ラグランジュの未定係数法

与えられた条件下で，関数や変分における最大・最小を求める問題に適応可能！

例 1　周囲の長さが，2ℓ の長方形の面積の最大値を求める．

長方形の二辺を x, y とする．

$$g(x, y) = x + y - \ell = 0 \qquad \text{←拘束条件（周囲の長さを } 2\ell = \text{一定とする）} \qquad \text{(A-1)}$$

この条件下で，次の関数の最大値を求める．

$$f(x, y) = xy \qquad \text{←極値を求める関数} \qquad \text{(A-2)}$$

解法 その 1　微分で極値を求める方法

拘束条件(A-1)：$g(x, y) = x + y - \ell = 0$ より，y について解いて

$$y = \ell - x \qquad \text{(A-1)'}$$

これを極値を求める関数(A-2)：$f(x, y) = xy$ に代入して，

$$f(x, y(x)) = x \cdot y(x) = x(\ell - x)$$ ←　拘束条件を用いて，y が消去されている．

これを，x の関数として微分すると，

$$\boxed{\frac{df(x, y(x))}{dx} = \frac{d(x(\ell - x))}{dx} = \ell - 2x} \qquad \text{(A-3)}$$

関数 $f(x, y(x))$ が極値（最大値）を取るという事は，$f(x, y(x))$ の微分が 0 という事なので，

$$\ell - 2x = 0$$

$\therefore$　$x = \frac{\ell}{2}$　そして式(A-1)'より，　$y = [\ell - x]_{x=\frac{\ell}{2}} = \frac{\ell}{2}$　//

即ち，$x = y = \frac{\ell}{2}$　正方形が面積最大となる．

全微分で極値を求める方法

一方，式(A-3)は次式と等価である．

$$\boxed{df(x, y(x)) = \frac{d(x(\ell - x))}{dx} dx = (\ell - 2x)dx} \qquad \text{(A-3)'}$$

この式は拘束条件を用いて，すでに y は消去されている関数 $f(x, y(x))$ の全微分である

関数 $f(x, y(x))$ が極値を持つという事は，$f(x, y(x))$ の全微分が 0 という事である．

$$df(x, y(x)) \equiv 0$$

即ち，(A-3)'より，

$$df(x, y(x)) = (\ell - 2x)dx \equiv 0$$

任意の dx に対して 0 なので，　→　$(\ell - 2x) = 0$　→　$\therefore$　$x = \frac{\ell}{2}$　そして，拘束条件より　$y = \frac{\ell}{2}$　//

全微分=0 の解き方は，通常の微分で極値を求めることと等価である！

$\boxed{\text{解法 その2}}$　　未定係数法で極値を求める方法

未定係数法では以下のように考える．

まず，最大化する関数 $f(x,y)=xy$ の全微分をとる．変数は x, y の 2 つである．

$$df=\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy$$

$\downarrow\leftarrow$　　$f(x,y)=xy$　与式(A-2)を代入して

$$df=ydx+xdy \tag{A-4}$$

$\boxed{\text{解法 その1}}$**の全微分で極値を求める方法では，**拘束条件を満たす x, y に対して $df(x,y)=0$ とした．

これに対して，**未定係数法では，**$\boxed{\text{解法 その1}}$でやったように，条件の関数 $g(x,y)$ から y について解いて，（極値を求める）最大化する関数 $f(x,y)$ に代入して，y を消去するのではなく，
拘束条件の関数 $g(x,y)$ の全微分を定数倍して，最大化する関数 $f(x,y)$ に加えて dy を消去する．

やってみよう！　先ず，拘束条件の関数 $g(x,y)=x+y-\ell$ の全微分は，

$$dg=\frac{\partial g}{\partial x}dx+\frac{\partial g}{\partial y}dy=dx+dy \tag{A-5}$$

続いて，$g(x,y)$ の全微分を定数 λ 倍して，$f(x,y)$ の全微分(A-4)に加えて，dy を消去してみよう！

$$df+\lambda dg=\left(\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy\right)+\lambda\left(\frac{\partial g}{\partial x}dx+\frac{\partial g}{\partial y}dy\right)$$

$$=\left(\frac{\partial f}{\partial x}+\lambda\frac{\partial g}{\partial x}\right)dx+\left(\frac{\partial f}{\partial y}+\lambda\frac{\partial g}{\partial y}\right)dy \tag{A-6}$$

