数理解析研究所講究録
第3巻 1965年 27-40

WKB法の精密化

静岡大文理物理　　森口治生

§1　はしがき

§2　普通の点とWentzel Brillouin の量子条件

§3　孤立したTurning point と接続公式

§4　一様近似

§5　一様近似の精密化

5.1)　変形WKB変換による精密化

5.2)　Miller-Goodの方程式による精密化

§6　あとがき

§1　はしがき

物理の問題で今までに使われた，又は使われる可能性のあるWKB法の高次近似についてのべるのがこれからの話題である。

高次近似について語るには第一近似がわかつていなければならないわけであるが，こゝでいうWKB法の第一近似とは，標準形の二階線形常微分方程式

$$y''+h^2 f(x)y=0 \tag{1}$$

の近似解として，turning point を除いて成立つ漸近解

$$y\sim\frac{1}{\sqrt[4]{f}}\exp\left(\pm ih\int\sqrt{f}\,dx\right) \tag{2}$$

を用いること，又この近似解と同じ程度の精度をもつturning pointを含む領域に於ける漸近解，(2)の turning point のまわりでの接続関係を与える接続公式，それ等から得られる量子条件等の関係式等を用いることをさすことにしよう。

この方式は非常に簡単であるが，数値的に割合正しい結果が得られる — 又はそうであると信じられている — ために物理の各分野で色々な形で用いられている。所がこの高次近似はそれが実際に物理の問題に応用されて新知識を加えたと云う例があまり多くない。しかし必要ならば高次近似もいつでも出せるし，その結果に対する誤差の評価も出来るという保証が出来るならば，第一近似だけを使う時にも，又それを見るものにも大いに安心感を与えるであろう。この意味で物理の雑誌にあらわれたものを中心として，高次近似の求め方，その応用の二，三を報告して話題の材料としたい。

§2　普通の点とWentzel—Brillouinの量子条件

転移点（Turning point）を含まない領域では (1)の漸近解は，機械的に幾らでも求めることが出来る。例えば

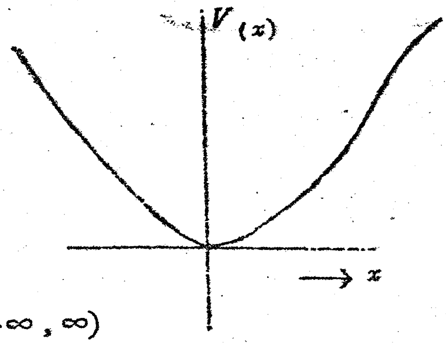
$$y=e^{hu(x)} \tag{3}$$

$$u(x)=\Sigma h^{-n}u_n(x) \tag{4}$$

とおいてu_0，u_1，……を逐次に求めればよい。従つて高次近似の問題は転移点の処理だけ

である。

所がWentzel[1), Brillouin[2)はこれから，転移点の問題にふれずにいきなり量子条件を持ち出している。すなわち



$$hf(x)=\lambda-V(x)$$

で$V(x)$が極小点を一つもち$x\to\pm\infty$で十分大きくなり

$$x\to\pm\infty \text{ で } y\to 0\text{，或は } y\in L_2(-\infty,\infty)$$

等の境界条件に対して離散的な固有値λ_0，λ_1，λ_2，…… を持つとする。この時下から$n+1$番目の固有値λ_nに属する固有関数は二つの転移点x_1，x_2の間でn箇の0点をもつ。従つて

$$u=\int^{v}v(x)\,dx$$

とするとこれらの0点全部を含む閉曲線にそつて

$$\oint v(x)\,dx=2n\pi i \qquad n=0,1,\cdots \tag{5}$$

が成立する。これに(4)のu_0，u_1を用いx_1，x_2を両端とする線分のまわりの閉曲線をとると，普通のWKB量子条件

$$h\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{f(x)}\,dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \tag{6}$$

