

1 はじめに

1.1 目的

物理をやっていると、式にいろいろ物理的意味をつけたいのはやまやまではあるが、取りあえず物理的意味を忘れて計算をやってしまわないといけないときもある。そういう計算に必要な公式等を各講義でやっていると気が散るので、ひとつの別個の講義にまとめておく。例を挙げながらやるのがいいと言うが、天文と地球惑星のひとも取っていて、物理の例を出すとわからんというアンケート結果があったので、この際抽象的にやろうかと思っている。

1.2 テーマ

大テーマが二つ、「線形偏微分方程式」と「特殊関数」。

1. 線形偏微分方程式について。例えば一次元熱伝導方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} f = \nu \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 f \quad (1.1)$$

を考えると、 f が解なら cf も解、 $f_{1,2}$ が解なら $f_1 + f_2$ も解。解が線形空間をなす。一方で、右辺に項を追加して

$$\frac{\partial}{\partial t} f = \nu \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 f - \epsilon f \frac{\partial}{\partial x} f \quad (1.2)$$

としたものを Burgers' equation というが、これは非線形。

線形方程式は知っている解を沢山組み合わせるとどんどん解が見つかる、という意味で簡単。物理には非線形方程式もあって重要だけれど、まずは線形方程式を学びましょう。

2. 特殊関数。皆さんは

$$f'(x) = f \quad (1.3)$$

の解は

$$f(x) = e^x \quad (1.4)$$

である、と知っているだろうが、よくよく反省してみると、これは、単に (1.3) の解を e^x と書く、と定義したと思っても良い。重要なのは、この記号 e^x が、

- 指数関数 (exponential function) とよばれる
- いろいろな性質、例えば $e^{x+y} = e^x e^y$ を満たすことを知っている
- 他にもいろいろ知らない性質があるかもしれないけれど、指数関数という名前を知っていれば、Wikipedia で調べるなり、Mathematica のヘルプを読むなり出来る

ということ。というわけで、

$$\left[x^2 \frac{d}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + (x^2 - m^2) \right] f = 0 \quad (1.5)$$

の解をベッセル関数 (Bessel function) $J_m(x)$ と名付ける。名付けたことで、急に判った気がする。これが重要。

小テーマとしてさらに二つ、(有限次元)線形代数の復習および回転群の性質。

- 線形微分方程式を習うが、(最近の物理屋の感覚としては?) その背後に有限次元線形代数をならうことで培った感覚があるので、反省しておくが良い。
- 特殊関数のうち、球面調和関数に関しては、20世紀初頭では微分方程式を変数分離して云々とやるのが自然だったかもしれないが、(最近の物理屋の感覚としては?) 回転対称性のもとで方程式を分解しているという感覚があるので、それもやっておくのは悪くない。

1.3 参考文献

特に教科書は指定しないが、松尾さんの講義ノート

<http://www-hep.phys.s.u-tokyo.ac.jp/~matsuo/files.html>

が充分すぎるほど詳しい。

クーラン=ヒルベルト「物理数学の方法」日本語版 1,2 巻、原書 1 巻ぐらいの内容(を非常に薄めたもの)に相当。この本は1924年初版。90年経っている。皆さんは二年生後半だけれど、四年生を終えるまでに大体100年分ぐらい勉強。頑張ってください!

「岩波公式集」。これは僕が学生のとき(の少しまえ)ぐらいまでは日本の(理論)物理屋の必携書だったが、最近は Wikipedia か Mathematica に取って代わられた(?)。公式集にせよ、Wikipedia にせよ、Mathematica にせよ、

- もはや文科省が細かいところまで記法を決めていないので、人によって記法が異なる。
- のっている/出力される全ての公式が正しいわけではない。(有名な噂として、岩波公式集のテータ関数の恒等式が間違っていたせいで、日本の弦理論研究者が一年ほど混乱して研究が遅れた、という話がある。)

というわけで、計算して得られた結果を別の方法で納得することが大切。

1.4 謝辞

2013年度の講義に参加してくれた学生さんにはいろいろと質問をしてもらって、お陰で内容がとても改善したと思います。どうもありがとう。また、特に、酒寄健さんには沢山講義ノートの誤植を指摘してもらった。こちらもどうもありがとう。読者の方も、誤植や議論の間違いをみつけたら、是非連絡をお願いします。

1.5 楕円関数についてすこしだけ

伝統的に特殊関数といえば Γ 関数、直交多項式、超幾何関数、楕円関数といったところだが、楕円関数だけはシラバスに入っていないので、折角なのですこしだけ触れておく。

腕の長さが l の振り子の運動を考える。運動方程式は

$$\ddot{\theta} = -\frac{g}{l} \sin \theta. \quad (1.6)$$

振れ角が小さければ、単に

$$\theta = \theta_0 \sin \omega t \quad (1.7)$$

但し θ_0 は最大振れ角、 $\omega = \sqrt{g/l}$ 。

振れ角が小さくなければ? エネルギー保存から

$$\dot{\theta} = \sqrt{2\omega \sqrt{\cos \theta - \cos \theta_0}}. \quad (1.8)$$

さらに

$$z = \frac{\sin(\theta/2)}{\sin(\theta_0/2)} \quad (1.9)$$

を導入すると、

$$\dot{z} = \omega \sqrt{(1-z^2)(1-kz^2)} \quad (1.10)$$

を得る、ただし $k = \sin(\theta_0/2)$ 。これより

$$\omega t(z_*) = \int_{z=0}^{z=z_*} \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-kz^2)}} \quad (1.11)$$

右辺は楕円関数 sn の逆関数の定義式で、

$$z = \text{sn}(\omega t, k) \quad (1.12)$$

と書く。これを Jacobi の楕円関数 sn という。まあはっきり言って名前を付けただけ。 $k=0$ なら普通の \sin に戻る。

なぜ「楕円」関数というか? 長半径 1、短半径 s の楕円の周長は

$$\int \sqrt{\cos^2 \varphi + s^2 \sin^2 \varphi} d\varphi = \int \sqrt{1 - k \sin^2 \varphi} d\varphi = \int \sqrt{\frac{1-kz^2}{1-z^2}} dz \quad (1.13)$$

但し $k = 1-s^2$ 、 $z = \sin \varphi$ とした。これは何故か第 2 種楕円積分という。一方 (1.11) は第 1 種楕円積分。

なににせよ、 sn は三角関数のような関係式をいろいろ満たす。例えば、

$$\text{sn}^2 u + \text{cn}^2 u = 1, \quad k \text{sn}^2 u + \text{dn}^2 u = 1 \quad (1.14)$$

cn は \cos に相当。 $k \neq 0$ なので、 dn というのもある。 $k=0$ のときは $\text{dn} u \equiv 1$ 。加法定理は

$$\text{sn}(u+v) = \frac{\text{sn} u \text{cn} v \text{dn} v + \text{sn} v \text{cn} u \text{dn} u}{1 - k^2 \text{sn}^2 u \text{sn}^2 v}. \quad (1.15)$$

$\text{sn}' = \text{cn}$ に相当して、

$$\text{sn}' u = \text{cn} u \text{dn} u \quad (1.16)$$

というのがあ。これらを「知っている」と、(1.12) が (1.10) を解くのは当たり前。勿論、この時点では、定義しているのか既知の事実を用いて解いているのか微妙なところだが、皆さんの \sin , \exp , \log の理解はどうでしょうか? 高校数学の範囲に楕円関数がいっていたら、皆さん入試のせいでなんとなくこれらの関係式は覚えていて、自在に操っていたのではないかと思う。

(1.11) の被積分関数は $z = \pm 1, \pm 1/k$ に平方根型の分岐点がある。対応するリーマン面はトーラスである。

$$K = \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}}, \quad K' = -i \int_1^{1/k} \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}}, \quad (1.17)$$

は正の実数(になるように分岐を選ぶ)。すると、(1.11) の積分は、 z の上半平面を $[-K, K] \times [0, iK']$ の長方形にうつす。リーマン面全体はこれの四枚分。結局、 $\text{sn}(u)$ は周期 $4K$ および $2iK'$ を持つ二重周期有理関数である。0 重周期、一重周期、二重周期という段階がある:

$$x \rightsquigarrow \sin(x) \rightsquigarrow \text{sn}(x) \quad (1.18)$$

三重周期をもつ一変数有理関数は不可能なので、ある意味楕円関数は一番偉い。

2 (有限次元) 線形代数の復習

2.1 一般論

複素線形空間 V とは、勝手な元 $\vec{v} \in V$ と複素数 $c \in \mathbb{C}$ に対して $c\vec{v} \in V$ 、また勝手な二つの元 $\vec{v}, \vec{w} \in V$ に対して $\vec{v} + \vec{w} \in V$ となるようなもの。

V 上のエルミート内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ とは、

$$\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = \overline{\langle \vec{w}, \vec{v} \rangle}, \quad \langle \vec{v}, \vec{w}_1 + \vec{w}_2 \rangle = \langle \vec{v}, \vec{w}_1 \rangle + \langle \vec{v}, \vec{w}_2 \rangle, \quad \langle \vec{v}, c\vec{w} \rangle = c\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle \quad (2.1)$$

であり、勝手な \vec{v} に対し

$$\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle \geq 0 \quad (2.2)$$

で、等号は $\vec{v} = 0$ のときのみ成り立つもの。

複素線形空間 V, W に対し、線形演算子 $M: V \rightarrow W$ とは、

$$M(c\vec{v}) = c(M\vec{v}), \quad M(\vec{v} + \vec{w}) = M\vec{v} + M\vec{w} \quad (2.3)$$

なるもの。(物理では演算子、数学では作用素という。)

実例は n 次元縦ベクトルの空間、等。 $\vec{v} = (v_i)_{i=1}^n$ で $\langle \vec{v}, \vec{w} \rangle = \sum_{i=1}^n \bar{v}_i w_i$ とする。行列は M_{ij} と書いて、

$$w_i = \sum_j M_{ij} v_j \quad (2.4)$$

等とすると M は線形変換。 i が行 (row)、 j が列 (column) を指定。

以下、線形空間は有限次元とする。次元を n とする。 $A: V \rightarrow V$ に対して、

$$\langle \vec{v}, A\vec{w} \rangle = \langle A^\dagger \vec{v}, \vec{w} \rangle \quad (2.5)$$

で定まる $A^\dagger: V \rightarrow V$ を A のエルミート共役という。 $A = A^\dagger$ のとき A をエルミート演算子という。 $AA^\dagger = 1$ のとき A をユニタリ演算子という。 A がエルミートなら、 e^{iA} はユニタリ演算子。

対角成分以外がゼロの行列を対角行列という。

$$D = \text{diag}(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (2.6)$$

等と書く。

演算子 X がエルミートなら、 n 個の互いに直交する固有ベクトル $\vec{v}_i, i = 1, \dots, n$ があり、固有値は実数である。同様に、 X がユニタリなら、 n 個の互いに直交する固有ベクトルがあり、固有値の絶対値は 1 である。どちらも帰納法で証明できる。(特性多項式の根を取ってくると、一つは固有ベクトルがある。それに直交する空間に演算子は制限できる。終。)

上記固有ベクトルを長さ 1 にしてから並べた行列を U 、すなわち $U = (\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n)$ 、もつという $\vec{v}_i = (v_{ij})_{j=1}^n$ として $U_{ij} = v_{ij}$ とすると、 $U^{-1} X U$ は対角行列。また、 U の列は互いに直交するから、 U はユニタリ。すなわち、エルミート演算子もしくはユニタリ演算子は、ユニタリ行列によって対角化できる。

演算子 $X_{1,2,\dots}$ が互いに交換するエルミート演算子の場合 $X_a X_b = X_b X_a$ 、これらには n 個の互いに直交する同時固有ベクトルがある。証明は考えよ。

有限次元しか考えない言い訳:

- 空間座標が任意に精度の良い実数で与えられると思うのはマヤカシである。プランク長さより短いところではとびとびかもしれないし、現在の宇宙論的地平線より先までつづいている保証もない。だから、空間方向の点は高々有限個かもしれない。無限かもしれないけれど、有限かもしれないから、現時点の物理で計算をやって出た答えが、線形空間が無限であることによって始めて生じる微妙なことに依存するわけではない。
- 水素原子のハミルトニアンは量子力学でやると思うが、無限次元の線形空間が出てくる。これははじめ Pauli によって「解かれた」のが 1926 年であるが、このハミルトニアンが加藤によって本質的自己共役であることが示されたのは 1951 年である。数学的に厳密にするのは悪い事ではないが、それを追求するあまり 25 年間理論物理を歩かせたくないかというのは難しい問題だ。この調子で、最先端の物理の論文でやっている計算は正当化されているものもあり、正当化されていないものですぐに正当化できそうなこともあり、正当化されていないもので全然正当化できそうにないが (実験的に) 正しい答えを与えるものもある。

とにかく、無限のほうが偉いとかいうのは間違いで、有限の計算をするのは難しいから、有限の近似として無限を扱っているのである。その「近似」から出てくる無限に関する微妙な点は、自由度が有限だけれどとても大きいことからくるいろいろな微妙な点である場合は多いので、重要ではあるけれども、そういう点を見失って純粋に数学的問題として考えても物理的にはあまり意味はない (という言い訳をして進む)。

2.2 実例

N 次元縦ベクトルのなす線形空間 V を考える。 $\vec{v} = (v_i)_{i=1}^N \in V$ だが、 N 個並んだ点に複素数が付いていると考える。だから、むしろ

$$V \ni \vec{f}: \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{C}, \quad i \mapsto f_i \quad (2.7)$$

と考える。さらに、 $f_{i+N} = f_i$ と定めれば、 $\{\dots, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ 上の周期 N の関数と思って良い。

$\vec{\alpha}_i$ を $\alpha_{ij} = \delta_{ij}$ で定める ($i = 1, \dots, N$)。形式的に $\alpha_{i+N} = \alpha_i$ と定める。これは正規直交基底。ユニタリ変換 C, S を次のように定める:

$$C\vec{\alpha}_i = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right)\vec{\alpha}_i, \quad S\vec{\alpha}_i = \vec{\alpha}_{i-1}. \quad (2.8)$$

$S\vec{\alpha}_N = \vec{\alpha}_{N+1} = \vec{\alpha}_1$ に注意せよ。虚数単位 i と添え字の i がややこしくてごめんなさい。(数式に欧米の文字しか使えないという慣習が悪いので重なるのだ。) また、ベクトル $\vec{f} = \sum_i f_i \vec{\alpha}_i$ の成分に対しては

$$(Sf)_i = f_{i+1} \quad (2.9)$$

であるのに注意せよ。

$$CS = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right)SC \quad (2.10)$$

という交換関係があって、有限ハイゼンベルク交換関係と呼ばれる。 S は shift の頭文字で、 C は固有値を単位円周上にならべると時計っぽいで clock と呼ぶ (人が素粒子論の中では居る。't Hooft が名前を付けた。)

C は既に対角化されていて

$$C = \exp \operatorname{diag}\left(\frac{2\pi i}{N}, \frac{2\pi i \cdot 2}{N}, \frac{2\pi i \cdot 3}{N}, \dots, \frac{2\pi i \cdot N}{N}\right) \quad (2.11)$$

であるが、 S の固有値はなんだろうか？ (2.10) からして、 $C \leftrightarrow S$ とともに $i \rightarrow -i$ とすれば元に戻るので、 S の固有値は C の固有値 (を複素共役をとったもの) だと思ふのは自然だ。実際そうであるのは次のようにわかる。

S の固有ベクトルを一つ $\vec{\beta} = \sum_i \beta_i \vec{\alpha}_i$ と取る。 $\vec{\beta} = (\beta_i)$ ということ。固有値を γ とすると、 $\beta_{i+1} = \gamma \beta_i$ 。よって $\beta_{i+N} = \gamma^N \beta_i$ なので、何か $n = 1, \dots, N$ があって $\gamma = \exp(2\pi i n/N)$ 。固有ベクトルはそこで $\vec{\beta}_n$ 但し

$$\beta_{nj} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(\frac{2\pi i j n}{N}\right) \quad (2.12)$$

と書ける。ただし $N^{-1/2}$ は正規化するために入れた。

$$S \vec{\beta}_n = \exp\left(\frac{2\pi i n}{N}\right) \vec{\beta}_n, \quad C \vec{\beta}_n = \beta_{n+1} \quad (2.13)$$

だから、 U を $U_{nj} = \beta_{nj}$ で定めると

$$U^{-1} S U = C, \quad U^{-1} C U = S^{-1} \quad (2.14)$$

となった。 $U \vec{\alpha}_j = \vec{\beta}_j$ である、といってもいい。 $U^{-1} = U^\dagger$ は

$$(U^\dagger)_{jn} = \exp\left(\frac{-2\pi i j n}{N}\right) \quad (2.15)$$

である。

$\vec{f} = (f_i)_{i=1}^N$ は $\vec{f} = \sum_i f_i \vec{\alpha}_i$ であったが、これを $\vec{f} = \sum_n \hat{f}_n \vec{\beta}_n$ と展開してみる。このときの f_i と \hat{f}_n の関係を求めるには、 $\vec{\beta}_n$ を α_i で展開した成分を知っているのだから代入すれば良い:

$$f_j = \sum_n \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(\frac{2\pi i j n}{N}\right) \hat{f}_n \quad (2.16)$$

これは U を掛けたと思ってもよい。逆は U^\dagger を掛ければ良いので

$$\hat{f}_n = \sum_j \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-\frac{2\pi i j n}{N}\right) f_j. \quad (2.17)$$

これは離散フーリエ変換と呼ばれる。

2.3 フーリエ変換

2.3.1 極限操作 1

$[0, L]$ 上の周期的関数に対して上記離散フーリエ変換のようなことがしたいとする。そのため、長さ L のところを N 等分して、間隔が $\epsilon = L/N$ としよう。 N は馬鹿でかい ($10^{10^{10}}$ 等) とすれば実用上十分すぎる。 $f_i \propto f(\epsilon i)$ としたいが、 $f(x)$ と $g(x)$ の内積を

$$\langle f, g \rangle := \frac{1}{L} \int_0^L \overline{f(x)} g(x) \quad (2.18)$$

としたいなら

$$f_i = \frac{1}{\sqrt{N}} f(\epsilon i) \quad (2.19)$$

とするのが良い:

$$\langle \vec{f}, \vec{g} \rangle = \sum f_i \bar{g}_i = \frac{1}{N} \sum_i f(\epsilon i) \overline{g(\epsilon i)} = \frac{1}{L} (\epsilon \sum_i f(\epsilon i) \overline{g(\epsilon i)}) \rightarrow \frac{1}{L} \int_0^L f(x) \overline{g(x)} dx. \quad (2.20)$$

そうすると、(2.16) は

$$f(x) = \sum_n \exp\left(\frac{2\pi i n x}{L}\right) \hat{f}_n, \quad (2.21)$$

逆変換 (2.17) は

$$\hat{f}_n = \frac{1}{L} \int_0^L \exp\left(\frac{-2\pi i n x}{L}\right) f(x) dx \quad (2.22)$$

である。もともと $n = 1, 2, \dots, N$ だったが、極限をとる際は $n = -N/2, \dots, -1, 0, 1, \dots, N/2$ だとしておいて $N \rightarrow \infty$ をとるのがよい。だから、(2.21) と (2.22) において n は勝手な整数を取る。

2.3.2 極限操作 2

一方で、元の関数 $f(x)$ は $x = \dots, -a, 0, a, 2a, \dots$ と格子間隔 a の整数倍 $x = ja$ のところのみ値を持つが、 x に上限下限はない場合というのを考えてみる。この場合、(2.16) や (2.17) における位相の因子を

$$\exp\left(\frac{2\pi i j n}{N}\right) = \exp(ik), \quad k = \frac{2\pi n}{Na} \quad (2.23)$$

と書くと、 $0 \leq k < 2\pi/a$ で、許される値が N を大きくするに従って詰まってゆく。半分周期をずらして、 $-\pi/a \leq k < \pi/a$ とするのが良い。

そこで、 $\hat{f}(k) \propto \hat{f}_n$ としたいが、内積を $\hat{f}(k), \hat{g}(k)$ に対し

$$\langle \hat{f}, \hat{g} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \hat{f}(k) \overline{\hat{g}(k)} \quad (2.24)$$