$\downarrow\leftarrow$　　$\frac{\partial f}{\partial x}=y,\ \frac{\partial g}{\partial x}=1,\ \frac{\partial f}{\partial y}=x,\ \frac{\partial g}{\partial y}=1$　$\leftarrow$式(A-1),(A-2)より

$$=(y+\lambda)dx+(x+\lambda)dy \tag{A-7}$$

<u>この式の dy を消去するには，</u> <u>dy の係数</u> $\equiv 0$．　即ち $(x+\lambda)=0$　$\rightarrow$　$\therefore$　$\lambda=-x$　(A-8)

$$[df+\lambda dg]_{\lambda=-x}=[(y+\lambda)dx+(x+\lambda)dy]_{\lambda=-x}=(y-x)dx$$

即ち　$df=(y-x)dx+xdg=(y-x)dx$　　　$\because$ $dg=0$　　$\leftarrow$(A-1)より

$\downarrow\leftarrow$　$y=\ell-x$　$\leftarrow$　(A-1)より

$$df=(\ell-2x)dx \quad \text{これは(A-3)'と同じ式} \tag{A-9}$$

関数 f が極値を持つという事 $\Leftrightarrow$ 任意の dx に対して $df(x,y(x))\equiv 0$ という事 $\Leftrightarrow$ $df(x,y(x))\equiv 0$

即ち　$(\ell-2x)=0$　$\rightarrow$　$\therefore$　$x=\frac{\ell}{2}$　そして，$y=\frac{\ell}{2}$　　//　　(A-10)

上記解法の見方を変えると，次の連立方程式を解くことに対応する．

- $g(x,y)=x+y-\ell=0$　　(A-1)再掲
- $\frac{\partial f}{\partial x}+\lambda\frac{\partial g}{\partial x}=0$　　(A-11)
- $\frac{\partial f}{\partial y}+\lambda\frac{\partial g}{\partial y}=0$　　(A-12)

これを解くということは，λ, x, y を独立な変数として，

$\tilde{F}=f(x,y)+\lambda g(x,y)$　　が停留値をとる　ということと等価である．　(A-13)

※「拘束条件 $g(x,y)=0$ 付きで $f(x,y)$ の停留値を求める」　$\Leftrightarrow$　<u>(A-13)の停留値を求める」</u>

☝ ラグランジュの未定係数法

ラグランジュの未定係数法　　一般論

極値を求めたい関数は　$f(x_1, x_2, \cdots, x_f)$

変数は　$x_1, x_2, \cdots, x_f$　の f 個

拘束条件は　s 個　　$s < f$

①

拘束条件 $\begin{cases} g_1(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \\ g_2(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \\ \quad\vdots \\ g_s(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \end{cases}$　の下で，　$f(x_1, x_2, \cdots, x_f)$　の停留値を求める

⇕　①と②は同じことである

②

拘束条件 $\begin{cases} g_1(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \\ g_2(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \\ \quad\vdots \\ g_s(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \end{cases}$　の下で，　(A-14)

$\tilde{F} = f(x_1, x_2, \cdots, x_f) + \lambda_1 g_1(x_1, x_2, \cdots, x_f) + \cdots + \lambda_s g_s(x_1, x_2, \cdots, x_f)$　の停留値を求める　(A-15)

つまり，$\begin{cases} \dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial x_1} = 0 \\ \dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial x_2} = 0 \\ \quad\vdots \\ \dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial x_f} = 0 \\ \dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial \lambda_1} = 0 \quad i.e., \ g_1(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \\ \dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial \lambda_2} = 0 \quad i.e., \ g_2(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \\ \qquad\qquad\vdots \\ \dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial \lambda_s} = 0 \quad i.e., \ g_s(x_1, x_2, \cdots, x_f) = 0 \end{cases}$　を満たす $x_1, x_2, \cdots, x_f$ を求める

①と②が同じであることの証明

①は以下の手順である.

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_f}dx_f \qquad \text{(A-16)}$$

この式が，拘束条件を満たす $dx_1, dx_2, \cdots, dx_f$ に対してゼロになればよい.