が得られる。

この論法が正しければ，(6)はいくらでも高い近似に高められるわけであり，例えばDunham[3)は高次近似の実例計算を行つている。

この論法はTitchmarsh の批判[4)をまつまでもなくいささか問題であるが，結果は条件つきでTitchmarsh も認めている。（λが大きい時の漸近値として。）これはWKB法の高次近似に対する最初の成果であるといえよう。

なおLanger[5)は確定特異点（$x=0$としておく）も変換

$$x=e^{\xi}\cdots\cdots \tag{7}$$

$$y=e^{\xi/2}\eta(\xi)\cdots\cdots \tag{8}$$

$$\frac{d^2Y}{dS^2}+h^2 g(S)\,Y=0 \qquad (S=S(x)) \tag{15}$$

で近似することにきめよう。それには

$$y(x)=\left(\frac{dS}{dx}\right)^{-1/2} Y(S) \tag{16}$$

とおいてSとxの関係をしらべればよい。するとSは

$$\frac{1}{h^2}\left(\frac{dS}{dx}\right)^{1/2}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{dS}{dx}\right)^{-1/2}-\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 g(S)+f(x)=0 \tag{17}$$

を満足しなければならない。第一項を無視すれば

$$\int^S\sqrt{g(\tau)}\,d\tau=\int^x\sqrt{f(\xi)}\,d\xi \tag{18}$$

が与えられる。$g(\tau)$の形と積分の下端が適当にえらばれるならば(dS/dx)は正則になり，例えば二つの転移点をもつ方程式に対しても一様近似が与えられる。勿論(11)はこの特別な場合になる。

以上のような方式で彼等はトンネル効果や§2の形の固有値問題をとりあつかつたが，これは固有関数に対する一様近似解を与えた最初のものであると思われる。

§5　一様近似の精密化

前節のような一様近次解に対して高次近似を求めれば§3のような二度手間がいらなくなる。必要な場合には得られた解を更に漸近展開して初等関数を使う表示に改めることも出来るわけである。

Langer, Olver等の数学的な研究では，高次近似をhの逆べきの漸近級数の形で求めたものが多い。しかし応用上重要な境界値問題の場合等では今井の解のような形の方が使いやすい。そこでこゝではこの形の高次近似を求める方法に限ることにする。

たゞ一様近似の基礎になる(13)或は(13′)で$Q(t)$，$q(\tau)$の内$t=0$の近傍の形を入れてやれば，特に学力の大きな増加なしに$t\sim 0$でより精密な解が得られ，接続公式と併用して第一近似と第二近似の中間の精度の近似解が与えられることがあることを注意しておこう。又(13)を基礎にして§3の方法で高次近似を得れば，§3よりも能率のよい方法になるわけである。今井の解はいわばこの二つの考え方の中間のものと考えられよう。たゞ今井のような解

を見つけるには，相当なヒラメキが必要で一般向きな方法ではなさそうである。

さてこのような方針をたてれば注目されるのは（17），(18) である。そこでこの二つにもとづく逐次近似解法をのべてみよう。

（筆者は文献8）の存在を知らずに§5.1の解法を求め，一応の結果が出た所でこれを見たのであるが，不敏にして高次近似の可能性に気づかず，単に第一近似を見つける一つの処方としてしか評価しなかつた。文献9）で8）を単に変換（18）を二つの転移点に適用した例としたのは，後から考えればやゝ不当であつた。たゞし私信によればGood自身も筆者が指摘するまで，高次近似の可能性に気づいていなかつたようである。）

§5.1　変形WKB変換による精密化

こゝではもとの方程式を

$$y'' + (h^2 f(x) + f_1(x))y = 0 \tag{1'}$$

としておこう。これは二位の転移点を取扱う時第二近似以上で f_1＝const なる場合に相当するものを取扱うことになることを考えたためである。一位の転移点等の時にはこのようにわける必要はない。これに変換（18）

$$\int_{\beta_1}^{t_1} \sqrt{g_1(\tau)}\, d\tau = \int_{\alpha_1}^{x} \sqrt{f(\xi)}\, d\xi \tag{18'}$$

