

# 物理数学：講義ノート

白石直人

## 目次

1	はじめに	1
<b>第 I 部 線形代数の応用</b>		<b>2</b>
2	線形代数の復習と行列の関数	2
2.1	対角化可能な行列の基本性質	2
2.2	$AB$ と $BA$ の関係	5
2.3	スペクトル理論とジョルダン標準形	6
2.4	行列の関数	10
2.5	<補論>：正規行列	12
2.6	<補論>：ゴールデン・トンブソンの不等式の証明	13
3	正定値行列	15
3.1	正定値行列の性質	15
3.2	行列のべき根	16
3.3	行列不等式	16
3.4	<補論>：二次形式	20
4	特異値	22
4.1	特異値分解	22
4.2	特異値の性質	24
4.3	最小二乗法と一般逆行列	24
5	ノルム	27
5.1	ベクトルのノルム	27
5.2	行列のノルム	28
5.3	劣加法性の証明（不等式の技法紹介）	30
6	凸性と双対性	33
6.1	凸性と超平面分離定理	33
6.2	線形計画問題の弱双対定理	35
6.3	線形計画問題の強双対定理	38
6.4	<補論>：超平面分離定理の証明	39
6.5	<補論>：半正定値計画問題とサポートベクターマシン	41
7	majorization と確率行列	44
7.1	majorization	44
7.2	二重確率行列との関係	47
7.3	<補論>：d-majorization 及び確率行列との関係	51
8	<補論>：固有値評価	53
8.1	固有値の変分表示	53
8.2	行列の和の固有値	54
8.3	特異値の評価	56
<b>第 II 部 確率論とその応用</b>		<b>58</b>

<b>9</b>	<b>ガウス積分とラプラス近似</b>	<b>58</b>
9.1	多変数ガウス積分	58
9.2	複素ガウス積分	60
9.3	ラプラス近似と鞍点法	62
9.4	ガンマ関数とスターリングの公式	64
9.5	ハバード・ストラトノビッチ変換	65
9.6	<補論>：ラプラスの方法の証明の概略	68
<b>10</b>	<b>確率過程</b>	<b>70</b>
10.1	確率過程の定義	70
10.2	定常分布と収束定理	71
10.3	<補論>：ペロン・フロベニウスの理論	73
<b>11</b>	<b>母関数の方法</b>	<b>77</b>
11.1	モーメントとキュムラント	77
11.2	母関数	77
11.3	計数場の方法	78
11.4	ルジャンドル変換	81
11.5	大偏差性質	83
<b>12</b>	<b>確率の集中不等式</b>	<b>86</b>
12.1	マルコフ不等式とチェビシェフ不等式	86
12.2	モーメント法と閾値定理	87
12.3	チェルノフ限界	89
12.4	サブガウス分布とヘフディング限界	90
<b>13</b>	<b>高次元空間の性質</b>	<b>92</b>
13.1	高次元における反直観的な振る舞い	92
13.2	測度集中	93
13.3	<補論>：係数を弱めた超球面の測度集中の証明	96
<b>14</b>	<b>&lt;補論&gt;：確率論的方法</b>	<b>98</b>
14.1	確率的な手法の具体例	98
14.2	ロバースの局所補題の利用	100
14.3	ロバースの局所補題の証明	101
<b>第 III 部 フーリエ変換と特殊関数</b>		<b>103</b>
<b>15</b>	<b>線形空間論</b>	<b>103</b>
15.1	代数	103
15.2	線形空間	105
15.3	内積空間	107
15.4	双対空間	109
15.5	スペクトル定理	109
15.6	固有値問題とスツルム・リウヴィル型問題	110
<b>16</b>	<b>フーリエ級数</b>	<b>112</b>
16.1	フーリエ級数展開の考え方	112
16.2	連続および離散フーリエ級数の性質	113
16.3	連続フーリエ変換の収束と特異性	115
16.4	デルタ関数とフーリエ変換	117
16.5	フーリエ変換のラプラス近似への応用	119
16.6	離散フーリエ変換の応用	120

<b>17</b>	<b>直交多項式系</b>	<b>121</b>
17.1	古典的直交多項式の分類	121
17.2	古典的直交多項式の等価な特徴づけ	123
17.3	陪多項式	125
17.4	量子力学への応用	126
17.5	数値積分への応用	126
<b>18</b>	<b>超幾何関数</b>	<b>128</b>
18.1	微分方程式の特異点	128
18.2	超幾何関数の導入	129
18.3	超幾何関数の3つの特徴づけ	131
18.4	合流操作	133
18.5	隣接関係と変換公式	137
18.6	誤差関数への応用	138
<b>19</b>	<b>楕円関数</b>	<b>140</b>
19.1	楕円積分とヤコビの楕円関数	140
19.2	ヤコビの楕円関数の基本性質	141
19.3	力学への応用	143
19.4	相加相乗平均との関係	147
19.5	ヤコビの楕円関数の複素関数化	148
19.6	二重周期関数としての楕円関数	150
19.7	ワイエルシュトラスの $\wp$ 関数	152