拘束条件を満たすためには，

$$dg_1 = \frac{\partial g_1}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial g_1}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial g_1}{\partial x_f}dx_f = 0 \qquad \text{(A-17) 1 番目}$$

$$dg_2 = \frac{\partial g_2}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial g_2}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial g_2}{\partial x_f}dx_f = 0 \qquad \text{(A-18) 2 番目}$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$dg_s = \frac{\partial g_s}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial g_s}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial g_s}{\partial x_f}dx_f = 0 \qquad \text{(A-19)}\ s\ \text{番目}$$

ここで，(A-16)+ λ_1 ×(A-17)+ λ_2 ×(A-18)+ … + λ_s ×(A-19) を計算し，

$dx_1, dx_2, \cdots, dx_s$ を消去できるように，$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_s$ を以下に決める.

$$\begin{aligned} & df + \lambda_1 dg_1 + \lambda_2 dg_2 + \cdots + \lambda_s dg_s \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_f}dx_f\right) + \lambda_1\left(\frac{\partial g_1}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial g_1}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial g_1}{\partial x_f}dx_f\right) + \cdots + \lambda_s\left(\frac{\partial g_s}{\partial x_1}dx_1 + \frac{\partial g_s}{\partial x_2}dx_2 + \cdots + \frac{\partial g_s}{\partial x_f}dx_f\right) \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_1} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_1}\right)dx_1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_2} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_2}\right)dx_2 + \cdots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_f} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_f} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_f}\right)dx_f \equiv 0 \qquad \text{(A-20)} \end{aligned}$$

$$\therefore \qquad \begin{aligned} &\frac{\partial f}{\partial x_1} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_1} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_1} = 0 \\ &\frac{\partial f}{\partial x_2} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_2} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_2} = 0 \\ &\qquad\vdots \\ &\frac{\partial f}{\partial x_s} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_s} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_s} = 0 \end{aligned} \qquad \text{(A-21)}$$

こうして，拘束条件の数だけ $dx_1, dx_2, \cdots, dx_s$ は消去される. → df は残りの $dx_{s+1}, dx_{s+2}, \cdots, dx_f$ だけで表される.

∴ → df が任意の $dx_{s+1}, dx_{s+2}, \cdots, dx_f$ に対して停留値を取ればよい！ その条件は，

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f}{\partial x_{s+1}} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_{s+1}} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_{s+1}} = 0 \\ &\frac{\partial f}{\partial x_{s+2}} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_{s+2}} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_{s+2}} = 0 \\ &\qquad\vdots \\ &\frac{\partial f}{\partial x_f} + \lambda_1\frac{\partial g_1}{\partial x_f} + \cdots + \lambda_s\frac{\partial g_s}{\partial x_f} = 0 \end{aligned} \qquad \text{(A-22)}$$

よって，①は拘束条件の式(A-14)と，(A-21)，(A-22)を同時に満たす問題を解くこと=② に帰着する.

$$\tilde{F} \equiv f + \lambda_1 g_1 + \cdots + \lambda_s g_s = f(x_1, x_2, \cdots, x_f) + \lambda_1 g_1(x_1, x_2, \cdots, x_f) + \cdots + \lambda_s g_s(x_1, x_2, \cdots, x_f) \qquad \text{(A-23)}$$

と定義すると，

「(A-23)が $dx_1, dx_2, \cdots, dx_f$ に対して停留値を取る条件」⇔「(A-21)，(A-22)を満たす」

「(A-23)が $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_s$ に対して停留値を取る条件」⇔「拘束条件(A-14)を満たす」

例２　ボルツマン分布の導出　　分子がエネルギー：ε を持つ確率は，$e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}$ に比例する．

分子の取りうる状態の数：ℓ
それらの状態のエネルギー：$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_\ell$
総分子数：N
絶対温度：T
エネルギー：$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_\ell$ の状態にある分子の数：$n_1, n_2, \cdots, n_\ell$