及び $\quad y = \{\phi_1(t_1)\}^{-1/4} y_1(t_1) \qquad (19)$

$$\phi_1(t_1) = f(x)/g_1(t_1) \tag{20}$$

をほどこせば

$$\frac{d^2 y_1}{d t_1^2} + (h^2 g_1(t_1) - Q_1(t_1))y_1 = 0 \tag{21}$$

$$Q_1(t_1) = \phi_1^{-1/4} \frac{d^2 \phi_1^{1/4}}{d t_1^2} - \frac{f_1}{\phi_1} \tag{22}$$

が得られる。g_1＝const とすればWKB変換に外ならず $f_1=0$ の時 Q_1 を無視すれば§1の第一近似になる。そこでこれを変形WKB変換とよんでおこう。

$f(x)$ と $g_1(t_1)$ の0点を対応させ（位数共に）ϕ_1，ϕ_1^{-1} を有界にすれば Q_1 を

無視することによつて一様な第一近似が得られる。

第二近似に進むには[9]

$$g_2(\tau)=g_1(\tau)+O(h^{-2}) \tag{23}$$

なる g_2 を用いて同形の変換

$$\int_{\beta_2}^{t_2}\sqrt{g_2(\tau)}\,d\tau=\int_{\alpha_2}^{t_1}\sqrt{g_1(\tau)-\frac{1}{h^2}Q_1(\tau)}\,d\tau \tag{24}$$

$$y_1=\{\phi_2(t_2)\}^{-1/4}y_2(t_2) \tag{25}$$

$$\phi_2(t_2)=\left(g_1(t_1)-\frac{1}{h^2}Q_1(t_1)\right)\Big/g_2(t_2) \tag{26}$$

をくりかえせばよい。この場合に $h^2g_1(t_1)-Q_1(t_1)$ の0点と $g_2(t_2)$ の0点を対応させ

$$\phi_2=\mathrm{const}+O(h^{-2}) \tag{27}$$

とすることが出来れば，交換された方程式

$$\frac{d^2y_2}{dt_2^2}+(h^2g_2(t_2)-Q_2(t_2))y_2=0 \tag{28}$$

で Q_2 は $O(h^{-2})$ となり，$Q_2(t_2)$ を無視して第二近似が得られる。第1近似の時と同じように常数項は変換の外に取り出しておくことが出来るから，常数項だけは別に扱つてもよい。

このようにして同様な操作を繰返せば任意の精度の高次近似が与えられることになる。この方法によれば，同形の転移点，特異点を対応させることが出来れば，近似方程式が与えられることになる。

たゞ3位以上の転移点を含む時には特別な場合を除いては適当な近似方程式がない。

以下簡単な例題をあげて見よう。

1) 一位の転移点

$$f(x)=ax+bx^2+\cdots \qquad (f_1=0\text{としてよい})$$

この時には $g_1(\tau)=a\tau$ を取ればよく，

$$\frac{d^2y_1}{dt_1^2}+(h^2at_1-Q_1(t_1))=0$$

が得られる。第二近似は

$$\int_0^{t_2}\sqrt{a\tau}\,d\tau=\int_{\delta_1}^{t_1}(a t_1-Q_1(t_1)/h^2)^{1/2}dt_1$$

(δ_1は$a t_1-Q_1(t_1)/h^2$の0点で

$$\delta_1=\frac{1}{h^2}Q_1(0)+\frac{1}{2h^4}\left(\frac{d\{Q_1(0)\}^2}{d\delta}\right)_{\delta=0}+\cdots+\frac{1}{m!h^{2m}}\left(\frac{d^{m-1}\{Q_1(\delta)\}^m}{d\delta^{m-0}}\right)_{\delta=0}$$

$+\cdots$)