## 1 はじめに

物理数学、要するに物理に必要な数学というと、ぱっと思いつく範囲で例えば以下のような内容が挙げられる。

- 複素関数論：留数積分、ローラン展開など
- 微分方程式：微分方程式の一般論、特殊関数など
- その他解析：フーリエ変換、ルベーグ積分など
- 群の表現：群の基本、ユニタリ群や直交群、既約表現、ルートとウェイトなど
- 幾何：トポロジー、微分幾何など
- 線形代数の応用：正定値、特異値など
- 確率論の応用：母関数、集中不等式など
- 情報科学の知見：各種エントロピー、情報幾何、計算論など

ただし幸いなことに駒場には数学科があり、また統合自然科学科においては数学科教員による数学の科目が多数開講されている。上記の中だと、複素関数論、常微分方程式論、フーリエ変換、ルベーグ積分、群論、幾何などは、そうした他科目で修得できる。また情報科学については、「情報と計算の物理」という科目が別個開講されている。これらと重複する内容の講義を行っても仕方がないので、この物理数学の講義では「物理では必要になるものの、数学科の講義などではなかなか取り扱われない内容」として、「線形代数の応用」「確率論の応用」「微分方程式と特殊関数」の3つを取り上げ、これらを物理数学 I、物理数学 II の1年間で見ていきたいと思う。

## 第I部

# 線形代数の応用

## 2 線形代数の復習と行列の関数

ここでは、1年生で習った線形代数の結果を、主に線形変換の視点から復習し、併せて行列の関数を導入する。

### 2.1 対角化可能な行列の基本性質

ベクトルに対する行列の作用  $\mathbf{v} \rightarrow A\mathbf{v}$  は、ベクトルに対する線形変換<sup>1</sup> とみなせる。線形変換を行うと、一般にはベクトルは向きの違う別のベクトルへと移される。座標全体で考えれば、基底ベクトルが作る格子が、向きを変えて変形させられた別の格子に移されるということでもある。しかし、ベクトルによっては、線形変換を施しても向きが変わらず、長さだけが変わる場合がある。例として、

$$A = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

という行列による線形変換を考えよう。この線形変換を施した際、ベクトル  $\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$  と  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  はそれぞれ

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

というベクトルに移され、大きさが変わるだけで向きは変化しない。なので、ベクトル  $\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$  と  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$  に沿った（斜向）座標で見れば、線形変換  $A$  は、座標軸に沿った伸縮だけで記述できる（図1）。このような記述は非常に便利だし理解も明快になる。一般に

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i \quad (2.4)$$

が成り立つ ( $\lambda_i \in \mathbb{C}$ ) とき、ベクトル  $\mathbf{v}_i$  を  $A$  の「(右) 固有ベクトル ((right) eigenvector)」といい、 $\lambda_i$  (伸縮の大きさ) を  $\mathbf{v}_i$  の「(右) 固有値 ((right) eigenvalue)」という。また式 (2.4) を「固有値方程式」という。特に、固有ベクトルだけでベクトル空間全体が張られている場合には、固有ベクトルを基底としてベクトルの展開を行えば、その線形変換（行列の作用）は各軸ごとに定数倍するだけなので、線形変換の取り扱いが非常に容易になる。

線形変換を特徴づけるという観点から見ると、固有ベクトルは「線形変換の向きを規定している」とも言える。例えば、二つの行列  $A, B$  において、固有ベクトルがベクトル空間全体を張っていて、かつ両者の固有ベクトルが一致しているならば、この二つの行列は可換である。逆に、二つの行列が可換ならば、同時固有ベクトル<sup>2</sup>（と一般化固有ベクトル）でベクトル空間全体の基底をとることが出来る。（このあたりの話はのちに詳しく述べる）。

上の説明では、縦ベクトルに左から行列を作用させたが、横ベクトルに右から行列を作用させることもできる。式 (2.4) と同様に、横ベクトル  $\mathbf{u}_j$  について

$$\mathbf{u}_j A = \lambda_j \mathbf{u}_j \quad (2.5)$$

<sup>1</sup>ベクトル  $\mathbf{v}, \mathbf{u}$  とスカラー  $a, b$  に対し、 $f(a\mathbf{v} + b\mathbf{u}) = af(\mathbf{v}) + bf(\mathbf{u})$  を満たす写像  $f$  を線形写像ないし線形変換という。