とするなら、

$$\hat{f}_n = \frac{1}{\sqrt{aN}} \hat{f}(k) \quad (2.25)$$

とすべきだ。同時に、

$$f(ja) = \frac{1}{\sqrt{a}} f_j \quad (2.26)$$

と定めて、内積が

$$\langle \vec{f}, \vec{g} \rangle = \sum_i \bar{f}_i g_i = a \sum_{x=ja} \overline{f(x)} g(x) =: \langle f, g \rangle \quad (2.27)$$

となっているようにする。するとフーリエ変換は

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \exp(ikx) \hat{f}(k) dk \quad (2.28)$$

また

$$\hat{f}(k) = a \sum_{x=ja} \exp(-ikx) f(x) \quad (2.29)$$

となる。これは、前節 2.3.1 で f と \hat{f} の役割をひっくり返しただけである。

2.3.3 極限操作 1+2

おしまいに、前々節 2.3.1 で箱のサイズ L を無限に広くする極限を考えたい。前節 2.3.2 で、格子のサイズ a を無限小にするとおっても同じだ。はっきりさせるため、後者を考えると、どれも自然に極限がとれる形になっていて、単に

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx) \hat{f}(k) dk \quad (2.30)$$

および

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx) f(x) dx \quad (2.31)$$

である。但し、内積は

$$\langle \hat{f}, \hat{g} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \overline{\hat{f}(k)} \hat{g}(k) \quad (2.32)$$

および

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \overline{f(x)} g(x) \quad (2.33)$$

で入っていて、構成より

$$\langle \hat{f}, \hat{g} \rangle = \langle f, g \rangle \quad (2.34)$$

すなわち f から \hat{f} への変換はユニタリだ。これが連続フーリエ変換である。

2.3.4 デルタ関数

前々節 2.3.2 で、特に

$$\delta_a(x) = \begin{cases} 1/a & x = 0 \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (2.35)$$

という場合を考える。 $\delta_a(x)$ は x が a の整数倍のところでは定義されていないことに注意。勝手な $g(x)$ に対して、

$$\langle \delta_a, g \rangle = a \sum_{x=ja} \overline{f(x)} g(x) = g(0) \quad (2.36)$$

である。 $\delta_a(x)$ の $a \rightarrow 0$ の極限を何らかの意味で取ったものを $\delta(x)$ と書くと

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) g(x) dx = g(0) \quad (2.37)$$

ということがわかる。特に

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (2.38)$$

しかし、

$$\langle \delta, \delta \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \delta(x) dx \quad (2.39)$$

は定義されない。 a がまだ有限のところでは

$$\langle \delta_a, \delta_a \rangle = 1/a \quad (2.40)$$

だが、これは $a \rightarrow 0$ で発散する。

数学的には超関数の理論を使えば良い。Laurent Schwarz (1945) による定式化は distribution という。非常にいい加減には、 $\delta(x)$ とは勝手な滑らかな関数 $f(x)$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0) \quad (2.41)$$

となる「何物か」である、と定義する。「何物か」は通常の間数ではないが、適切に意味を定められるということ。

Dirac が教科書に書いて導入したのは 1930 年。量子力学を数学的に厳密に、と普通言う際は δ 関数は長さが無限大だから状態空間のなかに入らない。それも数学的に厳密にしたいならゲルファント三つ組みというのがある。

(2.31) にいれて、 $\hat{\delta}$ は恒等的に 1。それを (2.30) にいれて、

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx)dk. \quad (2.42)$$

$$f(x) = \sum_j \delta(x - jL) \quad (2.43)$$

を考えるのも勉強になる。これは、 $x = jL$ のところに一個ずつデルタ関数がある。櫛みみたいなものだが、周期 L の周期関数だから、節 2.3.1 の考察がつかえて、(2.22) にいれると、 $\hat{f}_n = 1/L$ 。(2.21) にいれて、

$$\sum_j \delta(x - jL) = \frac{1}{L} \sum_n \exp\left(\frac{2\pi inx}{L}\right) \quad (2.44)$$

ということがわかった。

Gaussian のフーリエ変換もやっておこう。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2/2} dx = \sqrt{2\pi/a} \quad (2.45)$$

を思い出しておく。 $f(x) = e^{-ax^2/2}$ とすると、

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{-2\pi ikx} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{-k^2/a} \quad (2.46)$$

となる。デルタ関数は

$$\sqrt{\frac{a}{2\pi}} e^{-ax^2/2} \quad (2.47)$$

の $a \rightarrow \infty$ の極限と思っても良い。そのフーリエ変換は $e^{-k^2/a}$ で $a \rightarrow 0$ として、恒等的に 1 となる。

おまけ: ガウス積分をつかうと n 次元空間の中の単位超球面の超面積 A_n がわかる。

$$\pi^{n/2} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} \right)^n = A_n \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{n-1} dr = \frac{A_n}{2} \int_0^{\infty} e^{-s} s^{\frac{n}{2}-1} ds = \frac{A_n}{2} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right). \quad (2.48)$$

よって

$$A_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}. \quad (2.49)$$

というわけで

$$\begin{array}{c|ccccc} n & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \Gamma(n/2) & \sqrt{\pi} & 1 & \sqrt{\pi}/2 & 2 & 3\sqrt{\pi}/4 \\ A_n & 2 & 2\pi & 4\pi & 2\pi^2 & 8\pi^2/3 \end{array} \quad (2.50)$$

3 簡単な線形偏微分方程式

3.1 線形一階常微分方程式

まず有限次元ベクトル空間 V に値をとる関数 $\vec{v}(t) \in V$ に対して、方程式

$$\dot{\vec{v}} = A\vec{v}, \quad \text{すなわち} \frac{d\vec{v}(t)}{dt} = A\vec{v}(t) \quad (3.1)$$

を考える。ただし、簡単のため A はエルミートとする。これを解くにはどうするか？ユニタリ行列 U で

$$A = UDU^{-1} \quad D = \text{diag}(d_1, \dots, d_N) \quad (3.2)$$

なるものがあつた。 $\vec{w}(t) = U^{-1}\vec{v}(t)$ とすると

$$\dot{\vec{w}} = U^{-1}\dot{\vec{v}} = U^{-1}A\vec{v} = DU^{-1}\vec{v} = D\vec{w}. \quad (3.3)$$

これは対角だから、方程式は各成分に分解していて、

$$w_i(t) = e^{d_i t} w_i(0) \quad (3.4)$$

おなじことだが

$$\vec{w}(t) = e^{Dt}\vec{w}(0), \quad \text{但し} \quad e^{Dt} = \text{diag}(e^{d_1 t}, e^{d_2 t}, \dots, e^{d_n t}). \quad (3.5)$$

これより

$$\vec{v}(t) = Ue^{Dt}U^{-1}\vec{v}(0) \quad (3.6)$$

一般に、エルミート行列 A と、実数からの関数 $f(t)$ に対し、

$$f(A) := Uf(D)U^{-1}, \quad \text{但し} \quad f(D) = \text{diag}(f(d_1), f(d_2), \dots, f(d_n)) \quad (3.7)$$

と書くので、解は

$$\vec{v}(t) = e^{At}\vec{v}(0) \quad (3.8)$$

と書いてもよい。

(3.8) をまた別の言い方で述べよう。成分で書くと

$$v(t)_i = \sum_j (e^{At})_{ij} v(0)_j \quad (3.9)$$

である。これは、時刻 0 で j にあつた成分 $v(0)_j$ が、 t 立つた後 添え字 i に寄与する具合が $(e^{At})_{ij}$ であるということで、これを足し上げているわけ。

ここまでと同じことを別の言い方で述べる。(3.1) を解きたい。 A の互いに直交する固有ベクトル $\vec{\alpha}_i$ と固有値 d_i を知っているとする。特に $\vec{v}(0) = \vec{\alpha}_i$ のときは、目の子で

$$\vec{v}(t) = e^{d_i t} \vec{\alpha}_i \quad (3.10)$$

が解であることがわかる。線形だから、一般に $\vec{v}(0) = \sum c_i \vec{\alpha}_i$ ならば

$$\vec{v}(t) = \sum c_i e^{d_i t} \vec{\alpha}_i. \quad (3.11)$$

c_i を求めるには、 $\vec{v}(0)$ と $\vec{\alpha}_i$ の内積をもとめればよい:

$$(\vec{\alpha}_j, \vec{v}(0)) = (\vec{\alpha}_j, \sum_i c_i \vec{\alpha}_i) = |\vec{\alpha}_j|^2 c_j. \quad (3.12)$$

よって $c_j = (\vec{\alpha}_j, \vec{v}(0))/|\vec{\alpha}_j|^2$ 。これより

$$\vec{v}(t) = \sum e^{d_i t} \frac{(\vec{\alpha}_i, \vec{v}(0)) \vec{\alpha}_i}{|\vec{\alpha}_i|^2}. \quad (3.13)$$

$|\vec{\alpha}_i| = 1$ と規格化してあると、 U の成分 U_{ij} は $(\vec{\alpha}_i)_j$ だった。これを使うと、(3.6) と (3.13) は一致することが確認できる。

以下、いつでも対角化して、という方法と、固有ベクトルで展開して、という方法をとれるが、同値なので気分 whichever 片方だけ述べる。

3.2 実例

V を N 次元ベクトル空間として、方程式

$$\dot{\vec{f}} = k(S + S^{-1} - 2)\vec{f} \quad (3.14)$$

を考える。 S はユニタリ: $S^\dagger = S^{-1}$ だったので、 $S + S^{-1}$ はエルミートであることに注意せよ。 k は正とする。成分で書くと、

$$\dot{f}_i = k((f_{i+1} - f_i) + (f_{i-1} - f_i)). \quad (3.15)$$

$f_{i+N} = f_i$ という周期的条件をおいているのを思い出せ。これは、時間がたつと、両側から差に比例して流れ込んでくるという式。

解くには対角化すればいいが、 S の固有ベクトルは $\vec{\beta}_n, \beta_{nm} = e^{2\pi i m n / N} / \sqrt{N}$ で固有値が $e^{2\pi n / N}$ だったのを思い出そう。 $\vec{\beta}_n$ は $S + S^{-1} - 2$ の固有ベクトルでもあり、固有値は $2(\cos(2\pi n / N) - 1)$ でゼロか負。(というのが 2013 年の院試の数学の問題に出ました。正答率がとても低かったので、涙がでます。) それはおいておいて、

$$\vec{f} = \sum_n \hat{f}_n \vec{\beta}_n \quad (3.16)$$

と展開するのだったが、これより

$$\hat{f}_n(t) = \hat{f}_n(0) e^{-2k(1 - \cos 2\pi n / N)t}. \quad (3.17)$$

これを離散フーリエ変換して戻せば、 $f_n(t)$ が求まる。あからさまに書くと

$$f_m(t) = \frac{1}{N} \sum_n e^{2\pi i m n / N} e^{-2k(1 - \cos 2\pi n / N)t} \sum_{m'} e^{-2\pi i n m'} f_{m'}(0). \quad (3.18)$$

$t \rightarrow \infty$ とするとどうなるか? 指数関数の肩が負なら、消えてしまう。消えないのは丁度 $n = 0$ のときのみ。よって

$$\vec{f}(t \rightarrow \infty) = \hat{f}_0 \vec{\beta}_0 \quad (3.19)$$

成分で書くと、

$$f_i(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{N} \sum_j f_j(0) \quad (3.20)$$

ということで、平均化されるということ。

3.3 熱伝導方程式/拡散方程式

a を小さい刻み幅として、 $f(an) = f_n$ と定める。このとき、 $(S + S^{-1} - 2)\vec{f}$ は $f(x)$ に対しては $f(x+a) + f(x-a) - 2f(x) \sim a^2 f''(x)$ である。だから、前節の常微分方程式で適切に $N \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$ とすると、

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x) \quad (3.21)$$

となる。ただし、 $\kappa a^2 \rightarrow \kappa$ が有限の極限になるようにした。これを熱伝導方程式とか拡散方程式とか言う。 x は $-\infty$ から ∞ でも良いし、有限の区間でも良いし、いろいろ境界条件をつけてもよい。

まず、右辺の演算子 $\partial^2/\partial x^2$ がエルミートであることを確認しよう。(エルミート行列の極限操作でつくったから、エルミートなはずだが、極限操作を厳密にやらなかったので、別個確認しておくのがよい。) 内積は

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(x)} g(x) dx \quad (3.22)$$

だった。

$$\left(f, \frac{\partial^2}{\partial x^2} g\right) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} f, g\right) \quad (3.23)$$

を示せばよい。これは

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x) dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{f(x)}, \frac{\partial}{\partial x} g(x)\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{f(x)}, g(x)\right) dx \quad (3.24)$$

とすればよい。但し、無限遠で $f(x)$ の空間微分は充分はやくゼロになるとして、部分積分にともなう表面項を落とした。((d/dx)² の作用する関数の空間を、そのような無限遠での境界条件を満たすものにしておかないと、エルミートでない、ということもできる。)

だから、答えは

$$f(t, x) = e^{t\kappa \partial^2/\partial x^2} f(t=0, x) \quad (3.25)$$

である。間違いではないが、抽象的すぎてわからないので、具体的に書き下そう。両辺を x についてフーリエ変換すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{f}(t, k) = -\kappa k^2 \hat{f}(t, k) \quad (3.26)$$

これは十五年もやっていると途中経過なく出来てしまって、慣習は恐ろしいものだと思うが、まあ途中をかくと、

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{f}(t, k) = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(t, x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial t} f(t, x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x) dx \quad (3.27)$$

とやって、二回部分積分すると

$$= -\kappa k^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(t, x) dx = -\kappa k^2 \hat{f}(t, k). \quad (3.28)$$

これより、

$$\hat{f}(t, k) = e^{-\kappa k^2 t} \hat{f}(0, k) \quad (3.29)$$

よってもういちどフーリエ変換して

$$f(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} e^{-k^2 \kappa t} \hat{f}(0, k) \quad (3.30)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} e^{-k^2 \kappa t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iky} f(0, y) dy \quad (3.31)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} G(t; x, y) f(0, y) dy \quad (3.32)$$

ただし

$$G(t; x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} e^{-k^2 \kappa t} = \frac{1}{2\sqrt{\pi \kappa t}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4\kappa t}}. \quad (3.33)$$

$G(t; x, y)$ は、時刻 $t = 0$ に y にあった熱で時刻 t に x に行った分、とすることが出来る。特に、時刻 $t = 0$ の熱分布が $f(t = 0, x) = \delta(x - y_0)$ なら、 $f(t, x) = G(t; x, y)$ そのものである。こういうものを一般的に微分方程式のグリーン関数とよばれる。

ところで、この方程式は一瞬発つと無限遠まで(ちょっとだけではあるが)熱が伝わる。相対論に反する。

自由粒子のシュレーディンガー方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(t, x) \quad (3.34)$$

なので、拡散方程式で形式的に $\kappa = i\hbar/(2m)$ という純虚にしたもの。時間発展はよって (3.32) で

$$G(t; x, y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{-\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}}. \quad (3.35)$$

としたもの、特に、時刻 $t = 0$ で $\psi(0, x) = \delta(x)$ なら、時刻 $t > 0$ では確率振幅は $|G(t; x, y)|^2 = 1$ なので、全宇宙で等確率になる。

箱 $[0, L]$ での熱伝導方程式を考えよう。演算子 $(d/dx)^2$ のエルミート性の確認をもういちどしないといけないが、

$$\int_{-L}^L (\overline{f(x)}, \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x)) dx = +[\overline{f(x)}, \frac{\partial}{\partial x} g(x)]_{-L}^L - \int_{-L}^L (\frac{\partial}{\partial x} \overline{f(x)}, \frac{\partial}{\partial x} g(x)) dx \quad (3.36)$$

という操作をするところで、表面項を落とせるようにしておく必要がある。

- 周期的境界条件: f も g も、 $f(0) = f(L)$ を満たす。
- ディリクレ (Dirichlet) 境界条件: f も g も、 $f(0) = f(L) = 0$ を満たす
- ノイマン (Neumann) 境界条件: f も g も、 $f'(0) = f'(L) = 0$ を満たす

等なら大丈夫。 $x = 0$ でディリクレ、 $x = L$ でノイマン等でも良い。

周期的なら固有関数は e^{ikx} , $k = 2\pi n/L$ 。ディリクレなら $\sin(\pi n x/L)$ ノイマンなら $\cos(\pi n x/L)$ になる。

周期的の場合をかंगाえよう。ディリクレの場合は演習をとっているひとはそちらで問題が出ます。

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x) \quad (3.37)$$

で、 $0 \leq x \leq L$ で $f(t, 0) = f(t, L)$ とする。一般に解くのは書くのが面倒なので、 $f(t = 0, x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL)$ の場合を考える。

解き方 1:

$$f(t, x) = \sum_m \hat{f}_m(t) e^{2\pi i m x / L} \quad (3.38)$$

と展開すると、

$$\dot{\hat{f}}_m = -\kappa \left(\frac{2\pi m}{L} \right)^2 \hat{f}_m \quad (3.39)$$

であるので、

$$\hat{f}_m(t) = e^{-4\pi^2 \kappa m^2 t / L^2} \hat{f}_m(0). \quad (3.40)$$

$\hat{f}_m(0)$ は

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL) = \sum_m \hat{f}_m(0) e^{2\pi i m x / L} \quad (3.41)$$

から定まるが、両辺に $e^{-2\pi i m' x / L}$ をかけて、 x を 0 から L まで積分すると $f_m(0) = 1/L$ 。よって、

$$f(t, x) = \frac{1}{L} \sum_m e^{-4\pi^2 \kappa m^2 t / L^2} e^{2\pi i m x / L} \quad (3.42)$$

となる。

解き方 2: 周期的でないときの解はしっているので、重ね合わせれば良い。よって

$$f(t, x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{\pi \kappa t}} e^{-\frac{(x-nL)^2}{4\kappa t}}. \quad (3.43)$$

(3.42) と (3.43) が一致するのは不思議だけれどそういうもの (Poisson resummation formula という。) この無限和はこれ以上簡単にならない。これが実質楕円テータ関数という特殊関数の定義である:

$$\theta(z, \tau) = \sum_{\ell} e^{2\pi i \ell z + \pi i \tau \ell^2} \quad (3.44)$$

(このあたりからしばらくシラバス外。) よって

$$f(t, x) = \frac{1}{L} \theta\left(\frac{x}{L}, \frac{4\pi \kappa t i}{L^2}\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi \kappa t}} e^{-x^2 / (4\kappa t)} \theta\left(-\frac{Li}{4\pi \kappa t}, \frac{L^2 i}{4\pi \kappa t}\right) \quad (3.45)$$

一般に

$$\theta(z, \tau) = (\tau/i)^{-1/2} e^{-\pi i z^2 / \tau} \theta(z/\tau, -1/\tau) \quad (3.46)$$

という公式がある。楕円、というのは、

$$\theta(z+1, \tau) = \theta(z, \tau), \quad \theta(z+\tau, \tau) = e^{-2\pi i z - \pi i \tau} \theta(z, \tau) \quad (3.47)$$

でほぼ二重周期だから。

記法は本によって混乱していて、

$$\theta(z, \tau) = \theta_{00}(z, \tau) = \theta_3(z, \tau) \quad (3.48)$$

これを $\theta(z, q)$ と書くこともある、ただし昔は $q = e^{\pi i \tau}$ 最近は (すくなくとも純粋数学および弦理論では) $q = e^{2\pi i \tau}$ 。Mathematica はまだ前者の定義。

$$\theta_0(z, \tau) = \theta\left(z + \frac{1}{2}, \tau\right), \quad \theta_1(z, \tau) = e^{\pi i z + \pi i \tau / 4} \theta\left(z + \frac{1}{2} + \frac{\tau}{2}, \tau\right) \quad (3.49)$$

とすると、

$$\operatorname{sn}(x, k) = \frac{1}{\sqrt{k}} \frac{\theta_1\left(\frac{x}{2K}, i\frac{K'}{K}\right)}{\theta_0\left(\frac{x}{2K}, i\frac{K'}{K}\right)}. \quad (3.50)$$