をとればよい。第三近似以上はこれと同様である。尚各段階で$Q_n(t_n)$のTaylor 展開の1次の項まで取れば，転移点近傍での解がやゝ精密化される。又この第二近似は今井の近似解に対応するものである。

ii) 2位の転移点

$$f(x)=ax^2+bx^3+\cdots \qquad (f_1=0)$$

第一近似は$g(\tau)=a\tau^2$

$$\int_0^{t_1}\sqrt{a\tau^2}\,d\tau=\int_0^x\sqrt{f(x)}\,dx$$

によつて

$$\frac{d^2y_1}{dt_1^2}+(h^2a\ t_1^2-Q_1(t_1))y_1=0$$

から得られる。第二近似に進むためには

$$2h^2a\delta_1-Q_1'(\delta_1)=0$$

なる点δ_1をとつて上式を

$$\frac{d^2y_1}{dt_1^2}+(Q_1(\delta_1)+h^2a(t_1-\delta_1)^2-q_1(t_1))y_1=0$$

と書いておき第二の変換

$$\int_0^{t_2}\sqrt{a\tau^2}\,d\tau=\int_{\delta_1}^{t_1}\sqrt{a(t_1-\delta_1)-\frac{q_1(t_1)}{h^2}}\,dt_1$$

を用いればよい。或は左辺のaの代りに右辺のq_1の内$(t_1-\delta_1)^2$の項までとつた時の係数を用いてもよい。この時$\phi_2=\mathrm{const}+O(h^{-2})$であることは容易に確められる。

第二近似の基礎になる方程式は

$$\frac{d^2 y_2}{d t_2^2}+\left(\frac{Q_1(\delta_1)}{\phi_2}+h^2 a t_2^2-Q_2(t_2)\right) y_2=0$$

であるが$\phi_2=\mathrm{const}+O(h^{-2})$であるから第二近似方程式としては例えば

$$\frac{d^2 y_2}{d t_2^2}+\left(\frac{Q_1(\delta_1)}{\phi_2(0)}+h^2 a t_2^2\right) y_2=0$$

をとることが出来る。第三近似以上はこれと全く同じ手続でよい。

尚第一近似方程式を作る時Q_1のTaylor 展開の2次の項まで取り入れることが出来る。このようにするとこれは$f(x)$のx^6の項まで（厳密にではないが）考えに入れた結果になる。橋本[10]が「一挙に高い近似を求めて」与えた結果がx^4の項までであることを考えると変形WKB変換の見通しのよさが理解されよう。しかもこの解は「転移点補正」をほどこした第一近似であつて，第二近似ですらないのである。

この外1位の転移点二つの場合，係数の各周期毎に2位の転移点が一つ，又は各周期毎に1位の転移点を二つもつHill方程式の場合が9）にとりあげてある。11）は確定特異点と1位の転移点がある場合の応用例である。

§ 5.2　Miller-Good の方程式による精密化

前述の方法と同じ性格の解を与える解法として次に（17)をとりあげよう。文献8）では「Sをh^{-2}のべきに展開して」となつているが，1位の転移点の場合以外にはそれは少し無理である。前述のように1位の転移点がたゞ一つの場合を除いて近似方程式の係数$g(S)$は近似をあげる時に形を変えなければならないのである。

そこで（17)を

$$\left(\frac{dS}{dx}\right)^2=\frac{f(x)+\frac{1}{h^2}\frac{T''}{T}}{g(S)}, \quad T=\left(\frac{dS}{dx}\right)^{-1/2} \tag{29}$$

とおいて，先づ

$$\left(\frac{dS_1}{dx}\right)^2=\frac{f(x)}{g_1(S_1)} \tag{30}$$

によつて，$g_1(S_1)$と$f(x)$の0点が対応するようにg_1，S_1を定める。これは前節の第一近似と同じである。これから

$$T_1(x) = \left(\frac{dS_1}{dx}\right)^{-1/2} \tag{31}$$

を定め第二近似は

$$\left(\frac{dS_2}{dx}\right)^2 = \frac{f(x) + \frac{1}{h^2}\frac{T_1''}{T_1}}{g_2(S_2)} \tag{32}$$