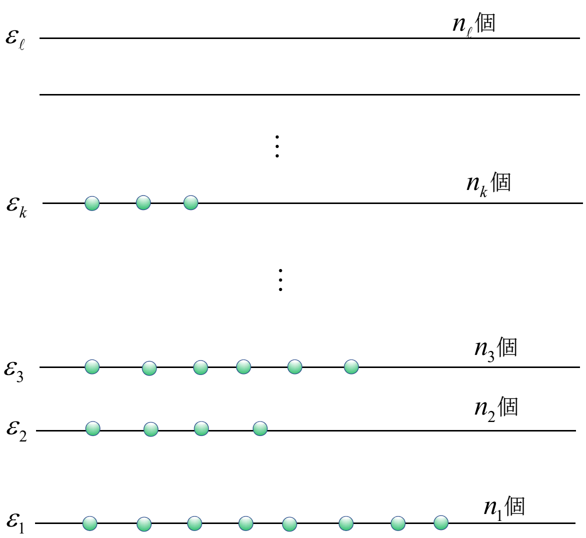
熱平衡状態では，

ε_1 に n_1 個，ε_2 に n_2 個，$\cdots$ ε_k に n_k 個を分配する場合の数：W が最大になる分布が実現している．

熱平衡状態での分布を求める問題の解法順
① 場合の数：W を求める
② 総分子数：N，全エネルギー：E の条件下で，W が最大になる条件を求める．
ラグランジュの未定係数法

問題を絵にすると，

$$N = n_1 + n_2 + \cdots + n_k$$



$$W = \frac{N!}{n_1!\ n_2!\ n_3!\ \cdots\ n_k!} \tag{A-24}$$

問題を式にすると，

拘束条件は，
$$\sum_{i=1}^{k} n_i = N \tag{A-25}$$
$$\sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i n_i = E \tag{A-26}$$
最大化する関数は，
$$f \equiv \ln W \tag{A-27}$$

次頁に続く

(A-27)の W は非常に大きな数なので，解析的に解くために，スターリングの公式により書き換える

$$\ln N \approx N\ln N - N$$

$$\begin{aligned} f = \ln W &= \ln\left(\frac{N!}{n_1!\ n_2!\ n_3!\ \cdots n_k!}\right) \\ &= \ln N! - \ln n_1! - \ln n_2! - \ln n_3! - \ \cdots\ - \ln n_k! \\ &\approx (N\ln N - N) - (n_1\ln n_1 - n_1) - (n_2\ln n_2 - n_2) - (n_3\ln n_3 - n_3) - \ \cdots\ - (n_k\ln n_k - n_k) \\ &= N\ln N - n_1\ln n_1 - n_2\ln n_2 - n_3\ln n_3 - \ \cdots\ - n_k\ln n_k \end{aligned}$$

$$\therefore\quad f = N\ln N - \sum_{i=1}^{k} n_i \ln n_i \tag{A-28}$$

よって，ラグランジュの未定係数法では，下記の式の停留値問題となる．

拘束条件は，

$$\sum_{i=1}^{k} n_i - N = 0 \qquad \leftarrow \text{(A-25)より} \tag{A-29}$$

$$\sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i n_i - E = 0 \qquad \leftarrow \text{(A-26)より} \tag{A-30}$$

停留値を持つべき関数は，

$$\tilde{F} = N\ln N - \sum_{i=1}^{k} n_i \ln n_i - \alpha\left(\sum_{i=1}^{k} n_i - N\right) - \beta\left(\sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i n_i - E\right) \tag{A-31}$$

準備ができたので，以下に解答する．

式(A-31) $\tilde{F}$ を n_i で偏微分して，

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial n_i} = -\left(\ln n_i + n_i \frac{1}{n_i}\right) - \alpha - \beta\varepsilon_i = -\ln n_i - 1 - \alpha - \beta\varepsilon_i \tag{A-32}$$

$\tilde{F}$ が停留値を取る条件は，$\boxed{\dfrac{\partial \tilde{F}}{\partial n_i} = 0}$ (A-33)

i.e., $\quad\rightarrow\quad \ln n_i = -1 - \alpha - \beta\varepsilon_i$

$$\therefore\quad n_i = e^{-1-\alpha-\beta\varepsilon_i} \tag{A-34}$$

$\downarrow\leftarrow\quad e^{-1-\alpha} \equiv A$ と置いて (A-35)

$\boxed{n_i = Ae^{-\beta\varepsilon_i}}$ ※ $\beta \equiv \dfrac{1}{k_B T}$ と置けると，ボルツマン分布となる(次頁参照) (A-36)