3.4 ポアソン方程式

次に三次元空間で与えられた $\rho(x, y, z)$ に対し

$$\Delta V(x, y, z) = -\rho(x, y, z) \quad (3.51)$$

を解くことをかんがえる、但し Δ はラプラシアン。

有限次元の場合は、単に

$$A\vec{v} = \vec{c} \quad (3.52)$$

を解け、といわれると、

$$\vec{v} = A^{-1}\vec{c} \quad (3.53)$$

とするだけ。もうすこしあからさまに書くと、 A がエルミートなら、固有ベクトル $\vec{\alpha}_i$ と固有値 d_i を知っているの、 $\vec{c} = \sum c_i \vec{\alpha}_i$ と展開すれば、

$$\vec{v} = \sum_i \frac{c_i}{d_i} \vec{\alpha}_i \quad (3.54)$$

となる。

まずは $\Delta G(\vec{x}) = -\delta(\vec{x})$ から考えよう、但し $\delta(\vec{x}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$ 。これがわかれば、 $\Delta(\vec{x} - \vec{x}_0) = -\delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$ で、一般の $\rho(\vec{x})$ はこれの重ね合わせだから、解は

$$V(x) = \iiint d^3y G(\vec{x} - \vec{y}) \rho(\vec{y}) \quad (3.55)$$

とかける。

$\Delta G(\vec{x}) = -\delta(\vec{x})$ を解くには、両辺をフーリエ変換して、

$$-|\vec{k}|^2 \hat{G}(k) = -1 \quad (3.56)$$

よって $\hat{G}(k) = 1/|\vec{k}|^2$ 。フーリエ変換で戻すと、

$$G(\vec{x}) = \iiint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \frac{1}{|\vec{k}|^2} \quad (3.57)$$

$$= \int_{K=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \frac{dK(Kd\theta)(K \sin \theta d\phi)}{(2\pi)^3} e^{irK \cos \theta} \frac{1}{K} \quad (3.58)$$

$$= \int_{K=0}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{irK} (e^{irK} - e^{-irK}) dK \quad (3.59)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \frac{1}{4\pi r}. \quad (3.60)$$

確認:

$$\iiint d^3x \rho(\vec{x}) = -\iiint d^3x \Delta G(\vec{x}) = \iiint d^3x \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{x}}{r} \frac{1}{4\pi r^2} = \iint d\vec{n} \cdot \frac{-\vec{x}}{r} \frac{1}{4\pi r^2} = 1. \quad (3.61)$$

3.5 線形二階常微分方程式

さて、今度は、

$$\ddot{\vec{v}} = A\vec{v} \quad (3.62)$$

を考える。前と同様対角化すると、

$$\ddot{\vec{w}} = D\vec{w} \quad (3.63)$$

であるから、成分ごとに分解するので、

$$\ddot{w}(t) = d_s w(t) \quad (3.64)$$

が解ければそれで出来上がりである。 $(s = 1, \dots, N)$ これは $d_s < 0$ のときは、 $\omega_s = \sqrt{|d_s|}$ として二つの独立解は $e^{\pm i\omega_s t}$, もしくは $\cos \omega_s t, \sin \omega_s t$ と言っても良い。であるから、 $w(0)$ と $\dot{w}(0)$ を与えると解ける。

具体的に、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, x) = v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x) \quad (3.65)$$

を考えてみよう。 $f(0, x)$ と $\dot{f}(0, x)$ が与えられたとして、 $f(t, x)$ はどうなるか？

両辺を x に関してフーリエ変換して、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{f}(t, k) = -v^2 k^2 \hat{f}(t, k) \quad (3.66)$$

これの一般解は

$$\hat{f}(t, k) = \hat{c}_L(k) e^{ivkt} + \hat{c}_R(k) e^{-ivkt} \quad (3.67)$$

である。 $\hat{c}_{L,R}(k)$ は

$$\hat{f}(0, k) = \hat{c}_L(k) + \hat{c}_R(k), \quad (3.68)$$

$$\dot{\hat{f}}(0, k) = ivk(\hat{c}_L(k) - \hat{c}_R(k)) \quad (3.69)$$

を連立させれば決まる。 k から x にフーリエ変換して戻すと

$$f(t, x) = \int \frac{dk}{2\pi} (\hat{c}_L(k) e^{ivkt} + \hat{c}_R(k) e^{-ivkt}) e^{ikx} \quad (3.70)$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} \hat{c}_L(k) e^{ik(x+vt)} + \int \frac{dk}{2\pi} \hat{c}_R(k) e^{ik(x-vt)} \quad (3.71)$$

$$=: f_L(x+vt) + f_R(x-vt). \quad (3.72)$$

f_L は左へ速さ v で、 f_R は右へ速さ v で動く波をあらわす。

こううまくいったのは、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial}{\partial t} - v \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (3.73)$$

と因数分解できたから。

三次元の波動方程式だところまで綺麗にはならないが、同様に調べられる。すなわち、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, \vec{x}) = v^2 \Delta f(t, \vec{x}) \quad (3.74)$$

を \vec{x} に関してフーリエ変換すると、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{f}(t, \vec{k}) = -v^2 |\vec{k}|^2 \hat{f}(t, \vec{k}) \quad (3.75)$$

よって一般解は

$$\hat{f}(t, k) = \hat{c}_+(\vec{k}) e^{iv|\vec{k}|t} + \hat{c}_-(\vec{k}) e^{-iv|\vec{k}|t} \quad (3.76)$$

フーリエ変換で戻すと

$$f(t, \vec{x}) = \iiint \frac{d^3k}{(2\pi)^3} (\hat{c}_+(\vec{k})e^{iv|\vec{k}|t} + \hat{c}_-(\vec{k})e^{-iv|\vec{k}|t})e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (3.77)$$

だが、これ以上一般には簡単にならない。

$$e^{i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (3.78)$$

と書くと、

$$\omega = \pm v|\vec{k}| \quad (3.79)$$

というのが重要。こういうのを分散関係という。

この関係式は時間方向にもフーリエ変換して考えても導出できる。

$$f(t, \vec{x}) = \iiint \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tilde{f}(\omega, \vec{k}) \quad (3.80)$$

とすると、

$$0 = \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v^2 \Delta \right) f(t, \vec{x}) \quad (3.81)$$

$$= \iiint \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}} (-\omega^2 + v^2|\vec{k}|^2) \tilde{f}(\omega, \vec{k}) \quad (3.82)$$

であるので、 $\tilde{f}(\omega, \vec{k})$ は $\omega = \pm v|\vec{k}|$ でないとノンゼロになれない。

一次元だけれど空間方向には離散的なのを考えても面白い。

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, x) = \frac{v^2}{a^2} (f(t, x+a) + f(t, x-a) - 2f(x)) \quad (3.83)$$

ただし $f(t, x)$ は x が a の整数倍のところしか定まっていないとする。前回やったように、

$$f(t, x) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \hat{f}(t, k) e^{ikx}, \quad \hat{f}(t, k) = a \sum_{x=ja} e^{-ikx} f(x) \quad (3.84)$$

というフーリエ変換だった。 $\hat{f}(t, k)$ の方程式は

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{f}(t, k) = -\frac{v^2}{a^2} 2(1 - \cos ka) \quad (3.85)$$

だから、一般解は

$$\hat{f}(t, k) = c_L(k) e^{i\omega t + ikx} + c_R(k) e^{-i\omega t + ikx} \quad (3.86)$$

ただし

$$\omega = \pm \frac{v}{a} \sqrt{2(1 - \cos ka)} \quad (3.87)$$

k が小さければ、展開して $\omega \sim \pm vk$ となる。波長が長いので、格子がみえない。波長が短いと、格子の影響がみえる。 k の最大は $\pm\pi/a$ だったから、 \cos の引数はちょうど π までゆく。

4 ラプラシアンと直交関数系

これまでフーリエ変換を用いて偏微分方程式を解くことを学んだ。関数を e^{ikx} で展開するのは無限に広いばあいや周期的境界条件のとき適切で、一次元で境界条件がディリクレやノイマンのときは e^{ikx} をすこし組み合わせた $\sin kx$ や $\cos kx$ で展開できる。

二次元や三次元のために、考えたい領域が長方形や直方体のときならこれらを組み合わせて $e^{ik_x x} \sin k_y y \sin k_z z$ 等で $k_{x,y,z}$ を適切に選べば展開することが出来るが、しばしば考えたい領域は円盤だったり円筒だったり球対称だったりする。そういうときはどうすればよいか、というのを考えよう。

4.1 ラプラシアンのエルミート性

一次元の場合は既にやったが、次元が高い場合に一般的にどうなるかを考えよう。領域 X があって、その境界を B とする。 X 内の関数 f に対して、 $\Delta f = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} f$ がラプラシアン。関数 f, g に対して内積は

$$(f, g) = \int_X \overline{f(\vec{x})} g(\vec{x}) d^3x \quad (4.1)$$

と定めよう。(二次元の領域の場合は d^3x を d^2x にかえるだけで、その他の式変形は全くおなじです。) 確かめたいのは

$$(\Delta f, g) = (f, \Delta g) \quad (4.2)$$

である。そこで、まず

$$(\Delta f, g) = \int_X \overline{\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x})} g(\vec{x}) d^3x \quad (4.3)$$

$$= - \int_X \overline{\vec{\nabla} f(\vec{x})} \cdot \vec{\nabla} g(\vec{x}) d^3x + \int_B \overline{\vec{\nabla} f(\vec{x})} g(x) \cdot d\vec{n}, \quad (4.4)$$

と

$$(f, \Delta g) = \int_X \overline{f(\vec{x})} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} g(\vec{x}) d^3x \quad (4.5)$$

$$= - \int_X \overline{\vec{\nabla} f(\vec{x})} \cdot \vec{\nabla} g(\vec{x}) d^3x + \int_B \overline{f(\vec{x})} \vec{\nabla} g(x) \cdot d\vec{n}, \quad (4.6)$$

を考えると、

$$(\Delta f, g) - (f, \Delta g) = \int_B \left(\overline{\vec{\nabla} f(\vec{x})} g(x) - \overline{f(\vec{x})} \vec{\nabla} g(x) \right) \cdot d\vec{n} \quad (4.7)$$

である。これがゼロになってほしい。方策はいろいろあるが、

- X は無限に広いので、 B は無限遠、そこでは f, g とも充分早く小さくなっていると思う。
- X は何らかの意味で周期的になっているので、そもそも境界 B は無い。一次元で周期的だとか、 X は地球表面やら天球全体の場合もそうである。
- 境界 B では Δ の作用する関数 f, g は 0。(ディリクレ条件)
- 境界 B では Δ の作用する関数 f, g は $\vec{\nabla} f = \vec{\nabla} g = 0$ を満たす。(ノイマン条件)

こういう条件のどれかを満たすときは、ラプラシアン Δ はエルミートであるので、固有関数系が取れ、互いに直交し、勝手な関数はそれらで展開できる。

また、実関数 $V(\vec{x})$ を考えれば、当然

$$(f, Vg) = (Vf, g) \quad (4.8)$$

なので、「 $V(\vec{x})$ を掛ける」という演算子もエルミート。エルミート演算子を二つ足してもエルミートなので、

$$\Delta + V(\vec{x}) \quad (4.9)$$

という演算子も (境界条件を適切に選んであれば) エルミートになる。よって、固有関数系がとれ、それらは互いに直交する。

このように、ラプラシアンを解析する際には直交関数系がしばしばあらわれる。

4.2 一例: 円板内のラプラシアン

実例として、二次元で円板内 $x^2 + y^2 \leq R^2$ でラプラシアンを考えたいと思う。 $x + iy = re^{i\theta}$ として極座標 r, θ を導入すると、

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (4.10)$$

円板上で定まった関数を $f(x, y) = f(r, \theta)$ と書こう。(数学的には、二つの実数から一つの複素数を定める関数としては違うので、 $f(x, y) = \underline{f}(r, \theta)$ とか別の記法を使ったほうがいいと思うかもしれないが、物理では慣習として同じ記号を使う。)

θ 方向には周期 2π なので、勝手な関数は

$$f(r, \theta) = \sum_m F_m(r) e^{im\theta} \quad (4.11)$$

と展開出来る。ただし m は全ての整数をわたる。一項とりだして

$$F_m(r) e^{im\theta} \quad (4.12)$$

を考えると、上記ラプラシアンは

$$F_m(r) e^{im\theta} \mapsto \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) F_m(r) e^{im\theta} \quad (4.13)$$

と作用する。一般論から、

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \quad (4.14)$$

という演算子はエルミートで、直交固有関数系をもつ。ここでエルミートと言う際、 $f(r)$ と $g(r)$ の内積は

$$(f, g) := \int_0^R \overline{f(r)} g(r) r dr \quad (4.15)$$

であって、単に dr を掛けて積分ではなくて $r dr$ を掛けて積分になっている。これは、もともと積分の重みが $dx dy$ だったものを $r dr d\theta$ と極座標にして、 $d\theta$ 方向を先に積分してしまったので $r dr$

になっている。エルミート性を直接確認しておくのも悪くない:

$$(f, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} g) = \int_0^R \bar{f} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} g r dr \quad (4.16)$$

$$= \int_0^R \bar{f} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} g dr \quad (4.17)$$

$$= - \int_0^R (\frac{\partial}{\partial r} \bar{f} \frac{\partial}{\partial r} g) r dr + [r \bar{f} \frac{\partial}{\partial r} g]_0^R \quad (4.18)$$

より、 $r=0$ での境界項は r の因子でよほどのことがない限り消え、 $r=R$ でディリクレもしくはノイマンであればそちらの境界項は消える。これよりエルミート性がわかった。

新年にやるように、具体的には固有関数はベッセル関数で書ける。もうすこしだけ言っておくと、固有値を $-k^2$ とすると

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} + k^2 \right] f(r) = 0 \quad (4.19)$$

$s = kr$ とすると

$$\left[\frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} s \frac{\partial}{\partial s} - \frac{m^2}{s^2} + 1 \right] f(s) = 0 \quad (4.20)$$

これを Bessel の微分方程式という。二階の微分方程式だからふたつ独立な解をもつ。原点でなめらかなものを $J_m(s)$ という。 $J_m(s)$ の i 個目の零点を $\tau_{m,i}$ と書こう:

$$J_m(\tau_{m,i}) = 0, \quad 0 < \tau_{m,1} < \tau_{m,2} < \tau_{m,3} < \dots \quad (4.21)$$

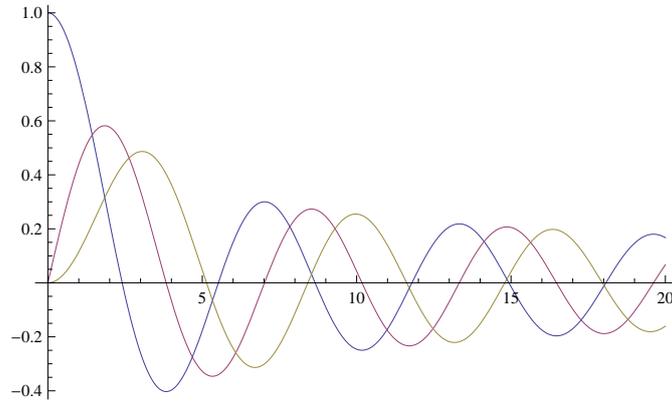


図 1: Bessel 関数 $J_0(x)$, $J_1(x)$ と $J_2(x)$

$r = R$ でゼロというディリクレ境界条件を課すなら、 $J_m(kR) = 0$ より $k = \tau_{m,i}/R$ 。よって

$$J_m\left(\frac{\tau_{m,i}}{R} r\right) e^{im\theta}, \quad m = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots; \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

が固有関数系。

4.3 一例: 球面上のラプラシアン

同様に、球面上のラプラシアンを考える。これは、三次元のラプラシアンを球座標で書いておいて r の項を落とせば求まるが、導出は後回し。

$$\Delta = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{(\sin \theta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (4.23)$$

で与えられる、ただし θ が天頂角 (0 から π) で ϕ が方位角 (0 から 2π)。 (方位角: azimuthal angle、天頂角: polar angle、天頂: zenith、天底: nadir)

球面には境界はないので、 Δ は文句無くエルミート。固有関数を球面調和関数と言う。 ϕ 方向は 2π 周期なので、まず

$$f(\theta, \phi) = \sum_m F_m(\theta) e^{im\phi} \quad (4.24)$$

と展開できる。但し m は勝手な整数。 $F_m(\theta)$ に対してはラプラシアンは

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{m^2}{(\sin\theta)^2} \quad (4.25)$$

ではたらく。 $z = \cos\theta$ を導入する。(これは球面を半径 1 で三次元空間に埋め込んだとおもえば、本当に z 座標) すると固有値問題は

$$\left(\frac{d}{dz} (1-z^2) \frac{d}{dz} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) f(z) = -\alpha f(z) \quad (4.26)$$

ただし $-\alpha$ が固有値。一般論より、左辺の演算子は区間 $-1 \leq z \leq 1$ でエルミートだから、固有関数が離散無限個あって、それで展開できるはず。

移項して

$$\left(\frac{d}{dz} (1-z^2) \frac{d}{dz} - \frac{m^2}{1-z^2} + \alpha \right) f(z) = 0 \quad (4.27)$$

を Legendre の微分方程式 ($m=0$) もしくは陪微分方程式 ($m \neq 0$) と呼ぶ。陪は英語では associated だから大した単語ではない。日本語ではほかに陪審員にぐらいしか使わないのでは?

$-1 \leq z \leq 1$ で連続な解は l を $|m|$ 以上の整数として $\alpha = l(l+1)$ ごとにひとつのみある。その時、固有関数は不思議なことに z の多項式 (かける $(1-z^2)^{m/2}$) になる。それを $P_m^l(z)$ と書き、ルジャンドルの (陪) 多項式と言う。

さかのぼると、球面上のラプラシアンの固有関数は

$$P_{|m|}^l(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad m = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots; \quad l = |m|, |m+1|, \dots \quad (4.28)$$

で、固有値は $\alpha = -l(l+1)$ 。ひとつ固有値 l を決めると、 $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ まで $2l+1$ 個 ϕ 依存性の異なる固有関数がある。これは授業の最終回に回転群の立場から別の説明をする。

4.4 ラプラシアンの直交曲線座標での表示について

ラプラシアンを球座標に変換するのは面倒な練習問題として大学初年時で出てくるのではないかと思うが、エルミート性を確認する際に途中にでてきた式をつかうと比較的に簡単にできる。すなわち、境界条件が適切に課してあれば

$$(f, \Delta g) = -(\vec{\nabla} f, \vec{\nabla} g) = - \int \overline{\vec{\nabla} f} \cdot \vec{\nabla} g d^3x \quad (4.29)$$

であるが、たとえば球座標においては微小長さは

$$ds^2 = dr^2 + (r d\theta)^2 + (r \sin\theta d\phi)^2 \quad (4.30)$$

であたえられるので、

$$d^3x = (dr)(r d\theta)(r \sin\theta d\phi) = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \quad (4.31)$$

また $\vec{\nabla}f$ も、考えている点 (r, θ, ϕ) で $dr, d\theta, d\phi$ に沿った座標系で測れば

$$\vec{\nabla}f = \left(\frac{\partial}{\partial r}f, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}f, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}f \right)^t \quad (4.32)$$

である。よって、(4.29) の右辺はこの場合は

$$\begin{aligned} & - \int \left(\frac{\partial}{\partial r}\bar{f}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}\bar{f}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}\bar{f} \right) \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r}g \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}g \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}g \end{pmatrix} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ & = \int \bar{f} \left(\frac{\partial}{\partial r}r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{1}{r} r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{1}{r \sin \theta} r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) g dr d\theta d\phi \end{aligned} \quad (4.33)$$

一方、(4.29) の左辺は

$$\int (\bar{f} \Delta g) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (4.34)$$

であるので、比較して

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{(\sin \theta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (4.35)$$

がわかった。

一般に、直交座標系 (s_1, s_2, s_3) で微小長さが $s_{1,2,3}$ の関数 $n_{1,2,3}(s_1, s_2, s_3)$ を用いて

$$ds^2 = (n_1 ds_1)^2 + (n_2 ds_2)^2 + (n_3 ds_3)^2 \quad (4.36)$$

であらわされるならば、上記導出を繰り返せばラプラシアンは

$$\Delta = \frac{1}{n_1 n_2 n_3} \left(\frac{\partial}{\partial s_1} \frac{n_2 n_3}{n_1} \frac{\partial}{\partial s_1} + \frac{\partial}{\partial s_2} \frac{n_3 n_1}{n_2} \frac{\partial}{\partial s_2} + \frac{\partial}{\partial s_3} \frac{n_1 n_2}{n_3} \frac{\partial}{\partial s_3} \right) \quad (4.37)$$