によつて第一近似と同じようにg_2を選びS_2を定めればよい。2位の転移点のあつかいに前節のような方法はとれないかも知れないが，2位の転移点は1位の転移点が二つの場合と同じ方法も取れるから実質的には前節の方法と変らない。こちらの方式の大きな利点は近似解の高次近似に

$$\phi_1 \phi_2 \cdots \phi_n$$

と云つた係数がつかずT_n (x) だけですむことである。この近似の性格を見るために

$$y(x) = T_n(x) Y_n [S_n(x)] \tag{33}$$

$$T_n(x) = \{S_n'(x)\}^{-1/2} \tag{34}$$

$$\{S_n'(x)\}^2 = \left(f(x) + \frac{1}{h^2}\frac{T_{n-1}''}{T_{n-1}}\right) \bigg/ g_n(S_n) \tag{35}$$

とおくとY_n $[S_n]$ が満足すべき方程式は

$$\frac{d^2 Y_n}{dS_n^2} + h^2 g_n(S_n) \frac{f(x) + \frac{1}{h^2}\frac{T_n''}{T_n}}{f(x) + \frac{1}{h^2}\frac{T_{n-1}''}{T_{n-1}}} Y_n = 0 \tag{36}$$

となり，これを

$$\frac{d^2 Y_n}{dS_n^2} + h^2 g_n(S_n) Y_n = 0 \tag{37}$$

で近似することになつている。従つて精度の点では前の方法と全く同じ性質のものである。

例として二つの転移点（1位）をもつ場合をとりあつかつて見ると，

f (x) の0点をξ，ηとして第一近似は$g_1(S_1) = K_1(1 - S_1^2)$ととればよい。

K_1は

$$\int_{-1}^{1} \sqrt{K_1 (1 - S_1^2)}\, dS_1 = \int_{\xi}^{\eta} \sqrt{f(x)}\, dx$$

によつて定め

$$\int_{-1}^{S_1} \sqrt{K_1 (1 - S)^2}\, dS = \int_{\xi}^{x} \sqrt{f(\xi)}\, d\xi$$

とすれば$T_1(x)$は正則になり第一近似は

$$\frac{d^2Y_1}{dS_1^2}+K_1h^2(1-S_1^2)Y_1=0$$

で与えられる。第二近似は

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{K_2(1-S_2^2)}\,dS_2=\int_{\xi_1}^{\eta_1}\sqrt{f(x)+\frac{1}{h^2}\frac{T_1''}{T_1}}\,dx$$

(ξ_1, η_1は integrand の0点)

なるK_2を用いて同形の方程式で与えられる。以下同様である。この方 式 で 例えば量子条件を与える漸近公式を無理なく導くことが出来る。$g(S)$をh^{-2}のべきの形に仮定して求める方法も考えられるが特にその必要もないであろう。

なおLanger の解法はこれに近いが，こゝでは省略する。

§6 あとがき

以上いわば境界値問題むきの逐次近似によるWKB法の精密化の仕方をのべた。その結果はいずれも

$$\frac{d^2y}{dt^2}+(h^2g(t)-\varepsilon(t))y=0$$

で$\varepsilon(t)$を無視するという形になつている。従つて近似解から誤差の評価も出来るし，又$\varepsilon(t)$をしらべて，例えば$x\to\infty$でも適用出来るかどうかを見通すことも出来る。

又こうして得られる解が一般には漸近解にしかならない点については少くとも一つは次のような原因によるものであると考えられる。それは，はじめの方程式のすべての転移点を近似方程式の転移点に対応させることが出来ないことである。その結果残された転移点は変換後は特異点になる。これはその近傍にhに依存する新たな0点を生じ，それが高次近似を求める場合には特異点に変る。最初の方程式の有限な所にある転移点が処理されても変換後$t=\infty$が$\varepsilon(t)$の真性特異点であれば事情は同様である。このため高次近似では$\varepsilon(t)$は次第にくせの悪い関数になる。これと同等なべき級数形の解が漸近級数にしかならないこともこれから間接に想像されよう。