これ以外に，拘束条件を満たす必要がある．(A-29)(A-30)に(A-36)を代入すると，

$$N = \sum_{i=1}^{k} n_i = \sum_{i=1}^{k} Ae^{-\beta\varepsilon_i} = A\sum_{i=1}^{k} e^{-\beta\varepsilon_i} \tag{A-37}$$

$$E = \sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i n_i = \sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i Ae^{-\beta\varepsilon_i} = A\sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i e^{-\beta\varepsilon_i} \tag{A-38}$$

これら条件を満たすように，A と β を決めると，答えとなる！

※ エネルギーが離散的でなく連続的な ε の場合は，$\varepsilon' < \varepsilon < \varepsilon' + d\varepsilon'$ の状態数を $\rho(\varepsilon')d\varepsilon'$ として，(A-37)(A-38)の条件は，下記のように書き換えられる．（$\rho(\varepsilon')$ は状態密度）

$$N = A\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon'} \rho(\varepsilon')\, d\varepsilon' \tag{A-39}$$

$$E = A\int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon' e^{-\beta\varepsilon'} \rho(\varepsilon')\, d\varepsilon' \tag{A-40}$$

未定係数 β と絶対温度 T　　ボルツマン分布

式(A-36):　$n_i = Ae^{-\beta\varepsilon_i}$　　理想気体に適応してみる．

エネルギーは，$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i v_i^2}{2}$　　ここで，$v_i = \sqrt{v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2}$ は i 番目の粒子の速度　　(A-41)

エネルギーが，$\varepsilon' < \varepsilon < \varepsilon' + d\varepsilon'$ にある状態の数は，

粒子の速度が，$v' = \sqrt{\frac{2\varepsilon'}{m_i}} < v < \sqrt{\frac{2(\varepsilon' + d\varepsilon')}{m_i}} = v' + dv'$ の範囲にある状態の数に等しい．

速度空間で，速度 v を半径とする球の表面積は，$4\pi v^2$ なので，

$$\rho(\varepsilon')d\varepsilon' = C\, 4\pi v^2 dv = C\, 4\pi \frac{2\varepsilon}{m} \frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon}} d\varepsilon$$　←ここで C は定数，　また $=$ は(A-41)より　　(A-42)

↓←　$C' = C\pi\left(\frac{2}{m}\right)^{\frac{3}{2}}$ として

$$\rho(\varepsilon')d\varepsilon' = C'\sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon$$　←（三次元理想気体の状態密度）　　(A-43)

よって，(A-39) (A-40)は

$$N = A\int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon'}\rho(\varepsilon')d\varepsilon' = AC'\int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon'}\varepsilon'^{\frac{1}{2}}\, d\varepsilon' \qquad \text{(A-44)}$$

$$E = A\int_0^\infty \varepsilon' e^{-\beta\varepsilon'}\rho(\varepsilon')d\varepsilon' = AC'\int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon'}\varepsilon'^{\frac{3}{2}}\, d\varepsilon' \qquad \text{(A-45)}$$

(A-45)を部分積分して　　（$e^{-\beta\varepsilon'} \equiv g'$，$\varepsilon'^{\frac{3}{2}} \equiv f$ として，$\int f \cdot g' dx = f \cdot g - \int f' \cdot g\, dx$）

$$E = AC'\int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon'}\varepsilon'^{\frac{3}{2}}\, d\varepsilon' = AC'\left[\frac{e^{-\beta\varepsilon'}}{-\beta}\varepsilon'^{\frac{3}{2}}\right]_0^\infty - AC'\int_0^\infty \frac{e^{-\beta\varepsilon'}}{-\beta}\frac{3}{2}\varepsilon'^{\frac{1}{2}}\, d\varepsilon' \quad \leftarrow \because [\ ]_0^\infty = 0$$

$$= -\frac{3}{2}\frac{1}{-\beta}AC'\int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon'}\varepsilon'^{\frac{1}{2}}\, d\varepsilon' = \frac{3}{2\beta}\underline{AC'\int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon'}\varepsilon'^{\frac{1}{2}}\, d\varepsilon'}$$

$$= \frac{3}{2\beta}N$$　←（A-44）　　(A-46)

一方，分子運動論より，$E = \frac{3}{2}k_B T N$　　(A-47)

(A-46) (A-47)を比較して，

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \qquad \text{(A-48)}$$

よって，(A-36)は，

$$n_i = Ae^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}} \qquad \text{(A-49)}$$