で与えられる。他の次元でもほとんど同様。

4.5 Sturm-Liouville 型微分方程式

以上の議論から、もうすこし一般に以下の状況でかんがえてみよう。一次元で、区間 $[a, b]$ 上での関数のなす線形空間を考える。場合に応じて a は $-\infty$, b は ∞ も許すことにする。内積は非負の $\rho(x)$ という重み関数をつかって

$$(f, g) = \int_a^b \overline{f(x)} g(x) \rho(x) dx \quad (4.38)$$

と定めよう。ここで、エルミート演算子 L を

$$(f, Lg) = \int_a^b \left(-\overline{f'(x)} g'(x) p(x) - f(x) g(x) q(x) \right) dx \quad (4.39)$$

で定めよう。部分積分をすれば、適切な境界条件があるので境界項が落とせるとして

$$(f, Lg) = \int_a^b \overline{f(x)} \left(\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) g(x) dx \quad (4.40)$$

であるので、 L は (4.38) と比較して

$$L = \frac{1}{\rho(x)} \left(\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) \quad (4.41)$$

とわかった。これはエルミートだから、固有値を $-\lambda$ とすると固有関数を定める方程式は

$$\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} f(x) - q(x) f(x) = -\lambda \rho(x) f(x) \quad (4.42)$$

と書ける。ここで固有値を $-\lambda$ と書くのは、(4.39) で $p(x), q(x)$ が非負の関数ならば

$$(f, Lf) \leq 0 \quad (4.43)$$

となるので、固有値は非負になるからである。(4.42) を Sturm-Liouville 型の微分方程式と言う。

これまで出てきた例では、Bessel の微分方程式 (4.19) は区間 $r \in [0, R]$ で

$$p(r) = r, \quad q(r) = \frac{m^2}{r}, \quad \rho(r) = r \quad (4.44)$$

また Legendre の (陪) 微分方程式 (4.27) は区間 $z \in [-1, 1]$ で

$$p(z) = 1 - z^2, \quad q(z) = \frac{m^2}{1 - z^2}, \quad \rho(z) = 1 \quad (4.45)$$

としたもので、両者とも Sturm-Liouville 型。固有関数達は直交関数系をなす。Bessel 関数の場合は多項式にはならないが、Legendre の微分方程式の場合は多項式になる。

- 二階の一変数微分方程式を考えるのは、物理でやる色々な微分方程式は大抵二階で、それを変数分離して出てくるから。
- 直交関数系になるのは、物理でやる色々な微分方程式は変分原理から出てくるので大抵エルミートだから。
- 答えが多項式になる物理的背景はよくわからないが、時々多項式になる。

Sturm-Liouville 型の方程式の解を調べる方法はいろいろある。たまたま直交多項式系になるばあいは、直交多項式の理論を使える。これを次にやる。 $p(x), q(x), \rho(x)$ が複素平面上の有理関数で、特異点の数があまり多くなければ、(合流型) 超幾何関数の理論をつかって調べることが出来る。これはその次にやる。どちらでも無い場合でも、いろいろ一般論があっている性質がわかる。たとえば、 $p(x), q(x), \rho(x)$ が全て非負ならば、固有関数を固有値の絶対値の小さい順にならべて $f_n(x)$ ($n = 0, 1, \dots$) と呼ぶと、 $f_n(x)$ は n 個の零点を持つ。こういう一般論は時間が多分ないのでやらない。

5 直交多項式系

5.1 一般の直交多項式系

一般に、直交多項式は区間とその上の重み関数 $\rho(x)$ を与えると決まる。すなわち、内積が

$$(f, g) = \int_a^b \overline{f(x)} g(x) \rho(x) dx \quad (5.1)$$

で与えられているとき、関数列

$$1, x, x^2, x^3, \dots \quad (5.2)$$

に Schmidt の直交化法を適用すればよい。どういうことかということ、 $Q_n(x)$ が n 次式で、

$$(Q_n, Q_m) = \delta_{mn} c_n \quad (5.3)$$

というものをつくりたいとする。但し、簡単のため

$$Q_n(x) = x^n + (\text{低次の項}) \quad (5.4)$$

と規格化することにした。 $\sqrt{c_n}$ で割って $(Q_n, Q_n) = 1$ と規格化することも可能。また、 $Q_n(a) = 1$ と規格化することもある。

まず、 $Q_1(x) = 1$ とすると、

$$(Q_1, Q_1) = c_1 = \int_a^b \rho(x) dx \quad (5.5)$$

と定まる。つぎからは、帰納的に、

$$Q_n(x) = x^n - \sum_{i=0}^{n-1} k_{n,i} Q_i(x) \quad \text{但し } k_{n,i} = (x^n, Q_i) \quad (5.6)$$

とすれば自動的に

$$(Q_n, Q_m) = 0, \quad n > m \quad (5.7)$$

となる。

例として、区間を $[-1, 1]$ 、重み関数を単に 1 とする。規格化は $P_n(1) = 1$ としよう。まず、

$$P_0(x) = 1 \quad (5.8)$$

である。つぎに、

$$P_1(x) = cx + c' \quad (5.9)$$

とすると、 $P_0(x)$ を掛けて積分するとゼロだから $c' = 0$ 。規格化すると

$$P_1(x) = x. \quad (5.10)$$

つぎに

$$P_2(x) = cx^2 + c'x + c'' \quad (5.11)$$

とする。 $c' = 0$ とすると $P_1(x)$ との内積はゼロになる。 $P_0(x)$ との内積をゼロにするには

$$\int_{-1}^1 (cx^2 + c'') dx = 0 \quad (5.12)$$

より $c/3 + c'' = 0$, $P_2(1) = 1$ より

$$P_2(x) = \frac{(3x^2 - 1)}{2}. \quad (5.13)$$

$P_3(x)$ は

$$P_3(x) = cx^3 + c'x \quad (5.14)$$

区間	名前	$\rho(x)$	$Q(x) = p(x)/\rho(x)$
$[-1, 1]$	Jacobi	$(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$	$1-x^2$
$[-1, 1]$	Legendre	1	$1-x^2$
$[-1, 1]$	陪 Legendre	$(1-x^2)^m$	$1-x^2$
$[0, \infty)$	Laguerre	e^{-x}	x
$[0, \infty)$	陪 Laguerre	$x^\alpha e^{-x}$	x
$(-\infty, \infty)$	Hermite	e^{-x^2}	1
$ x = 1$	Bessel	$e^{-2/x}$	x^2

表 1: 古典直交多項式。Jacobi では $\alpha, \beta > -1$ 。陪 Legendre は $(1-x^2)^{m/2}$ で割ったもの。陪 Laguerre では $\alpha > -1$ 。Bessel 多項式というのは、Bessel 関数とは関係あるがそれぞれのもではないので注意。

と奇関数に取っておくと $P_{0,2}$ とは自動的に直交。 P_1 との内積は

$$\int_{-1}^1 (cx^3 + c'')x dx = 0 \quad (5.15)$$

より $c/5 + c''/3 = 0$ 。よって

$$P_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{2} \quad (5.16)$$

というふうに順々に決めていける。これらは実は Legendre 多項式そのものであって、微分方程式

$$\left(\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx} + \alpha\right)P_n(x) = 0, \quad \alpha = n(n+1) \quad (5.17)$$

を満たすことが (この段階では具体的に $n = 0, 1, 2, 3$ について) 確認できる。

5.2 古典直交多項式系

Sturm-Liouville 型の微分方程式の固有関数系をなす直交多項式系というのは実は分類されている。まず、一次元の区間というのは、両側が有限か、片側が無限か、両側が無限か、円周か、という分類をする。適切に座標変換をすると、それぞれ、区間 $[-1, 1]$ 、 $[0, \infty)$ 、 $(-\infty, \infty)$ 、 $|x| = 1$ と取れる。その上で、Sturm-Liouville 型微分方程式 (4.42) で、 $q(x)$ はいつもゼロに取れて、さらに適切に変数変換をすれば、表 1 で尽きる。これで尽きるというのは、Bochner という人が示した (Über Sturm-Liouvillesche Polynomsysteme, Math. Z. 29 (1929) 730-736 ([オンライン版にリンク](#))) 数学的議論は簡単なので、ドイツ語選択のひとは読んでみると勉強になる。

これらの多項式は統一的に扱えるが、まずエルミート多項式について具体的にやってから、一般論を述べよう。

5.3 エルミート多項式の場合

5.3.1 多項式性

まず、天下一りに

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} \quad (5.18)$$

と定義する。これは微分を展開する様子を頭の中で思い浮かべれば、 n 次多項式であることがわかる。

$$H_n(x) = 2^n x^n + \text{低次の項} \quad (5.19)$$

となる。具体的には、

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = -2 + 4x^2, \quad H_3(x) = -12x + 8x^3, \quad \dots \quad (5.20)$$

5.3.2 直交性

つぎに、直交性をしめす。区間は $(-\infty, \infty)$ で重み関数は e^{-x^2} 。

$$(H_n, H_m) = 0 \quad n \neq m \quad (5.21)$$

を示したいが、 $n > m$ に関しては

$$(H_n, x^m) = 0 \quad (5.22)$$

を示せば充分だ。(なぜなら、 H_m は $m' < m$ についての $x^{m'}$ の線形結合だから。) さて、

$$(H_n, x^m) = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} (x^m e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}) e^{-x^2} dx = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} x^m \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2} dx \quad (5.23)$$

である。 n 階部分積分をすると、 $m < n$ だと消えてしまう。これで (5.22) が示された。 $m = n$ のときは

$$= n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = n! \sqrt{\pi} \quad (5.24)$$

となる。(5.19) より

$$(H_n, H_n) = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (5.25)$$

がわかった。

5.3.3 微分方程式

上記 $H_n(x)$ がある二階微分方程式の固有関数系であることを示す。微分演算子は

$$(f, Lg) = \int_{-\infty}^{\infty} (-f'(x)g'(x))e^{-x^2} dx \quad (5.26)$$

を考える。部分積分をすれば、

$$L = \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \quad (5.27)$$

である。

まず、 LH_n は明らかに高々 n 次多項式である。 $m < n$ に対し $H_m(x)$ と左辺 LH_n の内積は

$$(H_m, LH_n) = (LH_m, H_n) = 0 \quad (5.28)$$

である。 $(LH_m$ は高々 m 次式であるのに注意せよ。) よって、何か λ_n があって

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx}\right)H_n(x) = -\lambda_n H_n(x) \quad (5.29)$$

である。 λ_n は両辺の x^n の係数を調べればわかる。 $H_n(x) = c_n x^n + \dots$ とすると、

$$\text{左辺} = -2nc_n, \quad \text{右辺} = -\lambda_n c_n \quad (5.30)$$

より $\lambda_n = -2n$ 。

5.3.4 母関数

まず

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^n f(x) = \frac{n!}{2\pi i} \oint dz \frac{f(z)}{(z-x)^{n+1}} \quad (5.31)$$

であった。すると、

$$\sum_n H_n(x) \frac{y^n}{n!} = \frac{1}{2\pi i} e^{x^2} \oint \frac{1}{z} \left(1 - \frac{y}{z-x} + \frac{y^2}{(z-x)^2} + \dots\right) e^{-z^2} dz \quad (5.32)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} e^{x^2} \oint \frac{1}{z-x+y} e^{-z^2} dz \quad (5.33)$$

$$= e^{x^2} e^{-(x-y)^2} = e^{2xy-y^2}. \quad (5.34)$$

5.3.5 漸化式

母関数

$$\sum_n H_n(x) \frac{y^n}{n!} = e^{2xy-y^2} \quad (5.35)$$

の両辺を y 微分すると

$$\sum_n H_n(x) \frac{y^n}{n!} = (2x-2y)e^{2xy-y^2} = \sum_n (2xH_n(x) \frac{y^n}{n!} - 2H_n(x) \frac{y^{n+1}}{n!}) \quad (5.36)$$

両辺の $y^n/n!$ の係数を比較して

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \quad (5.37)$$

また、母関数 (5.35) の両辺を x 微分すると

$$\sum_n H'_n(x) \frac{y^{n-1}}{(n-1)!} = 2ye^{2xy-y^2} = \sum_n 2H_n(x) \frac{y^{n+1}}{n!} \quad (5.38)$$

であるので、 $y^n/n!$ の係数を比較して

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (5.39)$$

がわかった。

5.4 一般の場合

表 1 に載っている直交多項式について一般的に扱おう。(方針は一緒だが、個別の計算も各所で必要になる。もっとうまくできることがわかった学生さんは是非僕に教えてください。) 内積は

$$(f, g) = \int_a^b \overline{f(x)}g(x)\rho(x)dx \quad (5.40)$$

であり、対応する二階微分演算子は

$$(f, Lg) = - \int_a^b \overline{f'(x)}g'(x)p(x)dx \quad (5.41)$$

すなわち

$$L = \frac{1}{\rho(x)} \frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} = Q(x) \frac{d^2}{dx^2} + R(x) \frac{d}{dx} \quad (5.42)$$

である、ただし

$$Q(x) = \frac{p(x)}{\rho(x)}, \quad R(x) = \frac{p'(x)}{\rho(x)} \quad (5.43)$$

である。 $Q(x)$ はたかだか二次、 $R(x)$ は一次の多項式であることに注意。

5.4.1 多項式の定義

Rodrigues (ロドリゲス) の公式

$$f_n(x) = \frac{1}{\rho(x)} \left(\frac{d}{dx} \right)^n (\rho(x) Q(x)^n) \quad (5.44)$$

によって $f_n(x)$ を定義する。この $f_n(x)$ は n 次多項式になる。これは、表 1 のそれぞれについて別箇に確認しないとイケないと思う。

例えば、ヤコビの多項式の場合は

$$f_n(x) = \frac{1}{(1-x)^\alpha (1+x)^\beta} \left(\frac{d}{dx} \right)^n [(1-x)^{\alpha+n} (1+x)^{\beta+n}] \quad (5.45)$$

$$= \sum_k \frac{1}{(1-x)^\alpha (1+x)^\beta} \binom{n}{k} \left(\frac{d}{dx} \right)^{n-k} (1-x)^{\alpha+n} \left(\frac{d}{dx} \right)^k (1+x)^{\beta+n} \quad (5.46)$$

等から確認できる。

5.4.2 直交性

$(f_n, f_m) = 0$ を $n > m$ について示すには、 $(x^m, f_n) = 0$ を示せばよい。まず

$$\int_a^b x^m f_n(x) \rho(x) dx = \int_a^b x^m \left(\frac{d}{dx} \right)^n [\rho(x) Q(x)^n] \quad (5.47)$$

$$= \left[x^m \left(\frac{d}{dx} \right)^{n-1} (\rho(x) Q(x)^n) \right]_a^b - n \int_a^b x^{m-1} \left(\frac{d}{dx} \right)^{n-1} [\rho(x) Q(x)^n] \quad (5.48)$$

ここで $\rho(x)$ は端で落ちるように選んでいるので、境界項はゼロ、よって繰り返して

$$= (-1)^m m! \int_a^b \left(\frac{d}{dx} \right)^{n-m} [\rho(x) Q(x)^n] \quad (5.49)$$

となる。よって、 $n > m$ ならゼロ。 $n = m$ のときはノンゼロなので、

$$f_n(x) = k_n x^n + (\text{低次の項}) \quad (5.50)$$

として

$$(f_n, f_n) = (-1)^n n! k_n \int_a^b Q(x)^n \rho(x) dx \quad (5.51)$$

となる。この右辺はやっぱり個別に計算しないとイケないと思う。

5.4.3 微分方程式を満たすこと

式 (5.42) の L に対し

$$Lf_n(x) = -\lambda_n f_n(x) \quad (5.52)$$

であることを示す。まず、式 (5.42) において $Q(x)$ は二次、 $R(x)$ は一次だから、 Lf_n はたかだか n 次多項式。よって

$$Lf_n = \sum_{m=0}^n c_m f_m(x) \quad (5.53)$$

と展開できる。 c_m をよみとるには、

$$(f_m, Lf_n) = c_m (f_m, f_m) \quad (5.54)$$

とすればよいが、右辺は (Lf_m, f_n) だから $m < n$ ならゼロ。よって $m < n$ なら $c_m = 0$ 、よって

$$Lf_n = -c_n f_n(x) \quad (5.55)$$

固有値 c_n を決定するには x^n の係数を比較すればよく、

$$c_n = -qn(n-1) - r, \quad (5.56)$$

ただし q は $Q(x)$ の x^2 の係数、 r は $R(x)$ の x^1 の係数。

5.4.4 母関数

(母関数の英語は generating function という。一方、行列は matrix (母体) の訳語。) 微分を留数積分であらわすと、

$$\sum_n f_n(x) \frac{y^n}{n!} = \frac{1}{\rho(x)} \frac{1}{2\pi i} \oint \sum_n \frac{y^n Q(z)^n}{(z-x)^{n+1}} \rho(z) dz \quad (5.57)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\rho(z)}{z-x-yQ(z)} dz =: g(x, y) \quad (5.58)$$

ここで

$$\frac{1}{a-b} = \frac{1}{a} + \frac{b}{a^2} + \frac{b^2}{a^3} + \dots \quad (5.59)$$

を使った。この周回積分は個別にやらざるを得ない。

5.4.5 漸化式

母関数

$$g(x, y) = \sum_n f_n(x) \frac{y^n}{n!} \quad (5.60)$$

の両辺を x で微分して比較すると、 $f'_n(x)$ を $f_{n'}$ で表す式が得られる。また、両辺を y で微分して比較すると、 $f_n(x)$ を $f_{n\pm 1}$ で表す式が得られる。このあたりはやはり個別にやらないといけない。

5.5 ルジャンドル(陪)関数

5.5.1 ルジャンドル関数

この場合は区間は $[-1, 1]$ 、 $\rho(x) = 1$ 、 $Q(x) = 1 - x^2$ から $R(x) = -2x$ 。一般論から f_n とさだめると

$$f_n(x) = \frac{d^n}{dx^n} (1 - x^2)^n = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} x^n + \dots \quad (5.61)$$

これは

$$\left[(1-x)^2 \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + n(n+1) \right] P_n(x) = 0 \quad (5.62)$$

を満たす。

$$(f_n, f_n) = \frac{(2n)!}{n!} \int_{-1}^1 (1-x^2)^n dx = \frac{(2n)!}{n!} \frac{n!n!}{(2n+1)!} 2^{2n+1} = 2 \frac{(2^n n!)^2}{2n+1} \quad (5.63)$$

となる。ここでベータ積分の公式をつかった。

普通は

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (1-x^2)^n \quad (5.64)$$

を使う、こうしておくと $P_n(1) = 1$ となるので。すると

$$(P_n, P_n) = \frac{2}{2n+1} \quad (5.65)$$

である。

母関数は

$$\sum_n P_n(x) y^n = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z-x+\frac{y}{2}(1-z^2)} dz = -\frac{2}{y} \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{(z-z_+)(z-z_-)} \quad (5.66)$$

ただし

$$z_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{1-2xy+y^2}}{y} \quad (5.67)$$

である。 $|y| \ll 1$ なら、 $|z_+| \gg 1$ で $z_- \sim x$ なので、留数は z_- のところを拾う。というわけで

$$= -\frac{2}{y} \frac{1}{z_- - z_+} = \frac{1}{\sqrt{1-2xy+y^2}} \quad (5.68)$$

となる。

両辺を y で微分して

$$\sum_n n P_n(x) y^{n-1} = \frac{x-y}{1-2xy+y^2} g \quad (5.69)$$

よって

$$(1-2xy+y^2) \sum_n n P_n(x) y^{n-1} = (x-y) \sum_n P_n(x) y^n \quad (5.70)$$

この y^n の項を比較すると

$$(2n+1)xP_n(x) = (n+1)P_{n+1}(x) + nP_{n-1}(x) \quad (5.71)$$

がわかる。

同様に x で微分してがんばって変形してやると、

$$(1-x)^2 P_n'(x) - (n+1)xP_n(x) = -(n+1)P_{n+1}(x) \quad (5.72)$$

を導くことも出来るが面倒なのでタイプしない。

5.5.2 ルジャンドル陪関数

ルジャンドル陪微分方程式は

$$\left[(1-x)^2 \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + \lambda' - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^m(x) = 0 \quad (5.73)$$