なおべき級数表示の近似解との間には，色々な長短があるが，一様近似では高次近似はべき級数形にすると第一近似の特殊関数を更にいじりまわすことになる。こゝにあげた形でとゞめておけば，微分方程式の係数をいじる（普通係数は解より簡単である）だけですむことも，境

界条件を入れやすいことと並ぶ長所としてあげておこう。特殊関数でなくても $(1-x)^{-1}+O(x^5)$ と $1+x+\cdots+x^4+O(x^5)$ は数値計算をする場合には絶対に等しくないのである。

文　　献

1) G. Wentzel : Zs. f. Phys. 38 ('26) 518

2) L. Brillouin : J. de Phys. 7 ('26) 353

3) J. L. Dunham : Phys. Rev. 41 ('32) 713

4) E. C. Titchmarsh : Eigenfunction Expansions (Oxford) ('46) Chap Ⅷ

（この本では量子条件を与える方式をWKB法と呼んでいるが，近似解 (2)が大いにつかわれている。）

5) R. E. Langer : Phys. Rev. 51 ('37) 669

たゞし数学の雑誌に出たLanger の漸近解の研究はもっと古い。

6) H. Jeffreys : Proc. London Math. Soc. 23 ('24) 428

Jeffreys によれば転移点の取扱はRayleigh にさかのぼるという。

7) H. A. Kramers : Zs. f. Phys. 39 ('26) 828

8) S. C. Miller and R. H. Good : Phys. Rev. 91 ('53) 174

9) H. Moriguchi : J. Phys. Soc. Japan 14 ('59) 1771

10) 寺沢編：数学概論応用編　p.230

11) H. Moriguchi : Progr. Theor. Phys. 23 ('60) 750

文献についての補注

WKB法一般及び今井による精密化とその応用については今井の報告にゆずる。

量子条件の精密化については 4) がくわしい。

§3の方法による高次近似が一様近似以前に使われた例があるかどうか不明。

一様近似の歴史はさだかでない。確定特異点及び一位の転移点に関する 5) 或はそれに先立つ数学の方の論文が先駆とされているが，一般的な形の変換 (18) を特定の著者に結びつけることはむつかしい。Langer 外多くの研究としておく。確定特異点，一位の転移点に関する

綜合報公的論文としては

A. Eldélyi : J. math. Phys. 1 ('60) 16

これには数学の方の文献がかなりリストされている。その他の場合の第一近似の応用例では 8)の外

R. H. Barlett et al.: Ann. of Phys. 2 ('57) 372

は確定特異点と一位の転移点の両方がある場合である。

一様近似から出発する高次近似は数学の論文は多いが，応用例はあまり見当らない。

普通の又は変形WKB変換後，普通の「摂動法」で進むものには一位，二位の転移点近傍を扱つた

C. L. Pekeris : J. Appl. Phys., 17 ('49) 1108

がある。

確定特異点，一位の転移点の場合の「摂動法」による解についてはOlver 等が色々と議論している。例えば

F. W. J. Olver : Phil. Trans. Roy. Soc., 250 ('58) 479

なお

F. W. J. O. Olver : J. Soc. Indust. Appl. Math., 7 ('59) 306

はこの立場からの極めて簡潔な review である。

同じ号の

R. E. Langer : ibid. 298

は高階の場合を含む漸近理論のReview。

Langer のアプローチは一寸独特であるが，二階の方程式に対しては § 5.2 の方法の方が簡単であろう。物理屋むきのもので

R. E. Langer : Comm. Pure Appl. Math., 3 ('50) 427

が一位，二位の転移点をあつかつている。その他は大久保のリスト参照。

8) に先立つて一位の転移点では

T. M. Cherry : Trans. Amer Math. Soc. 68 ('50) 224

が (17) で $g(S) = S$ の時の解をべき級数形に求める方式をとつている。

最後に第一近似の範囲であるが

R. E. Langer : Phys. Rev. 75 ('49) 1573

は普通のWKB量子条件のかわりに，低い固有値に対して二位の転移点の漸近理論を用いるという提案をして例題を扱つている。