2 a}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} x', \quad \tau' = \left(\frac{4ma^2}{\hbar} \right)^{\frac{1}{3}} t' \quad (5.31)$$

では、この座標系は

$$y' = y - \left(\frac{\tau}{2} \right)^2, \quad \tau' = \tau \quad (5.32)$$

と表せる。これは非拡散解 (5.19) と共に移動する「共動系」に他ならない。等価原理によれば、この共動系に移動することで生じる慣性力は、重力と区別がつかない。つまり共動系では、上の波動関数は「重力」ポテンシャルのもとでの定常的な固有解となっているはずである。すなわち共動系での Schrödinger 方程式は重力ポテンシャルを $V(x') = max'$ として

$$i\hbar \partial_{t'} \psi'(x', t') = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{x'}^2 \psi'(x', t') + V(x') \psi'(x', t'), \quad (5.33)$$

と書けるべきである。その固有解

$$\psi'(x', t') = \psi'(x') e^{-iEt'/\hbar} \quad (5.34)$$

と、もとの座標系での非拡散解 (5.19) は同じ量子状態に対応するため、位相を別にして一致しなければならない*29：

$$\psi'(x', t') = e^{-i\theta(x,t)} \psi(x, t), \quad \theta(x, t) \in \mathbb{R}. \quad (5.35)$$

簡単のため $E = 0$ の固有解を考えると式 (5.21) より、共動系での固有状態は $\psi'(x', t') = \text{Ai}(y')$ と求まり、従って関係式 (5.35) は

$$\text{Ai}(y') = e^{-i\theta(x,t)} \psi(x, t) \quad (5.36)$$

となる。非拡散解 (5.19) と比べれば、位相因子 $\theta(x, t)$ は

$$\theta(x, t) = \frac{mat}{\hbar} \left(x - \frac{at^2}{3} \right) = \frac{y\tau}{2} - \frac{\tau^3}{12} \quad (5.37)$$

と決定される。つまり非拡散解 (5.19) に現れた奇妙な位相因子は、Schrödinger 方程式の座標変換のもとでの不変性と等価原理の要請から生じる寄与と解釈される。

さて、残念ながら非拡散解 (5.19) は、実際には量子力学の固有状態としては存在できない。しかし、これに似た有限の寿命を持った状態であれば近似的に実現可能である。これは例えば方程式 (5.18) を模した古典光学系を用いた実験において実現されている [Siviloglou et al., Phys. Rev. Lett. 99, 213901 (2007)]。

*29 観測量は量子状態に対する期待値として定義されるため、二つの量子状態が同じ確率密度 $|\psi(x, t)|^2 = |\psi'(x', t')|^2$ を持てば同じ状態を表すと考える。別の言い方をすると、確率密度が同一であれば位相因子は異なっても同じ状態と考える。

問題：上の議論を一般の座標変換

$$x' = x - \xi(t), \quad t' = t \quad (5.38)$$

に拡張する。変換後の座標系における波動関数

$$\psi'(x', t') = e^{-i\theta(x, t)} \psi(x, t), \quad \theta(x, t) \in \mathbb{R} \quad (5.39)$$

で生じる位相因子 $\theta(x, t)$ の一般的な表式を求めよ。特に、 $\xi = at^2/2$ の場合には式 (5.37) が再現されることを確かめよ。

ヒント：Schrödinger 方程式の座標変換のもとでの不変性と等価原理より、以下の方程式を変換前後の波動関数がそれぞれ満たすことが要請される：

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x, t) \quad (5.40)$$

$$i\hbar\partial_{t'}\psi'(x', t') = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{x'}^2\psi'(x', t') + V(x')\psi'(x', t'), \quad (5.41)$$

$$V(x') = md_t^2\xi(t)x'. \quad (5.42)$$

このことから $\theta(x, t)$ が満たすべき微分方程式を求めてみよう。

謝辞

講義ノートを準備するにあたって有益なフィードバックを下さった小森健太郎氏、龔宗平氏、星野真宏氏に感謝します。