というもの。これを解くにはいろいろの方法がある。まず、 $P_l^m(x) = \sqrt{1-x^2}^m A_l^m(x)$ と書いて A_l^m の方程式を書くと、 $\lambda' = \lambda + m(m+1)$ として

$$\left[(1-x)^2 \frac{d^2}{dx^2} - 2(m+1)x \frac{d}{dx} + \lambda \right] A_l^m(x) = 0 \quad (5.74)$$

となるが、これは一般論で $\rho(x) = (1-x^2)^m$, $Q(x) = (1-x^2)$ としたもの。これより、対応する $f_n(x)$ は固有値

$$\lambda_n = n(n-1) + 2(m+1)n \quad (5.75)$$

を持つ。 $\lambda'_n = (m+n)(m+n+1)$ となる。 $m+n$ を l と書くのが通常なので、

$$A_l^m(x) = f_{l-m}(x) = \frac{1}{(1-x^2)^m} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l-m} (1-x^2)^l \quad (5.76)$$

とすればよい。

もうひとつの方法は、ルジャンドル微分方程式 (5.62) の両辺を微分してしまう方法で、

$$\left[(1-x)^2 \frac{d^2}{dx^2} - 2(m+1)x \frac{d}{dx} + l(l+1) - m(m+1) \right] \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = 0 \quad (5.77)$$

がえられるので、定数倍をのぞいて

$$A_l^m(x) \propto \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+m} (1-x^2)^l \quad (5.78)$$

となっている。

通常の見方はこの後者をもちいて、

$$P_l^m(x) = \sqrt{1-x^2}^m \frac{(-1)^n}{2^n n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+m} (1-x^2)^l \quad (5.79)$$

とするもの。この式では $-l \geq m < 0$ まで拡張することができるが、そうやっても実は

$$P_l^m(x) \propto P_l^{-m}(x) \quad (5.80)$$

となることが知られている。

5.6 ラゲール (陪) 多項式

あとは同じことの繰り返しなのでどんどん略する。 $Q(x) = x$, $\rho(x) = e^{-x}$ なので $R(x) = 1-x$ 、よって

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} [x^n e^{-x}] \quad (5.81)$$

で、

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = 0 \quad (5.82)$$

を満たすことがわかる。母関数は

$$\sum_n L_n(x) \frac{y^n}{n!} = \frac{e^x}{2\pi i} \oint dz \frac{e^{-z}}{z - x - zy} = \frac{1}{1-y} e^{-\frac{xy}{1-y}} \quad (5.83)$$

ラゲール陪微分方程式は $\rho(x)$ を $x^m e^{-x}$ にかえたもので、

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (1+m-x) \frac{d}{dx} + n \right] f_n(x) = 0 \quad (5.84)$$

ただし

$$f_n(x) = x^{-m} e^x \frac{d^n}{dx^n} [x^{m+n} e^{-x}] \quad (5.85)$$

である。これは、(5.82) の両辺を m 回微分してもよく、

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (1+m-x) \frac{d}{dx} + (n-m) \right] \frac{d^m}{dx^m} L_n(x) = 0 \quad (5.86)$$

となる、すなわち

$$f_{n-m}(x) \propto L_{n+m}^m(x) := \frac{d^m}{dx^m} L_{n+m}(x). \quad (5.87)$$

これから

$$x^{-m} e^x \frac{d^n}{dx^n} [x^{m+n} e^{-x}] \propto \frac{d^m}{dx^m} e^x \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} [x^n e^{-x}] \quad (5.88)$$

のはずである。

まとめると、

名前	$Q(x)$	$\rho(x)$	
ルジャンドル	$1-x^2$	1	$P_l(x)$
ルジャンドル陪	$1-x^2$	$(1-x^2)^m$	$\frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$
ラゲール	x	e^{-x}	$L_n(x)$
ラゲール陪	x	$x^m e^{-x}$	$\frac{d^m}{dx^m} L_n(x)$
エルミート	1	e^{-x^2}	$H_n(x)$
エルミート陪?	1	e^{-x^2}	$\frac{d^m}{dx^m} H_n(x)$

ということである、エルミート陪関数が無いのは (5.39) でやったように $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$ だから。

これと表 (1) を見比べると、同様に Bessel 陪多項式というのがあって良い気がするが、ちゃんと考えていない。もしかすると Bochner の定理の僕の理解が間違っていて、重み $x^{2m} e^{-2/x}$ のものがあるのかもしれない。

6 複素平面上の微分方程式について

まずこれまでと別の一般論を学んで、Bessel 関数をそれによって解析したあと、Legendre 多項式についてこの方法でも見てみる。

6.1 用語の定義

複素平面上で

$$f''(z) + A(z)f'(z) + B(z)f(z) = 0 \quad (6.1)$$

という微分方程式を考えよう。但し $A(z), B(z)$ は有理関数で、 $f(z)$ は (分岐をもつ) 解析関数として探すものとする。 $z = a$ で $A(z)$ や $B(z)$ に極があることがある。 $z = a$ で $A(z)$ の極が一位まで、 $B(z)$ の極が二位までなら、 $z = a$ を確定特異点 (regular singularity) という。 $A(z)$ の極が a 位、 $B(z)$ の極が b 位なら、 $z = a$ は $\max(a, b/2)$ 位の不確定特異点 (irregular singularity) という。 r 位の不確定特異点は確定特異点を r 個ぶつけたもの。

$z = a$ のあたりで複素数 α を用いて $f(z) \sim (z-a)^\alpha$ だと、一度微分するとだいたい $1/(z-a)$ かかるから、 $A(z)$ はだいたい $1/(z-a)$ ぐらい、 $B(z)$ は $1/(z-a)^2$ ぐらいであろう、というのが確定特異点の感覚で、もっと悪いのが不確定特異点。

通常 $z = \infty$ も付け加えて、球面上で問題を考える。 $z = \infty$ で微分方程式を解析するには、 $w = 1/z$ とおき、 $g(w) = f(1/z)$ とすると、上記微分方程式は

$$g''(w) - (w^{-2}A(\frac{1}{w}) - \frac{2}{w})g'(w) + w^{-4}B(\frac{1}{w})g(w) = 0 \quad (6.2)$$

となるので、これが $w = 0$ で (不) 確定特異点であるかどうかを以て $z = \infty$ で (不) 確定特異点であるかを定める。

6.2 例

例えば、ルジャンドルの微分方程式は

$$(1-z^2)f''(z) - 2zf'(z) + cf(z) = 0 \quad (6.3)$$

より

$$f''(z) - \frac{2z}{1-z^2}f'(z) + \frac{c}{1-z^2}f(z) = 0 \quad (6.4)$$

そこで $z = \pm 1$ に確定特異点がある。 $z = \infty$ では、

$$g''(w) - (-w^{-2}\frac{2/w}{1-1/w^2} - \frac{2}{w})g'(w) + \frac{1/w^4}{1-1/w^2}cg(w) = 0 \quad (6.5)$$

より $z = \infty$ も確定特異点。同様に調べれば、ヤコビの微分方程式もみつつ確定特異点。

$$\begin{array}{ccc} \bullet & \bullet & \bullet \\ -1 & 1 & \infty \end{array}$$

一方、ラゲールの微分方程式は

$$zf''(z) + (1-z)f'(z) + cf(z) = 0 \quad (6.6)$$

すなわち

$$f''(z) + \frac{1-z}{z}f'(z) + \frac{c}{z}f(z) = 0 \quad (6.7)$$

より $z = 0$ が確定特異点、また $z = \infty$ では

$$g''(w) + (\frac{2}{w} - \frac{1}{w^2}\frac{1-1/w}{1/w})g'(w) + \frac{c}{w^4}g(w) = 0 \quad (6.8)$$

より位数二の不確定特異点である。

$$\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet\bullet \\ 0 \quad \infty \end{array}$$

ベッセルの微分方程式はこちらになる。

どちらにせよ、ここまでは特異点は(合流したものを考えると) みっつである。みっつ確定特異点があるものを超幾何 (hypergeometric) 微分方程式、超幾何関数と呼ぶ。ふたつの確定特異点をひとつの不確定特異点に合流させたものを合流型 (confluent) 超幾何関数という。みっつとも合流させて、位数三の不確定特異点をひとつだけもつ微分方程式も考えられる:

$$f''(z) + zf'(z) = 0. \quad (6.9)$$

これは エアリ (Airy) の微分方程式、解はエアリ関数と言う。

$$\begin{array}{c} \bullet\bullet\bullet \\ \infty \end{array}$$

ここまでの微分方程式は徹底的に調べられているから、知りたければ文献を探せば知りたいことはかならず載っている。

四つ確定特異点のあるばあいはホイン (Heun) の微分方程式、

$$\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ 0 \quad 1 \quad q \quad \infty \end{array}$$

合流させて、二つ確定、一つ位数二の不確定特異点があるばあいはマチウ (Mathieu) の微分方程式、という。

$$\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet\bullet \\ 0 \quad 1 \quad \infty \end{array}$$

ここまできると文献も減ってくる。

6.3 確定特異点まわりの解析

さて、具体的に解をもとめることを考えよう。二階の微分方程式を考えているから、ふたつ線形独立な解があるはずである。 $z = a$ が特異点でなければ、 $f(z)$ と $f'(z)$ をあたえると、唯一に解が定まる。

$z = a$ が確定特異点であるとする。簡単のため $x = z - a$ と定めると、微分方程式は $x = 0$ の非常に近くでは

$$f''(x) + \frac{p}{x}f'(x) + \frac{q}{x^2}f(x) = 0 \quad (6.10)$$

と近似できる。

$$f(x) \sim x^\alpha \quad (6.11)$$

という形で解の $x = 0$ の近傍があらわされるとすると、上式に代入して整理すれば

$$\alpha(\alpha - 1) + p\alpha + q = 0 \quad (6.12)$$

を得る。二つの根を α_\pm と書く。これは一般には複素数である。この方程式を $z = a$ での決定方程式 (indicial equation) という。

方程式は近似をしないと

$$f''(x) + A(x)f'(x) + B(x)f(x) = 0 \quad (6.13)$$

だった。これに

$$f_{\pm}(x) = x^{\alpha_{\pm}}(1 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + \dots) \quad (6.14)$$

を代入して、 x の同じべきの項を整理すると、多くの場合 c_1, c_2, \dots を順に決定していける。

- 正整数 n に対して $\alpha_+ = \alpha_- + n$ の場合は $f_-(x)$ の決定の際に c_n のところでゼロで割らないといけなくなって破綻する。
- そもそも $\alpha_+ = \alpha_-$ の場合は、ひとつしか解がとまらない。

これらの場合は、もうひとつの解は複素数べきでは済まず、

$$\underline{f}_-(x) = f_+(x) \log x + x^{\alpha_-}(c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots) \quad (6.15)$$

の形のものが取れることが知られているが、時間がないので講義ではやらない。

以下、主にべき展開でもとまったものに対して性質を考える。 $x = 0$ まわりでは、 α が整数のときは一価関数だけれど、 α の値によっては分岐線が $x = 0$ から出ることがわかる。また、べき級数の収束半径はいくつなのかが気になる。これは、具体的に場合に応じて調べることもできるが、複素関数は理由がなければ発散しないという原理から、一番近い別の特異点に当たるまでは収束することが保証されている。

6.4 Bessel 関数の場合

Bessel の微分方程式は

$$\left[\frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{m^2}{z^2} + 1 \right] f(z) = 0 \quad (6.16)$$

だった。展開すると

$$f''(z) + \frac{1}{z} f'(z) - \left(\frac{m^2}{z^2} - 1 \right) f(z) = 0 \quad (6.17)$$

である。これまでは m は整数だったが、一般の場合も考えよう。

すでに調べたが、 $z = 0$ が確定特異点、 $z = \infty$ が位数 2 の不確定特異点である。というわけで、 $z = 0$ まわりで調べるのが簡便。決定方程式は

$$\alpha(\alpha - 1) + \alpha - m^2 = 0 \quad (6.18)$$

より、 $\alpha_{\pm} = \pm m$ である。 $|m|$ が整数のときは $\alpha_+ - \alpha_-$ が正の整数になって、片方 \log のまざった解になる。

簡単のため、 \log の交ざらない解のみ考察しよう。これは

$$f(z) = z^m(a_0 + a_1z + \dots) \quad (6.19)$$

として、代入して z^{m-2+n} の係数をみると

$$a_n[(m+n)(m+n-1) + (m+n) - m^2] + a_{n-2} = 0 \quad (6.20)$$

から

$$a_n = -\frac{a_{n-2}}{n(n+2m)} \quad (6.21)$$

となる。これより $a_{\text{奇数}}$ は全てゼロにとれて、

$$a_{2n} = (-1)^n \frac{a_0}{4^n n!(m+1)\cdots(m+n)} \quad (6.22)$$

となる。この式は、 m が負の整数のときは $a_{2|m|}$, すなわち $x^{-|m|}(\cdots + a_{2m}x^{2|m|} + \cdots)$ の係数を決定するところで破綻する。これが上で言った微妙な場合に相当する。

というわけで、 m が負の整数でなければ解がもたまった。 $a_0 = (2^m m!)^{-1}$ とするのが慣習で、結果を

$$J_m(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!(m+n)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{m+2n} \quad (6.23)$$

と書く。一般論より、これは全平面で収束。 m が整数でない場合は、 $(m+n)!$ は Γ 関数をつかって $\Gamma(m+n+1)$ と解釈する必要がある。 m が負の整数のばあいは、 $J_{-m}(z) = (-1)^m J_m(z)$ と定めるのが標準的である。これは Γ 関数が負の整数では ∞ になっていると思って上式を無理矢理評価したものに自然になっている。

整数 m の場合のベッセル関数の母関数をもとめよう。

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(z)t^m = \sum_m \sum_n \frac{(-1)^n}{n!(m+n)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{m+2n} t^m \quad (6.24)$$

であるが、ベキの部分を

$$\left(\frac{z}{2}\right)^{m+2n} t^m = \left(\frac{zt}{2}\right)^{m+n} \left(\frac{z}{2t}\right)^n \quad (6.25)$$

と分解すると、

$$\sum_m J_m(z)t^m = \left[\sum_{m+n} \frac{1}{(m+n)!} \left(\frac{zt}{2}\right)^{m+n} \right] \left[\sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{-z}{2t}\right)^n \right] = \exp\left(\frac{r}{2}\left(t - \frac{1}{t}\right)\right) \quad (6.26)$$

とわかった。

これは、 $t = e^{i\theta}$ と書くと、ちょっと整理すると

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(r)e^{im\theta} = e^{ir\sin\theta} = e^{iy} \quad (6.27)$$

ということ、ただし $x + iy = re^{i\theta}$ とした。先週だけに、そもそもベッセルの微分方程式はラブラシアン固有関数を極座標で表した際に出てくるもので、勝手な関数をまず

$$f(r, \theta) = \sum_m F_m(r)e^{im\theta} \quad (6.28)$$

と展開して $F_m(r)$ のほうに定まる方程式だ、と言ったが、そもそも e^{iy} というあからさまにラブラシアン固有関数であるものを、 θ 方向にフーリエ展開したものが $J_m(r)$ だということ。

m が整数でない場合は ν と書くことが多い。このとき、 $J_\nu(z)$ と $J_{-\nu}(z)$ は一次独立だが、 m が整数のときは一次従属である。この際、もうひとつの解は、まず一般に

$$N_\nu(z) = \frac{1}{\sin \nu\pi} [(\cos \nu\pi)J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)] \quad (6.29)$$

と定めておいて、 ν を整数にもっていく極限を取ること得られる。ド・ロピタルの定理¹を使って

$$N_m(z) = \frac{1}{\pi} [\partial_\nu J_\nu(x) - (-1)^m \partial_\nu J_{-\nu}(x)]_{\nu=m}. \quad (6.30)$$

これを Neumann 関数という。 $\nu = m$ が整数のときの $z \sim 0$ での振舞は、 $\sim z^{-m}$ の項と、 $\sim \partial_\nu z^\nu$ の項から $z^m \log z$ の項が出る。

¹ド・ロピタルは、ヨージン・ベルヌーイに金を払って彼の最新の発見を教えて貰って、それを教科書に書いたら、そこにあった例の定理にド・ロピタルの名前がついたそう。しかし、本にもきちんとベルヌーイに教えて貰った、と書いてあるそう。以上、Wikipedia の受け売りで、真偽は確認していない。

6.5 Legendre 多項式のばあい

方程式は

$$f''(z) - \frac{2z}{1-z^2}f'(z) + \frac{c}{1-z^2}f(z) = 0 \quad (6.31)$$

である。これまでの議論で、 $c = l(l+1)$ のときのみ多項式解 $P_l(z)$ があって、 $[-1, 1]$ で直交多項式系をなすことを知っている。この c に関する条件を今学んだ方法でも導いてみたい。

$z = \pm 1$ が確定特異点である。 $z \rightarrow -z$ で方程式は対称なので、 $z = 1$ でまずしらべれば、 $z = -1$ でも同様。 $z = 1$ での決定方程式は

$$\alpha(\alpha - 1) + \alpha = 0 \quad (6.32)$$

より $\alpha = 0$ で重根。これより、これまでの一般論から、

$$f(z) \sim 1 + ?(z-1) + ?(z-1)^2 + \dots \quad (6.33)$$

の形の解と、

$$f(z) \sim \log(z-1) + ? + ?(z-1) + ?(z-1)^2 + \dots \quad (6.34)$$

という解があることが判る。 $z = \pm 1$ での多項式型の解を $A_{\pm}(z)$, log 型の解を $B_{\pm}(z)$ とする。どちらも一次独立だから、

$$A_+(z) = \kappa(c)A_-(z) + \lambda(c)B_-(z) \quad (6.35)$$

となるはず。ただし、 $\kappa(c)$, $\lambda(c)$ は c による線形結合の係数。たまたま $\lambda(c)$ がゼロになるような c において、 $z = 1$, $z = -1$ においてどちらにも log のない解になる。

この場合、 $A_+(z) \propto A_-(z)$ は無限遠点を除いて特異点の無い関数になる。無限遠点でも確定特異点だから、自動的に多項式になってしまう。このとき c はいくつか？

無限遠点 $w = 1/z = 0$ での決定方程式は

$$\alpha(\alpha - 1) - c = 0 \quad (6.36)$$

なので、 $c = n(n+1)$ と (この時点では n は勝手な複素数だが) パラメタ付けすると $\alpha = -n, 1+n$ であるので無限遠で $f(w) \sim w^{-n}$ すなわち $f(z) \sim z^n$ と振る舞う。これが多項式の最高ベキであるには、 n は非負整数。というわけで、非負整数 n に対し $c = n(n+1)$ のときのみルジャンドルの微分方程式は多項式解をもつ。

もっと具体的には、微分方程式に直接

$$f(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + \dots \quad (6.37)$$

を代入して、整理すると、

$$(i+2)(i+1)a_{i+2} = ((i+1)i - c)a_i \quad (6.38)$$

となる。これより、 a_0 から決めていくもしくは a_1 から決めていくことができるが、これが多項式になって有限項でおわるには、ある i に対して $c = (i+1)i$ でないといけない。このおしまいの方法は非常に簡単で、これだけをやるには一般論はいらないのだが、考え方を知るという意味で一般論をやった。

さて、 l が整数のときでも、ルジャンドルの微分方程式自体にはふたつ独立解がある。これまでの一般論から、 l が整数のときは、特に、解は $z = \pm 1$ の両方で log 的にふるまうはずである。こ

これらの解は通常 $Q_l(z)$ と書かれる。これの一般論をやってもいいのだが、僕自身しらないので、公式集を写すと

$$Q_l(z) = \frac{1}{n!2^n} \frac{d^n}{dz^n} \left[(z^2 - 1)^n \log \frac{z+1}{z-1} \right] - \frac{1}{2} P_n(z) \log \frac{z+1}{z-1}. \quad (6.39)$$

たとえば、

$$Q_0(z) = \frac{1}{2} \log \frac{z+1}{z-1} \quad (6.40)$$

で、これが上記 Legendre 微分方程式 (6.31) で $c = l(l+1) = 0$ の場合を満たすのを確認するのはたやすい。

しかし、これを $[-1, 1]$ 上の (適切な関数の空間を選んだ上で、その上の) エルミート演算子

$$L = (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} = \frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{d}{dx} \quad (6.41)$$

の固有関数だと思うのはまずい。まず内積は

$$(f, g) = \int_{-1}^1 \overline{f(x)} g(x) dx \quad (6.42)$$

であった。この積分は、 $f(x), g(x)$ に $x \sim 1$ で $\log(1-x)$ 的振舞を許しても、

$$\int_{\text{どこか}}^1 [\log(1-x)]^2 dx \quad (6.43)$$

は $x \sim 1$ のあたりで収束するので、ここには問題がない。しかし、演算子 L のエルミート性を示す際に、

$$\int_{-1}^1 \overline{f(x)} Lg(x) dx = [\overline{f(x)}(1-x^2)g'(x)]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 (1-x^2) \overline{f'(x)} g'(x) dx \quad (6.44)$$

となって、右辺第一項の部分積分の境界項を落とさないといけませんが、その際に $x \sim 1$ で $\log(x-1)$ 的な項を $f(x), g(x)$ 双方に許すと、境界項が発散することがわかる。

6.6 超幾何関数、を調べる前の前置き

超幾何関数とは複素平面 (+無限遠点) 上で三点確定特異点を持つような微分方程式の一般解のこと。これについてすこし学んでおこう。

まず、二点確定特異点を持つものはどんなものだろうか？ 確定特異点が $z=0, z=\infty$ にあるとすると、方程式は

$$f''(z) + \frac{a}{z} f'(z) + \frac{b}{z^2} f(z) = 0 \quad (6.45)$$

なので、決定方程式 $\alpha(\alpha-1) + a\alpha + b = 0$ の根 α_{\pm} が重根でなければ、単に $z^{\alpha+}, z^{\alpha-}$ が独立解である。重根の場合 $\alpha = \alpha_{\pm}$ も、 $z^{\alpha}, z^{\alpha} \log z$ が解であるのはすぐわかる。直接解であるのを確かめても良いが、 $\epsilon \neq 0$ のとき

$$z^{\alpha}, z^{\alpha+\epsilon} \quad (6.46)$$

の二つが独立解だったとして、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取る前に、独立解の基底を

$$z^{\alpha}, (z^{\alpha+\epsilon} - z^{\epsilon})/\epsilon \quad (6.47)$$

と取り直しておく。こうすると、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限でも一次独立な二つの解

$$z^{\alpha}, z^{\alpha} \log z \quad (6.48)$$

が得られた。また、この場合は、正整数 n に対して $\alpha_+ - \alpha_- = n$ であっても \log はまざらない。

そもそも、なぜ $z = 0, z = \infty$ の二点において解析するので充分なんだろうか？ $z = z_0, z = z_1$ という一般の場合を調べなくてもよいのか？ これについては、複素平面 (+無限遠点) の構造についてもうちょっと勉強しておくのが良い。

まず、無限遠 $z = \infty$ という概念はちょっとわかりにくいので、 z 平面のみならず w 平面を導入して、 $w = 1/z$ と同一視をすることにしよう。すると、 z 平面上の $z = 0$ 以外の全ての点は w 平面上にもあって、 w 平面上の $w = 0$ 以外の全ての点は z 平面上にもある。この様子を絵に描くと、球面が出来て、 $z = 0$ が北極、 $w = 0$ が南極になる。これを複素射影平面と言う。以下、しかし面倒くさいので、 $w = 0$ のことは $z = \infty$ と書くことにし、単に球面と呼ぶ。(記号の意味を付けるのは科学においてはあなた/われわれの勝手であるから、こう決めるということ。)

さて、唐突ではあるが写像

$$z \mapsto z + a \quad (6.49)$$

を考える。これは北極 $z = 0$ を $z = a$ に動かすが、 $z = \infty$ は動かさない。球面から球面へ、一対一の、正則関数である。また、

$$z \mapsto az \quad (6.50)$$

を考える。これは、北極、南極を動かさない、球面から球面へ、一対一の、正則関数である。さらに、

$$z \mapsto \frac{z}{1+az} \quad (6.51)$$

というのを考えてみると、北極 $z = 0$ は固定するが、南極 $z = \infty$ を $z = 1/a$ に動かす。ちょっと考えると、球面から球面へ、一対一の、正則関数である。

一般に、球面から球面へ、一対一の、正則関数は、かならず

$$z \mapsto \frac{az + b}{cz + d}, \quad \det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \neq 0 \quad (6.52)$$

と書けることが知られている。これを一次分数変換という。

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} ka & kb \\ kc & kd \end{pmatrix} \quad (6.53)$$

としても定まる変換は変わらない

$$z \mapsto \frac{az + b}{cz + d} = \frac{kaz + kb}{kcz + kd} \quad (6.54)$$

ので、 k を適切に選んで

$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = 1 \quad (6.55)$$

と取ることも多い。以下、

$$\rho_C(z) = \frac{az + b}{cz + d}, \quad C = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (6.56)$$

と書くことにする。やってみると、

$$\rho_C(\rho_D(z)) = \rho_{CD}(z), \quad C = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix} \quad (6.57)$$

であることがわかるので、 2×2 行列が何故か球面に作用していると思える。

さて、球面上に三点 $z = z_0, z = z_1, z = z_2$ があつたとすると、適切に ρ_C を選んで、

$$\rho_C(0) = z_0, \quad \rho_C(1) = z_1, \quad \rho_C(\infty) = z_2 \quad (6.58)$$

と出来る。まず、いい加減な理解は、 z_0, z_1, z_2 で複素みつつ、実でむつつ自由度がある。一方で、 ρ_C には、行列要素 a, b, c, d 複素数よつに条件 (6.55) でひとつ減って、複素みつつ、実むつつ自由度がある。だから、式むつつに変数むつつなので、一般には解があるはずである。ちゃんと証明するには、 C を具体的につくればよい、そんなに難しくないので興味のあるひとはやってみると良い。

さて、微分方程式

$$f''(z) + A(z)f'(z) + B(z)f(z) = 0 \quad (6.59)$$

をかんがえているのだつた。ここで、座標 z を

$$z = \rho_{C^{-1}}(w), \quad w = \rho_C(z) \quad (6.60)$$

と変換して、

$$f(z) = g(w), \quad g(w) = f(\rho_{C^{-1}}(w)) \quad (6.61)$$

としよう。 $g(w)$ の方程式にがんばって書き換えると、

$$g''(w) + \tilde{A}(w)g'(w) + \tilde{B}(w)g(w) = 0 \quad (6.62)$$

となる。 $\tilde{A}(w)$ と $\tilde{B}(w)$ はややこしいが、頑張ればもとまる。

ここで重要なことは、 $A(z), B(z)$ が $z = z_0$ で指数 α_{\pm} の確定特異点をもつなら、 $\tilde{A}(w), \tilde{B}(w)$ は $w = w_0 = \rho_C(z_0)$ でおなじ指数 α_{\pm} の確定特異点を持つ、ということである。証明は、 $\tilde{A}(w), \tilde{B}(w)$ をがんばって計算してもとめても良いが、もっと簡単に納得するには次のようにやる。まず、 $z = z_0$ で指数 α_{\pm} の確定特異点をもつなら、そこでの解は局所的には

$$f(z) \sim (z - z_0)^{\alpha_{\pm}} \quad (6.63)$$

である。これを ρ_C で写すと、

$$g(w) \sim c_{\pm}(w - w_0)^{\alpha_{\pm}} \quad (6.64)$$

ただし c_{\pm} は定数、というのが $g(w)$ の微分方程式の $w = w_0$ での局所解になる。よってそこは指数 α_{\pm} の確定特異点になる。

以上より、いま考えている形の微分方程式を解くには、一次分数変換 ρ_C で変数変換をおこなったのち解いても、おこなう前に解いても、実質変わらないということがわかつた。だから、適切な ρ_C を選んで、特異点の場所を好みの場所にもつてくれればよいのだ。

6.7 超幾何関数

というわけで、確定特異点がみつつ、 $z = 0, z = 1$ および $z = \infty$ にある微分方程式を考える。まず、 $z = 0, z = 1$ での条件から、

$$f''(z) + \left(\frac{A_0}{z} + \frac{A_1}{z-1}\right)f'(z) + \left(\frac{B_0}{z^2} + \frac{C_0}{z} + \frac{B_1}{(z-1)^2} + \frac{C_1}{z-1}\right)f(z) = 0 \quad (6.65)$$

という形になる。 $z = \infty$ での条件は、 $w = 1/z$ に座標を変換して調べると、 $C_0 + C_1 = 0$ というものになる。

ここで、決定方程式の根を $z = 0$ で α_{\pm} , $z = 1$ で β_{\pm} として、

$$g(z) = z^{-\alpha_-} (z-1)^{-\beta_-} f(z) \quad (6.66)$$

とし、 $g(z)$ について方程式をたてると、決定方程式の根は $z = 0$ で $0, \alpha_+ - \alpha_-$ また $z = 1$ で $0, \beta_+ - \beta_-$ となり、結局上記方程式で $B_0 = B_1 = 0$ としたものを解けば充分だということがわかった。 A_0, A_1 および $C_0 = -C_1$ のかわりに

$$f''(z) + \frac{(\alpha + \beta + 1)z - \gamma}{z(z-1)} f'(z) + \frac{\alpha\beta}{z(z-1)} f(z) = 0 \quad (6.67)$$

で定める α, β, γ を用いるのが標準的である。(ここまで決定方程式の根を α 等と書いてきたが、そうではないのでご免なさい。) 実際、 $z = 0$ での決定方程式の根は $0, 1 - \gamma$ である。

指数 0 に相当する解を

$$f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots \quad (6.68)$$

として、代入して c_n の漸化式を書くと

$$(n+1)(n+\gamma)c_{n+1} = (n+\alpha)(n+\beta)c_n \quad (6.69)$$

である。 c_1 として

$$f(z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{1 \cdot \gamma} z + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{1 \cdot 2 \cdot \gamma(\gamma+1)} z^2 + \dots \quad (6.70)$$

が一つの解。これをガウスの超幾何関数といい、

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\beta+n)}{n!\Gamma(\gamma+n)} z^n \quad (6.71)$$

と書く。

指数 $1 - \gamma$ に相当する解は、

$$f(z) = z^{1-\gamma} g(z) \quad (6.72)$$

と書いて g の方程式に書き直すと、(6.67) で

$$(\alpha, \beta, \gamma) \rightarrow (1 - \gamma + \alpha, 1 - \gamma + \beta, 2 - \gamma) \quad (6.73)$$

と置き換えたものになるので、 $g(z) = {}_2F_1(1 - \gamma + \alpha, 1 - \gamma + \beta; 2 - \gamma; z)$ とすればよい。

結局、微分方程式 (6.67) の一次独立な解二つは (一般の γ に対しては)

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z), \quad z^{1-\gamma} \cdot {}_2F_1(1 - \gamma + \alpha, 1 - \gamma + \beta; 2 - \gamma; z) \quad (6.74)$$

で与えられる。一般に $|z| < 1$ で収束し、 $z = 1$ に分岐点がある。

さて、 $z \rightarrow 1 - z$ という座標変換をすると、 $z = 0, z = 1$ の確定特異点が入れ替わる。方程式は $g(z) = f(1 - z)$ として

$$g''(z) + \frac{(\alpha + \beta + 1)z - (\alpha + \beta + 1 - \gamma)}{z(z-1)} f'(z) + \frac{\alpha\beta}{z(z-1)} g(z) = 0 \quad (6.75)$$

になるので、もとの (6.67) の解は $z = 1$ あたりでは

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \alpha + \beta + 1 - \gamma; 1 - z), \quad (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \cdot {}_2F_1(\alpha - \alpha, \gamma - \beta; \gamma - \alpha - \beta + 1; 1 - z) \quad (6.76)$$

が一次独立な解である。よって、もとの ${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z)$ は上記ふたつの線形結合で書けるはず。係数は昔の偉い人が計算していて、

$${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} {}_2F_1(\alpha, \beta; \alpha + \beta + 1 - \gamma; 1 - z) + \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)(1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \cdot {}_2F_1(\alpha - \alpha, \gamma - \beta; \gamma - \alpha - \beta + 1; 1 - z) \quad (6.77)$$

等になっている。

ルジャンドルの微分方程式は確定特異点が3つなので、ガウスの超幾何関数で書けるはずである。実際、

$$P_l(z) = {}_2F_1(l + 1, -l; 1; \frac{1 - z}{2}) \quad (6.78)$$

である。

6.8 合流型超幾何微分方程式

超幾何微分方程式 (6.67) において、 $z \rightarrow z/\beta$ と置き換えると、特異点は $0, \beta, \infty$ にあり、解は ${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z/\beta)$ になる。そこで、 $\beta \rightarrow \infty$ とすると、二つの確定特異点が合流する。微分方程式は

$$f''(z) + \frac{\gamma - z}{z} f'(z) + \frac{-\alpha}{z} f(z) = 0 \quad (6.79)$$

となり、ひとつの解は

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z/\beta) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha + n)}{n! \Gamma(\gamma + n)} z^n \quad (6.80)$$

であたえられる。この右辺を

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; z) \quad (6.81)$$

と書いて、Kummer の合流型超幾何関数という。これは $|z| < \infty$ で収束。

ラゲールの微分方程式は確定特異点が1つ、2位の不確定特異点1つなので、クンマーの合流型超幾何関数で書けるはずである。実際、

$$L_n^{(m)}(z) = \binom{m+n}{n} {}_1F_1(-n; m+1; z) \quad (6.82)$$

である。

Bessel の微分方程式

$$f''(z) + \frac{1}{z} f'(z) + (1 - \frac{m^2}{z^2}) f(z) = 0 \quad (6.83)$$

の場合は、 $z = \infty$ での構造が上記の合流型微分方程式とはちょっと異なるが、 $g(z) = e^{iz} f(z)$ に対して方程式を書くと、3つの確定特異点のうち二つを上記のように合流させた微分方程式になっている。具体的には、

$$J_m(z) = \frac{1}{\Gamma(m+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^m e^{-iz} \cdot {}_1F_1(m + \frac{1}{2}; 2m + 1; 2iz) \quad (6.84)$$

となっている。

以上、いろいろ一般論を述べたが、別段全ての式を覚えてくれといっているわけではなくて、おまかな議論の流れを知っていること、かつ、ここまで出てきた大抵の特殊関数は(合流型)超幾

何関数に帰着するので、何か知りたいことがあれば、この一般論を使えば何でも判っていて既に文献で調べられているから心配しなくても良い、と知っていることが重要。

もっと一般に、

$${}_kF_l(\alpha_1, \dots, \alpha_k; \gamma_1, \dots, \gamma_l; z) = \frac{\prod_{j=1}^l \Gamma(\gamma_j)}{\prod_{i=1}^k \Gamma(\alpha_i)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\prod_{i=1}^k \Gamma(\alpha_i + n)}{n! \prod_{j=1}^l \Gamma(\gamma_j + n)} z^n \quad (6.85)$$

を一般化超幾何関数という。これは、特異点は $0, 1, \infty$ のままであるが、微分方程式の階数をあげたものになっている。具体的には、

$$\left[z \prod_{i=1}^k \left(z \frac{d}{dz} + \alpha_i \right) - \prod_{i=0}^l \left(z \frac{d}{dz} - \beta_i \right) \right] f(z) = 0 \quad (6.86)$$

を考える。 $z \sim 0$ で $f(z) \sim z^a$ とすると、 a を決める方程式は単に

$$\prod_{i=0}^l (a - \beta_i) = 0. \quad (6.87)$$

これより一つの解は

$$f(z) = z^{\beta_0} (1 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots) \quad (6.88)$$

とかけて、漸化式を解くと

$$f(z) = z^{\beta_0} {}_kF_l(\alpha_1 + \beta_0, \dots, \alpha_k + \beta_0; \beta_0 - \gamma_1 + 1, \dots, \beta_0 - \beta_l + 1; z). \quad (6.89)$$

その他の解も同様に求まる。(β_i が特殊な値でなければ、であるが。)

7 特殊関数を使ってみること

さて、いろいろ特殊関数をまなんだので少し使ってみよう。量子力学でいろいろ出てくるものに関してあまりやらないことにする。

7.1 円板内の振動

半径 R の円板が膜で出来ている。境界は固定されているとする。これを叩いたときに出る音の振動数はいくつか? という問題を考える。振幅が小さい近似では、波動方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, r, \theta) = v^2 \Delta f(t, r, \theta) \quad (7.1)$$

を解くことになる。ここで Δ はラプラシアン。解のもとめかたの方針は少々以前やったので、いい加減に書くと、特殊な解として

$$f(t, r, \theta) = e^{i\omega t} F(r, \theta) \quad (7.2)$$

というものを考える。これは、

$$\Delta F(r, \theta) = -\alpha F(r, \theta) \quad (7.3)$$

というラプラシアンの固有状態のとき、

$$\omega = v\sqrt{\alpha} \quad (7.4)$$

となる。これが空気を $e^{i\omega t}$ という時間の関数で揺らすので、耳まで振動数 ω の音が届く。結局、ラプラシアン固有値を求めよということである。

ラプラシアンは極座標では

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (7.5)$$

であったので、 θ 方向にフーリエ展開して

$$F(r, \theta) = \sum_m F_m(r) e^{im\theta} \quad (7.6)$$

に対して作用をしらべると、(7.3) は

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} + \alpha \right) F_m(r) = 0 \quad (7.7)$$

である。これは、 $\alpha = k^2$ とし、 $x = kr$ と変換すると、

$$\left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} x \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{x^2} + 1 \right) F_m(x) = 0 \quad (7.8)$$

になる。これは Bessel の微分方程式だった。 $x = 0$ で有限な解は $J_m(x)$ で与えられるので、結局

$$e^{im\theta} J_m(k_{m,a} r) \quad (7.9)$$

がラプラシアンの固有値 $-\alpha = -k_{m,a}^2$ を持ち、振動数は $\omega = vk_{m,a}$ になる。但し、境界条件 $F(R, \theta) = 0$ より、

$$J_m(k_{m,a} R) = 0. \quad (7.10)$$

ベッセル関数 $J_m(x)$ の正の零点を小さい順に $\tau_{m,a}$, $a = 1, 2, 3, \dots$ とすると、結局 $k_{m,a} = \tau_{m,a}/R$. よって円板の出す音の振動数は

$$\frac{v\tau_{m,a}}{R} \quad (7.11)$$

ということがわかった。

7.2 中空のボールの表面の振動

半径 R の中空のボールが膜で出来ている。これを叩いたときに膜から出る音の振動数はいくつか? という問題を考える。さっきと同様、球面上のラプラシアン

$$\frac{1}{R^2} \Delta_{S^2} \quad \text{ただし} \quad \Delta_{S^2} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{(\sin \theta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (7.12)$$

の固有値を求めよということになる。 $0 \leq \theta \leq \pi$ で $0 \leq \phi < 2\pi$.

$$\Delta_{S^2} f(\theta, \phi) = -\alpha f(\theta, \phi) \quad (7.13)$$

と書く。 $(S^2$ は 2 次元球面 (sphere) ということ。) まず

$$f(\theta, \phi) = \sum_m F_m(\theta) e^{im\phi} \quad (7.14)$$

とすると、 $F_m(\theta)$ に対してはラプラシアンは

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{(\sin \theta)^2} \quad (7.15)$$

ではたらく。 $z = \cos \theta$ として固有値問題は

$$\left(\frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} - \frac{m^2}{1-z^2} + \alpha \right) f(z) = 0. \quad (7.16)$$

これは Legendre の (陪) 微分方程式で、 $-1 \leq z \leq 1$ で連続な解は l を $|m|$ 以上の整数として $\alpha = l(l+1)$ ごとにひとつのみあって、それがルジャンドル (陪) 多項式 $P_l^{(m)}(z)$ だった。

結局、単位球面上のラプラシアン固有関数は

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = P_l^{(m)}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad m = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots; \quad l = |m|, |m+1|, \dots \quad (7.17)$$

で、固有値は $\alpha = -l(l+1)$ 。これを球面調和関数というのだった。

今は Δ_{S^2}/R^2 を考えていたから、出す振動数は $v\sqrt{l(l+1)}/R$ 。ちなみに、ルジャンドル陪多項式は

$$P_l^{(m)}(z) = \sqrt{1-z^2}^m e^{im\phi} (d/dz)^{|m|} P_l(z) \quad (7.18)$$

だったから、球面調和関数は $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ という直交座標系をつかうと $m \geq 0$ なら

$$P_l^{(m)}(\cos \theta) e^{im\phi} = (x+yi)^m \times (z \text{ の } l-|m| \text{ 次式}) \quad (7.19)$$

$m \leq 0$ なら

$$P_l^{(m)}(\cos \theta) e^{im\phi} = (x-yi)^m \times (z \text{ の } l-|m| \text{ 次式}) \quad (7.20)$$

となって、 x, y, z の単に多項式になってしまう。

7.3 詰まったボールの中身の振動

半径 R のボールが詰まったゴムで出来ている。これを叩いたときに膜から出る音の振動数はいくつかわか？という問題を考える。ラプラシアンは

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2} \quad (7.21)$$

である。この固有関数はいくつかわか？ということだが、

$$\Delta f(r, \theta, \phi) = -\alpha f(r, \theta, \phi) \quad (7.22)$$

で、上記球面調和関数を用いて

$$f(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} F_{l,m}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (7.23)$$

と展開できる。ただし l, m は (7.17) に出てくる整数の組。すると、 $f(r) := F_{l,m}(r)$ に対しては方程式は

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \alpha \right] f(r) = 0. \quad (7.24)$$

これは $h(r) = r^{1/2} f(r)$ に対する方程式に書き換えると、

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} + \alpha \right] h(r) = 0 \quad (7.25)$$

これはベッセルの微分方程式で $\nu = l+1/2$ としたものである。原点では $h(r)$ はゼロになっているが、そのような解は $J_{l+1/2}(kr)$ 、ただし $\alpha = k^2$ 。

表面での境界条件はきちんと指定していなかったが、ノイマン条件だとすると

$$J'_{l+1/2}(x) = 0 \quad (7.26)$$

の正の解を小さい順に $\sigma_{l,a}$ と書くと、 $k_{l,a} = \sigma_{l,a}/R$ が解。
 というわけで、球体のラプラシアン固有関数は

$$J_{l+1/2}(\sigma_{l,a} \frac{r}{R}) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (7.27)$$

振動数は

$$\frac{v}{R} \sigma_{l,a} \quad (7.28)$$

である。ここで、 $l = 0, 1, 2, \dots$; $m = -l, -l+1, \dots, +l$; $a = 1, 2, \dots$ 。
 さて、 $J_{l+1/2}$ は実は初等関数で書ける。例えば、一般公式 (6.23)

$$J_m(z) = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!(m+n)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{m+2n} \quad (7.29)$$

に $m = 1/2$ を代入してみよ。分母の $(n+1/2)!$ は Γ 関数をつかって

$$\Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\left(n - \frac{1}{2}\right) \cdots \frac{3}{2} \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (7.30)$$

なので、頑張って整理すると

$$J_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin z \quad (7.31)$$

である。上記一般公式から

$$\left(\frac{d}{zdz}\right)^k \frac{J_\nu(z)}{z^\nu} = (-1)^k \frac{J_{\nu+k}(z)}{z^{\nu+k}} \quad (7.32)$$

は容易にわかるので、

$$J_{l+1/2}(z) = (-1)^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} z^l \left(\frac{d}{zdz}\right)^l \frac{\sin z}{z} \quad (7.33)$$

となる。

8 回転群と球面調和関数

8.1 二次元、三次元の回転

角度 θ の回転は、行列でかけば

$$g(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

である。回転は長さを保つ:

$$|\vec{v}| = |g\vec{v}| \quad (8.2)$$

内積の形で書くと

$${}^T \vec{v} g g \vec{v} = \vec{v}^T \vec{v} \quad (8.3)$$

これは

$${}^T g g = 1. \quad (8.4)$$

これより $\det g = \pm 1$ がわかる。 $\det g = -1$ になるのは

$$g = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

等で、これは回転ではなくて反転。 $\det g = 1$ なら必ず (8.1) と書ける。

三次元の回転も同様に、 3×3 行列で

$${}^T g g = 1 \quad (8.6)$$

をみだし、 $\det g = 1$ であるもので与えられる。

二次元の回転はパラメタ θ のみで与えられる。三次元の回転にはいくつパラメタがあるだろうか？ x, y, z 軸がそれぞれ単位ベクトル $\vec{x}', \vec{y}', \vec{z}'$ へ回されたとする。 \vec{z}' のもとの座標での極座標 θ, ϕ が必要。この時点で、 \vec{x}', \vec{y}' は新たな赤道の上のっているので、 \vec{x}' がそのどこにあるかを指定するのにもうひとつ ψ が必要。結局三パラメタ必要なことが判った。この3つの角度を三次元の回転の Euler 角という。

別の言い方では、勝手な回転は、回転軸とそのまわりの回転角をあたえらると決まる。回転軸を決めるのに極座標がふたつ、回転角がひとつ必要。

8.2 二次元の回転と複素数

$e^{i\theta}$ を掛けるという操作は複素平面の θ 回転になるのは知っていると思う。もっと一般に、 $z = a + bi = re^{i\theta}$ を掛けるというのは、長さを r 倍して θ だけ回すという操作。 $r = |z|$ の部分が長さを変える操作で、 $e^{i\theta} = z/|z|$ が回す操作。

さて、 $z = a + bi$ に対し、 $\bar{z} = a - bi$ と定めて、

$$|z|^2 = z\bar{z} \quad (8.7)$$

で、また

$$|z||z'| = |zz'| \quad (8.8)$$

であった。これは

$$(a^2 + b^2)(a'^2 + b'^2) = (aa' - bb')^2 + (ab' + a'b)^2 \quad (8.9)$$

という等式を意味している。

8.3 四元数

二次元の回転は複素数のかけ算としてうまく理解できた。三次元の回転もなにかのかけ算としてうまく理解できないか？そこで、複素数について反省したあと、四元数を導入する。四元数はシラバス外だけれど。

実二次元ベクトル (a, b) を複素数と同一視すると、複素数の足し算はベクトルの足し算である。複素数のかけ算は、実二次元ベクトル $\vec{z} = (a, b)$ と $\vec{z}' = (a', b')$ に対して、もうひとつの実二次元ベクトル $\vec{z} \circ \vec{z}'$ を定める操作であって、たし算に関して分配的

$$(\vec{z} + \vec{z}') \circ \vec{w} = \vec{z} \circ \vec{w} + \vec{z}' \circ \vec{w} \quad (8.10)$$

であって、さらに積の長さが長さの積になる

$$|\vec{z} \circ \vec{z}'| = |\vec{z}| |\vec{z}'|. \quad (8.11)$$

さて、ハミルトンはこれが実三次元ベクトルでも出来ないかと考えた。すなわち、実三次元ベクトル $\vec{z} = (a, b, c)$, $\vec{z}' = (a', b', c')$ に対しその積 $\vec{z} \circ \vec{z}'$ が三次元ベクトルになるようにして、

$$|\vec{z} \circ \vec{z}'| = |\vec{z}| |\vec{z}'| \quad (8.12)$$

を満たすようにできないかと考えた。(三次元のベクトル積 $\vec{z} \times \vec{z}'$ はこの条件を満たさない。) 死の床についたハミルトンが昔を回想して息子にあてた手紙が残っている²:

Every morning in the early part of the above cited month, on my coming down to breakfast, your (then) little brother, William Edwin, and yourself, used to ask me, "Well, papa, can you multiply triplets?" Whereto I was always obliged to reply, with a sad shake of the head: "No, I can only *add* and *subtract* them".

ハミルトンはしばらくして、実4次元ベクトルなら積の長さが長さの積になるような積を入れられることを発見した。これを(ハミルトンの)四元数(quaternion)と言う。実四次元ベクトル $\vec{q} = (a, b, c, d)$ の代わりに、通常虚数単位を i, j, k のみつ導入して

$$q = a + bi + cj + dk \quad (8.13)$$

と書く。かけ算則は

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1, \quad ij = -ji = k, \quad jk = -kj = i, \quad ki = -ik = j \quad (8.14)$$

で定める。これから判るように、 qq' と $q'q$ は必ずしも等しくないことに注意。複素共役を

$$\bar{q} = a - bi - cj - dk \quad (8.15)$$

と定めると、

$$q\bar{q} = \bar{q}q = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = |q|^2. \quad (8.16)$$

がんばって計算すれば、

$$|q||q'| = |qq'| \quad (8.17)$$

を示せる。(練習問題として、やってみると勉強になる。) もうすこし一般に、

$$\overline{ab} = ba \quad (8.18)$$

になる。これは \bar{a} のかわりに a^\dagger と書けば

$$(ab)^\dagger = b^\dagger a^\dagger \quad (8.19)$$

となってよりなじみ深いかもしれない。

現在では、長さの積が積の長さになるような積を入れられる実ベクトル空間の次元は1,2,4,8のよっつに限ることが知られている。(十六元数以上はない。)

実数	\mathbb{R}	$a = a$	
複素数	\mathbb{C}	$z = a + bi$	$z^2 > 0$ を諦める
四元数	\mathbb{H}	$q = a + bi + cj + dk$	$qq' = q'q$ を諦める
八元数	\mathbb{O}	$o = a_0 + a_1 i_1 + a_2 i_2 + \dots + a_7 i_7$	$o(o' o'') = (o o') o''$ を諦める

²<http://books.google.co.jp/books?id=9j8MAQAIAAJ&pg=PA46> を参照。もうちょっと文献を探すと、この会話をしたのは息子が9歳だかのときということがわかる。

8.4 四元数と三次元の回転

さて、四元数だと四次元なので、やりすぎではないかと思えるが、実はこれで巧くいく。 $q = a + bi + cj + dk$ のうち、 $q = -\bar{q}$ を満たす「純虚」なものは

$$v = xi + yj + zk \quad (8.20)$$

の形をしていて、ちょうど実三次元である。

長さ1の四元数 q をとってくる。すると、変換

$$v \mapsto v' = qv\bar{q} \quad (8.21)$$

は

$$\bar{v}' = q\bar{v}\bar{q} = q\bar{v}\bar{q} = -qv\bar{q} = -v' \quad (8.22)$$

で、かつ

$$|v'| = |q||v||\bar{q}| = |v| \quad (8.23)$$

だから、三次元の回転を与える。このような $q = a + bi + cj + dk$ は

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1 \quad (8.24)$$

を満たすので、実三パラメタある。さきほど、三次元の回転は一般に三パラメタあるといったので、これで丁度良い。

もうすこし具体的に、 $q = e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ の場合に作用を考えると、

$$qi\bar{q} = i \quad (8.25)$$

また

$$qj\bar{q} = (\cos\theta + i\sin\theta)j(\cos\theta - i\sin\theta) = j\cos 2\theta + k\sin 2\theta \quad (8.26)$$

さらに

$$qk\bar{q} = (\cos\theta + i\sin\theta)k(\cos\theta - i\sin\theta) = -j\sin 2\theta + k\cos 2\theta \quad (8.27)$$

なので、これは j - k 平面内の 2θ 回転である。同様に、 $e^{j\theta}$ は k - i 平面の 2θ 回転、 $e^{k\theta}$ は i - j 平面内の 2θ 回転である。

一般に、 $s^2 + t^2 + u^2 = 1$ なる3つの実数を取ると、

$$(si + tj + uk)^2 = -1 \quad (8.28)$$

であるので、

$$q = e^{((si+tj+uk))\theta} = \cos\theta + (si + tj + uk)\sin\theta \quad (8.29)$$

である。この q に対し、

$$v \mapsto qv\bar{q} \quad (8.30)$$

は軸 $\vec{n} = (s, t, u)$ 周りの 2θ 回転である。勝手な長さ1の四元数 q は、かならず (8.29) の形にかけるから、これで、 $|q| = 1$ なる四元数がどういう三次元の回転を与えるかが一般にわかった。

三次元の回転角は Euler 角で書くより長さ1の四元数 q で書くほうがいろいろと便利で、3d CG 等の処理ではしばしば使われる(そうである。)

8.5 四元数とパウリ行列

唐突だが、

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.31)$$

をパウリ行列と呼ぶ。ここで、

$$\mathbf{i} = i\sigma_x, \quad \mathbf{j} = i\sigma_y, \quad \mathbf{k} = i\sigma_z \quad (8.32)$$

と定めると、

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -1, \quad \mathbf{ij} = -\mathbf{ji} = \mathbf{k}, \quad \mathbf{jk} = -\mathbf{kj} = \mathbf{i}, \quad \mathbf{ki} = -\mathbf{ik} = \mathbf{j} \quad (8.33)$$

を満たすので、

$$\mathbf{q} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} = \begin{pmatrix} a + di & c + bi \\ c - bi & a - di \end{pmatrix} \quad (8.34)$$

のことを四元数と思ってもよい。このとき、

$$\bar{\mathbf{q}} = \mathbf{q}^\dagger \quad (8.35)$$

ただし右辺の \dagger は行列としてのエルミート共役、また

$$|\mathbf{q}|^2 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = \det \mathbf{q}. \quad (8.36)$$

これより、

$$|\mathbf{q}\mathbf{q}'| = |\mathbf{q}||\mathbf{q}'| \quad (8.37)$$

はほとんどあたりまえ、なぜなら左辺の自乗は $\det(\mathbf{q}\mathbf{q}')$ で、右辺の自乗は $\det \mathbf{q} \det \mathbf{q}'$ だから。

四元数は複素数と同様あらたな「数」と思ふべきなのか、それとも単に 2×2 行列なのか？これは複素数に対しても同じことが言えて、上記

$$\mathbf{j} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.38)$$

は $\mathbf{j}^2 = -1$ を満たすから、 $z = a + bi$ のかわりに全ての計算で

$$\mathbf{z} = a + b\mathbf{j} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix} \quad (8.39)$$

を使ってもいいのである、すると上記と同様に $|\mathbf{z}|^2 = \det \mathbf{z}$ だし、この行列の要素は全部実数だから、複素数なんてものは無くって、単に実数の行列があるだけだと思ってもよい。これから、量子力学の通俗解説書で、複素数ってのは実際の数じゃないのに波動関数には複素数が現れて不思議だ、とか書いてあるのはちゃんちゃらナンセンスであることがわかる。

結局のところ、実際に数なのか、行列なのか、という疑問自体がよくないので、場合に依じて適切に使いやすい形式をつかえばいいというだけである。

8.6 微小回転

さて、四元数のことはすっかり忘れて、微小な回転を考える。対応する行列でいえば、単位行列に近いということ:

$$g = 1 + \epsilon M + O(\epsilon^2) \quad (8.40)$$

${}^T g g = 1$ に代入し、オーダー ϵ の項を比較すると、

$${}^T M = -M \quad (8.41)$$

がわかる。すなわち、反対称行列。実際、二次元の微小な回転は

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = 1 + \begin{pmatrix} 0 & -\theta \\ \theta & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2) \quad (8.42)$$

で、単位行列からのずれは反対称。

三次元の場合はどうか？勝手な反対称行列は

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{pmatrix} \quad (8.43)$$

と書けて、みつつ自由度がある。たとえば、 c の部分は、 x - y 平面の微小回転である:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 + \begin{pmatrix} 0 & -\theta & 0 \\ \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2). \quad (8.44)$$

同様に、 a, b は y - z 平面、 z - x 平面内の微小回転。そこで、上記 M を

$$M = aM_x + bM_y + cM_z, \quad (8.45)$$

ただし

$$M_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.46)$$

と書こう。 $M_{x,y,z}$ はそれぞれ x, y, z 軸まわりの微小回転。

さて、 M, M' を反対称行列だとして、その交換子 (commutator)

$$[M, M'] := MM' - M'M \quad (8.47)$$

を考えると、 $[M, M']$ も反対称行列である。微小回転の交換子は微小回転。これは、

$$g = 1 + \epsilon M + \epsilon^2 P + \dots, \quad h = 1 + \epsilon N + \epsilon^2 Q + \dots, \quad (8.48)$$

とすると、

$$gh = 1 + \epsilon(M + N) + \epsilon^2(P + MN + Q) + \dots \quad (8.49)$$

$$hg = 1 + \epsilon(M + N) + \epsilon^2(P + NM + Q) + \dots \quad (8.50)$$

だから、 gh と hg のズレの一番はじめに出てくるのが

$$gh(hg)^{-1} = 1 + \epsilon^2(MN - NM) + \dots \quad (8.51)$$

である。「回転 A をして、回転 B をする」と「回転 B をして、回転 A をする」のは一般には同じでない。そのズレを(微小なときに)測るのが交換子である。上記 $M_{x,y,z}$ に対しては

$$[M_x, M_y] = M_z, \quad [M_y, M_z] = M_x, \quad [M_z, M_x] = M_y. \quad (8.52)$$

これを回転群の生成子の交換関係、という。

三次元ベクトルに回転は作用するが、三次元空間上の関数にも回転は作用する。微小回転 $g = 1 + \epsilon M + \dots$ は関数に

$$((1 + \epsilon M)f)(\vec{v}) = f((1 - \epsilon M)\vec{v}) \quad (8.53)$$

と作用するものとする。(右辺のマイナスは誤植でない。こうしておかないと群作用の合成がうまくいかない。) 右辺は ϵ を微小として展開すると

$$= f + \epsilon(a(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y})f + b(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z})f + c(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x})f) + \dots \quad (8.54)$$

というわけで

$$T_x = y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, \quad T_y = z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, \quad T_z = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \quad (8.55)$$

を定めよう。これの交換子を計算すると、

$$T_x T_y f = (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y})(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z})f, \quad (8.56)$$

$$T_y T_x f = (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z})(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y})f \quad (8.57)$$

なので、がんばって整理すると

$$(T_x T_y - T_y T_x)f = T_z f \quad (8.58)$$

を得る。同様にやると、

$$[T_x, T_y] = T_z, \quad [T_y, T_z] = T_x, \quad [T_z, T_x] = T_y. \quad (8.59)$$

8.7 微小回転の表現

一般に、3つの行列(もしくは演算子) A_x, A_y, A_z で

$$[A_x, A_y] = A_z, \quad [A_y, A_z] = A_x, \quad [A_z, A_x] = A_y. \quad (8.60)$$

を満たすものを(三次元の)回転の表現という。上にでてきた 3×3 行列 $M_{x,y,z}$ や、微分演算子 $T_{x,y,z}$ は回転の表現という。前者は、三次元ベクトルへの回転の表現、後者は、三次元空間の関数への回転の表現である。

$A_{x,y,z}$ が $N \times N$ 行列のとき、これを N 次元表現という。以下、行列の反対称性等や行列要素が複素でも気にしないことにする。 $N \times N$ の可逆な行列 P にたいして、

$$B_{x,y,z} = P A_{x,y,z} P^{-1} \quad (8.61)$$

とすると、 $B_{x,y,z}$ も N 次元表現になる。これは、単に基底をとりかえただけで、実質一緒なので、同値な表現という。

また、 $N \times N$ 行列の $A_{x,y,z}$ 、 $N' \times N'$ 行列の $A'_{x,y,z}$ がそれぞれ表現だとして、

$$C_x = A_x \oplus A'_x, \quad C_y = A_y \oplus A'_y, \quad C_z = A_z \oplus A'_z \quad (8.62)$$

とすると、これも表現になる。ただし、 \oplus は $N \times N$ 行列と $N' \times N'$ 行列をブロック対角に組み合わせて $(N + N') \times (N + N')$ 行列にする操作のこと:

$$X \oplus Y = \left(\begin{array}{c|c} X & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & Y \end{array} \right). \quad (8.63)$$

($[C_x, C_y] = C_z$ を確かめてみよ。) これを直和表現という。

$N \times N$ 次元の与えられた表現 $C_{x,y,z}$ が、どう巧く P をとって、

$$PC_{x,y,z}P^{-1} = A_{x,y,z} \oplus A'_{x,y,z} \quad (8.64)$$

とふたつの表現 $A_{x,y,z}$ と $A'_{x,y,z}$ の直和に分解しないばあい、これを既約表現という。

いろいろ定義したが、例をあげると、 $M_{x,y,z}$ は三次元の既約表現である。ひどい例としては $K_{x,y,z} = 0$ は一次元の既約な表現である。

二次元の既約表現として、前の節で四元数を学んだときに出てきたパウリ行列 (8.31) をもちいて

$$\tau_{x,y,z} = \frac{i}{2} \sigma_{x,y,z} \quad (8.65)$$

がある。実際、

$$[\tau_x, \tau_y] = \tau_z, \quad [\tau_y, \tau_z] = \tau_x, \quad [\tau_z, \tau_x] = \tau_y \quad (8.66)$$

を確認できる。三次元表現として、この二次元表現と一次元表現の直和をとって、

$$U_{x,y,z} = \left(\begin{array}{c|c} \tau_{x,y,z} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & 0 \end{array} \right) \quad (8.67)$$

としたものがある。

8.8 回転の表現と球面調和関数

回転の行列表現を沢山つくる方法を説明しよう。いま、三次元空間上の関数への回転の微分演算子 $T_{x,y,z}$ (8.55) を考える。これは関数の空間という無限次元空間に作用しているが、たまたま、 n 個の一次独立な関数

$$f_1(x, y, z), \dots, f_n(x, y, z) \quad (8.68)$$

があって、 $T_{x,y,z}$ を作用させてもその複素一次結合で閉じるとしよう:

$$T_x f_i(x, y, z) = \sum_j f_j(x, y, z) A_{x,ji}, \quad (8.69)$$

$$T_y f_i(x, y, z) = \sum_j f_j(x, y, z) A_{y,ji}, \quad (8.70)$$

$$T_z f_i(x, y, z) = \sum_j f_j(x, y, z) A_{z,ji}. \quad (8.71)$$

ここで、 A_x, A_y, A_z は $n \times n$ 定数行列である。 $[T_x, T_y] = T_z$ を f_i に作用させて、整理して書き直すと、

$$[A_x, A_y] = A_z \quad (8.72)$$

同様にして

$$[A_y, A_z] = A_x, \quad [A_z, A_x] = A_y \quad (8.73)$$

を得る。よって、 n 次元表現を得た。

例として、

$$f_1 = x, \quad f_2 = y, \quad f_3 = z \quad (8.74)$$

とすると、上の条件をみだし、うえからつくった $A_{x,y,z}$ はさっきからでている $M_{x,y,z}$ と一致する。

もっと一般に、三次元空間 (x, y, z) 上の滑らかな関数 f で、 $\Delta f = 0$ を満たすものを考える。ラプラシアンを極座標で書くと、

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{S^2}}{r^2} \quad (8.75)$$

だった。 Δ_{S^2} は角度方向のラプラシアン (7.12) である。 $f = \sum_{l,m} F_{l,m}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$ と展開すると、 $F_{l,m}(r)$ に関する方程式は

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} F_{l,m}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} F(r) = 0 \quad (8.76)$$

これはすぐにとけて、 $F_{l,m}(r) = r^l$ が原点で滑らかな解である。よって、一般に三次元空間で $\Delta f = 0$ をみたす滑らかな関数は、

$$f_{l,m}(r, \theta, \phi) := r^l Y_{l,m}(\theta, \phi) = r^l e^{im\phi} P_l^{(m)}(\cos \theta) \quad (8.77)$$

で与えられる。右辺をこれまでまなんだルジャンドル陪多項式の性質を用いて変形すると、不思議なことに (?)、 x, y, z の l 次斉次多項式である。

たとえば、 $l = 1$ のときは、 $m = -1, 0, 1$ に応じて $x - iy, z, z + iy$ を得、 $l = 2$ のときは、 $m = -2, -1, 0, 1, 2$ の順に

$$(x - iy)^2, z(x - iy), z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2), z(x + iy), (x + iy)^2, \quad (8.78)$$

を得る。

すると、 $2l + 1$ 個の関数

$$f_{l,m}(x, y, z) := r^l Y_{l,m}(r, \theta, \phi), \quad m = -l, -l + 1, \dots, +l \quad (8.79)$$

は、 $T_{x,y,z}$ の作用で閉じることがわかる。まず、

$$T_x \Delta = \Delta T_x, \quad T_y \Delta = \Delta T_y, \quad T_z \Delta = \Delta T_z, \quad (8.80)$$

であることは頑張れば示せる。すると、 $\Delta f = 0$ なら $\Delta(T_x f) = 0$ である。また、 T_x の具体的な形から、 T_x は l 次式を l 次式にうつす。すると、 $T_x f_{l,m}$ は、 l 次式であり、 Δ を作用させると消える。上の解析で、そのような関数はかならず $f_{l,m}$ の線形結合であると示してあった。証明終り。

実は、

$$T_x^2 + T_y^2 + T_z^2 = \Delta_{S^2} \quad (8.81)$$

であることががんばって変数変換をするとわかる。よって、この場合

$$(T_x^2 + T_y^2 + T_z^2)f_{l,m} = -l(l+1)f_{l,m} \quad (8.82)$$

がわかる。

具体的に、(8.78)にある $f_{2,m}$ ($m = -2, -1, 0, 1, 2$) への作用から定まる 5×5 行列 $A_{x,y,z}$ を計算し、それらが $[A_x, A_y] = A_z$ 等を満たすので表現になっていることを確認するのは勉強になるだろう。

8.9 既約表現が唯一であること

実は、回転の表現で n 次元、既約であるものは実質一種類のみであることが知られている。球面調和関数で l を固定すると、上の考察から $2l+1$ 次元の既約表現が得られているので、奇数次元の既約表現はすべて球面上の関数のラプラシアンを調べることからでてくるわけだ。

以下、 n 次元で既約であるものは一種類であることを導出しておく。 n 次元既約表現 $A_{x,y,z}$ が与えられたとして、

$$J_z = iA_z, \quad J_+ = A_x + iA_y, \quad J_- = A_x - iA_y \quad (8.83)$$

とする。

$$[J_z, J_+] = J_+, \quad [J_z, J_-] = -J_-, \quad [J_+, J_-] = -2J_z \quad (8.84)$$

である。 v を J_z の固有ベクトルだとする:

$$J_z v = m v. \quad (8.85)$$

すると、

$$J_z(J_+ v) = (J_+ J_z + [J_z, J_+])v = m J_+ v + J_+ v = (m+1)(J_+ v) \quad (8.86)$$

また同様に

$$J_z(J_- v) = (m-1)(J_- v). \quad (8.87)$$

すると、 $(J_+)^n v$ や $(J_-)^n v$ はどんどん固有ベクトルになる。いずれこれはゼロにならないと有限次元性に反する。そこで、 $J_+^{n+1} v = 0$ だが $w = J_+^n v \neq 0$ なギリギリのところを取る。

$J_z w = j w$ とする。逆に動かして、 $J_-^{k-1} w \neq 0$, $J_-^k w = 0$ とする。

$$0 = J_+ J_-^k w \quad (8.88)$$

$$= J_+ J_- (J_-^{k-1} w) \quad (8.89)$$

$$= (J_- J_+ - 2J_z)(J_-^{k-1} w) \quad (8.90)$$

$$= (J_- J_+ - 2(j-k+1))(J_-^{k-1} w) \quad (8.91)$$

$$= \dots \quad (8.92)$$

$$= -2[(j-k+1) + (j-k+2) + \dots + j] J_-^{k-1} w \quad (8.93)$$

だが、 $J_-^{k-1} w \neq 0$ なので、お終いの式の $[\dots]$ 内はゼロ。よって $k = 2j+1$ で $[\dots]$ 内は

$$-j + (-j+1) + \dots + (j-1) + j = 0 \quad (8.94)$$

となるしかない。

この時点で、 $w, J_-w, J_-^2w, \dots, J_-^{k-1}w$ を基底にとりなおすと、 J_-, J_+, J_z がどう作用するかは具体的に決定できる。たとえば、 J_z は

$$J_z = \text{diag}(j, j-1, \dots, -j), \quad A_z = -i \text{diag}(j, j-1, \dots, -j) \quad (8.95)$$

とわかった。だから、これは k 次元表現だ。はじめは n 次元表現と仮定していたので、 $n = k$ 。

また、

$$D = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2 \quad (8.96)$$

とかくと、

$$[D, A_x] = [D, A_y] = [D, A_z] = 0 \quad (8.97)$$

であることは確認できる。

$$D = J_-J_+ + J_z^2 + J_z \quad (8.98)$$

だから、

$$Dw = j(j+1)w \quad (8.99)$$

なので、勝手な s に対して自動的に

$$D(J_-)^s w = j(j+1)(J_-)^s w \quad (8.100)$$

となるので、 D は単に単位行列に比例して、対角要素はみな $j(j+1)$ 。

以上の結果を、三次元表現、二次元表現について確認しておく。(いつでも一般論を勉強したら、簡単な例について具体的に計算して確認するのが理論物理学を学ぶ際にとっても重要。) 三次元既約表現は M_x, M_y, M_z だったが、上記の結果から、 M_z の固有値は $k=3, j=1$ なので $-i, 0, i$ のはず。実際その通りである。また、

$$M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 = \text{diag}(2, 2, 2). \quad (8.101)$$

同様に、二次元既約表現は $\tau_{x,y,z}$ と書いたが、 $j=1/2$ なので、

$$\tau_x^2 + \tau_y^2 + \tau_z^2 = \text{diag}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right) \quad (8.102)$$

は $j(j+1)$ とあっている。

8.10 もういちど球面調和関数について

ここまでのこのノートの構成では、まず球面調和関数を特殊関数をルジャンドル関数等いろいろ勉強してから、それを使っている導いた。例えば、角度方向のラプラシアン Δ_{S^2} の固有値が $l(l+1)$ だとか、球面調和関数に r^l をかけると何故か多項式になる、等は、ルジャンドル多項式の不思議な性質におしつけられている。それでかまわないのではあるが、出発点をひっくりかえして、回転群の表現を調べた前節の内容から、ルジャンドルの微分方程式が多項式解を持つのは固有値が $l(l+1)$ の時のみ、というのを導出することも出来る。

その一環として、球面上のラプラシアンの固有値が $l(l+1)$ であって、固有関数が $2l+1$ 個あることを直接しめておこう。

まず、単位球 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ 上の勝手な関数 $f(\theta, \phi)$ を考える。球体 $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$ 内で、 $\Delta F(r, \theta, \phi) = 0$ という方程式を、境界条件

$$F(1, \theta, \phi) = f(\theta, \phi) \quad (8.103)$$

のもとで解くことは可能である。(境界での熱分布を与えました。中での熱はどうなりますか？これに解がないわけではない。)

さて、球体内の勝手な滑らかな関数は、 x, y, z の多項式で近似できる。よって、球面上の勝手な関数は、 x, y, z の多項式 P で、 $\Delta P = 0$ なるものを、表面に制限したもので近似できる。

では、 x, y, z の多項式で $\Delta P = 0$ なるものはどれくらいあるか？ l 次斉次多項式のなす線形空間 V_l の次元を勘定しよう。それは x, y, z の l 次単項式の個数だから、

$$\binom{l+2}{2} = \frac{(l+2)(l+1)}{2} \quad (8.104)$$

個ある。 Δ は V_l を V_{l-2} にうつす。きちんと考えると、これは全射なので、 Δ で消える部分空間の次元は

$$\dim V_l - \dim V_{l-2} = \frac{(l+2)(l+1)}{2} - \frac{l(l+1)}{2} = 2l+1 \quad (8.105)$$

である。すなわち、 l 次斉次で Δ で消えるような多項式は $2l+1$ 種類ある。

斉次式を $z, x+iy, x-iy$ の多項式と思って、 $z = r \cos \theta, x+iy = r \sin \theta e^{i\phi}$ とすると Δ と $i\partial_\phi$ は交換するので、 $2l+1$ 種類の多項式は $i\partial_\phi$ の固有値 m で分類できる。 $x+iy$ は固有値 $1, x-iy$ は固有値 -1 で、 $x+iy$ と $x-iy$ について高々 l 次だから、固有値 m は $-l$ から l までちょうど $2l+1$ 個ある。 $m=l$ のときは $(x+iy)^l, m=-l$ のときは $(x-iy)^l$ しかありえないことまでわかる。

というわけで、 l 次斉次で Δ で消え、 $i\partial_\phi$ の固有値が m であるような多項式を $f_{l,m}(x, y, z)$, $m = -l, -l+1, \dots, l$ と書こう。球面上の関数は $f_{l,m}$ を球面に制限したものの線形結合で書ける。

さて、

$$f_{l,m}(x, y, z) = r^l Y_{l,m}(\theta, \phi) = r^l e^{im\phi} P_l^{(m)}(\cos \theta) \quad (8.106)$$

によって $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ および $P_l^{(m)}(z)$ を定義する。これに

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{S^2}}{r^2} \quad (8.107)$$

が $\Delta f = 0$ を満たすことを使うと、

$$\Delta_{S^2} Y_{l,m}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (8.108)$$

が判った。

8.11 回転群、ローレンツ群と一次分数変換

回転群は球面に自然に作用するので、球面調和関数は回転群の言葉で自然に理解出来る、というのを学んだ。この、回転群の球面への作用を、もうすこし別の方法で見ておく。

まず、半径 1 の球面を $x^2 + y^2 + u^2 = 1$ ととり、球面上の点 (x, y, u) に対して、その点と $(0, 0, 1)$ を結ぶ直線が xy 平面と交わる点を $(\underline{x}, \underline{y}, 0)$ とし、複素数 $z = \underline{x} + i\underline{y}$ とする:

$$z = \frac{x+iy}{1-u}, \quad x^2 + y^2 + u^2 = 1 \quad (8.109)$$

である。昔、地理の授業でやったかもしれないが、これは球面を一点から赤道を通る平面へ投影したことになる。 $(0, 0, -1)$ は $z = 0$ に、 $(0, 0, 1)$ は $z = \infty$ に対応する。言い換えれば、三次元空間内の球面に複素数 z で座標を入れたことになっている。

三次元空間への回転群は 3×3 の行列で作用したが、球面に複素数 z で座標をいれると、回転群の作用はどのようにあらわされるだろうか？まず、球面から平面への投影は局所的な角度を保つ。よって、回転群によって引き起こされる複素平面上の変換は局所的な角度を保つ等角写像である。複素解析でやったように、等角写像は解析関数

$$z \mapsto f(z) \quad (8.110)$$

であらわされる。回転に対して定まる f は、全平面 z で定義され、 $f(z)$ の極はひとつしかない、なぜなら $f(z_0) = \infty$ は、球面上の z_0 に対応する点が回転ののち $(0, 0, 1)$ にうつるということから。同様に、 $f(z)$ の零点もひとつしかない。よって、 $f(z)$ は以下の形の有理関数

$$f_C(z) = \frac{az + b}{cz + d}, \quad C = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (8.111)$$

であらわされる、すなわち一次分数変換である。これは Sec. 6.6 で既に見たように、 $f_{CD} = f_C \circ f_D$ を満たした。また、 $f_C = f_{kC}$ だから、 a, b, c, d で実 8 パラメタあるうち、全体を複素数倍する 2 パラメタを除いて、一次分数変換には実 6 パラメタある。Sec. 6.6 のように、

$$\det C = ad - bc = 1 \quad (8.112)$$

を要求しよう。

さて、回転は実 3 パラメタしかないので、勝手な一次分数変換はあらわれないことがわかる。具体的に、どのような一次分数変換が回転からあらわれるか考えよう。そのため、三次元空間の反転 $(x, y, u) \rightarrow (-x, -y, -u)$ を考えると、これは z の言葉では、

$$z \mapsto \iota(z) := -1/\bar{z} \quad (8.113)$$

と作用することがわかる。三次元の回転を作用させてから反転するのと、反転してから三次元の回転を作用させるのはおなじことだから、

$$\iota\left(\frac{az + b}{cz + d}\right) = \frac{a\iota(z) + b}{c\iota(z) + d} \quad (8.114)$$

でなければならない。これを満たすには

$$a = \bar{d}, \quad b = -\bar{c} \quad (8.115)$$

であればよい。(8.112) をみると、これは

$$CC^\dagger = 1 \quad (8.116)$$

すなわち C はユニタリ行列である。まとめると、三次元の回転が球面に作用する様子は、投影で導入した複素座標 z には、ユニタリ行列 C による一次分数変換 f_C で与えられる、ということがわかった。

逆に、勝手な C に対する一次分数変換 f_C による球面上の作用に、意味はないのだろうか？実は、回転群のかわりにローレンツ群を考えると、丁度全ての f_C が出てくることがわかる。そのため、 (x, y, u, t) という座標のミンコフスキ空間を考える、但し光速は 1 として、原点 $(0, 0, 0, 0)$ に観測者がおり、そこに到達する光線は

$$x^2 + y^2 + u^2 - t^2 = 0 \quad (8.117)$$

を満たす時空点からやってきたものとする。(8.117) をみたく (x, y, u, t) からやってきた光は、天球上の一点に対応させられるが、極座標 (θ, ϕ) のかわりに、形式的に半径 1 とした天球上の点 $(x/t, y/t, u/t)$ を考え、さらに、これを平面に投影して、複素数 z を定めると、

$$z := \frac{(x + iy)/t}{1 - u/t} = \frac{x + iy}{t - u} \quad (8.118)$$

たとえば、具体的に、 u 方向へのローレンツブーストを考える。これは x, y をかえずに

$$\begin{pmatrix} u \\ t \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} u' \\ t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \eta & \sinh \eta \\ \sinh \eta & \cosh \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ t \end{pmatrix} \quad (8.119)$$

で与えられる、但し η はラピディティ。(8.118) に代入し、すぐに

$$z \mapsto e^\eta z \quad (8.120)$$

を得る。これは

$$C = \begin{pmatrix} e^{\eta/2} & 0 \\ 0 & e^{-\eta/2} \end{pmatrix} \quad (8.121)$$

による一次分数変換である。

勝手なローレンツ変換は u 方向のブーストと勝手な回転で生成されるから、勝手なローレンツ変換は一次分数変換で作用する。ローレンツ変換には実 6 パラメタある (回転軸に 2 パラメタ、回転角に 1 パラメタ、走る方向に 2 パラメタ、走る速さに 1 パラメタ)。一次分数変換にも実 6 パラメタあった。これより、勝手な一次分数変換がローレンツ変換によって実現できることもわかった。

まとめると、ローレンツ変換は、天球上に複素数 z で座標を入れると、そこに

$$\det C = 1 \quad (8.122)$$

をみたく 2×2 行列による一次分数変換 f_C で作用する。 C がさらに

$$CC^\dagger = 1 \quad (8.123)$$

をみたくユニタリ行列であると、ローレンツ変換の中でも、ブーストを含まない純粋な三次元の回転に相当する。

おしまいに、 C が与えられたとき、 (x, y, u, t) への作用はどうすれば求まるかを考える。このため、四つの座標を、エルミート行列

$$X = \begin{pmatrix} t + u & x + iy \\ x - iy & t - u \end{pmatrix} \quad (8.124)$$

であらわすことにしよう。

$$-\det X = x^2 + y^2 + u^2 - t^2 \quad (8.125)$$

は通常のミンコフスキ空間での固有長さの二乗である。そこで、 C が X に

$$X \mapsto X' = CXC^\dagger \quad (8.126)$$

と作用すると定めると、 X' は同様にエルミートなので、 (x, y, u, t) への線形な作用を定め、また $\det X' = \det X$ なので、ミンコフスキ空間での固有長さの二乗であるから、これはローレンツ変換である。三次元回転を取り出すには、 X であって $t = 0$ であるようなものは $\text{tr} X = 0$ という条

件で与えられることに注意する。 $CC^\dagger = 1$ ならば、 $\text{tr } X' = \text{tr } CXC^\dagger = \text{tr } C^\dagger CX = \text{tr } X = 0$ となるので、三次元ユークリッド空間内に作用する。よって、 C の中でユニタリなものが純粋な回転に対応することがわかる。

ここでは勝手に C からローレンツ群の作用を作ったが、これと一次分数変換との関係は次のようにわかる。原点 $(0, 0, 0, 0)$ に光が届く時空点は $\det X = 0$ をみताす。これは、 2×2 行列の行ベクトルが比例しているということだから、何か複素数 α, β, z があって

$$X = \begin{pmatrix} \alpha z & \beta z \\ \alpha & \beta \end{pmatrix} \quad (8.127)$$

と書けている筈である。また、(8.124) と比較して、

$$z = (x + iy)/(t - u) \quad (8.128)$$

がわかるが、これはまさに (8.118) である。さらに、 X がこの形であると、上記の作用 (8.126) は z に一次分数変換 f_C として作用することもすぐに確認出来る。