<sup>2</sup>行列  $A, B$  に対し、どちらの固有ベクトルでもあるようなベクトルを「同時固有ベクトル」という

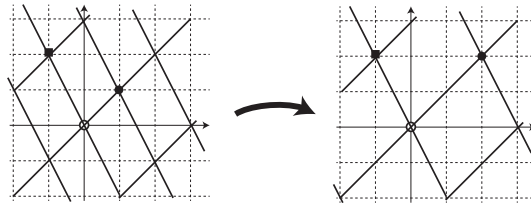


図 1: 固有ベクトルのイメージ図。二つの固有ベクトルで作られる斜向座標で見ると、線形変換  $A$  の作用は、単に各軸に沿っての引き延ばしのみとなる。

が成り立つとき、 $\mathbf{u}_j$  を「左固有ベクトル」、 $\lambda_j$  を「左固有値」という。 $\mathbf{u}_j, \lambda_j$  が  $A$  の左固有ベクトル、左固有値のとき、 $\mathbf{u}_j^\top$  ( $\mathbf{u}_j$  の転置) は  $A^\top$  の固有値  $\lambda_j$  の右固有ベクトルである。

**定理 2.1.** 任意の正方行列について、以下が成り立つ。

1. 右固有値と左固有値は一致する。
2. 異なる固有値に属する右固有ベクトルと左固有ベクトルの積はゼロとなる<sup>3</sup>。

**証明.** 1 の証明: 特性方程式が転置しても一致する、すなわち

$$\det[A - \lambda I] = \det[A^\top - \lambda I] \quad (2.6)$$

という関係があることからすぐに確認できる。(  $A$  の左固有値と  $A^\top$  の右固有値は同じものである点に注意)

2 の証明: 行列  $A$  の固有値  $\lambda_1$  の右固有ベクトルを  $\mathbf{v}_1$ 、固有値  $\lambda_2 (\neq \lambda_1)$  の左固有ベクトルを  $\mathbf{u}_2$  とすると

$$\lambda_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_2 A \mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_1 \quad (2.7)$$

より  $\mathbf{u}_2 \mathbf{v}_1 = 0$  が導ける。 □

これらの性質により、対角化可能な行列  $A$  について、左右の固有ベクトルを  $\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i = 1$  となるように規格化しておく

$$A = \sum_i \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i \quad (2.8)$$

と書くことが出来る。あるいは別の言い方をすると、固有ベクトルの規格化の条件より

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n \end{pmatrix} (\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n) = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

と左右の固有ベクトルを並べた行列同士は逆行列の関係にあるので、 $V := (\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n)$  と置くと

$$V^{-1} A V = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n \end{pmatrix} A (\mathbf{v}_1 \ \cdots \ \mathbf{v}_n) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

と  $A$  は対角化される。

以降この講義では、明記しない限り固有ベクトルは右固有ベクトルを指すものとする。

<sup>3</sup>これは、左右の固有ベクトルは双対基底の関係だということである。

これまで一般の行列の固有値や対角化を見てきた。次に、エルミート行列という特定のクラスの行列の性質を考察しよう。エルミート行列は量子力学において物理量と対応する行列であり、そのためエルミート行列をうまく取り扱えることは、特に物理を学ぶうえで極めて重要である。

- 定理 2.2.** 1. エルミート行列の固有値はすべて実数である。
2. エルミート行列の異なる固有値に属する（右）固有ベクトルは、互いに直交している。
3. エルミート行列は対角化できる。特に対角化する際の行列としてユニタリ行列が取れる<sup>4</sup>。

**証明.** 1 (固有値が実数であること):  $\mathbf{x}$  をエルミート行列  $H$  の固有値  $\lambda$  の固有ベクトルとすると、

$$\lambda |\mathbf{x}|^2 = \mathbf{x}^\dagger [H\mathbf{x}] = [\mathbf{x}^\dagger H]\mathbf{x} = (\mathbf{x}^\dagger [H^\dagger \mathbf{x}])^* = (\mathbf{x}^\dagger [H\mathbf{x}])^* = \lambda^* |\mathbf{x}|^2 \quad (2.11)$$

が一般に成り立つ。ただし  $*$  は複素共役を表す。 $|\mathbf{x}|^2 \neq 0$  なので、 $\lambda^* = \lambda$ 、つまり固有値は実数であることが言える。ここで3つ目の等号では  $\mathbf{y}^\dagger \mathbf{x} = (\mathbf{x}^\dagger \mathbf{y})^*$  が成り立つことを用いた。

2 (固有ベクトル同士の直交性): エルミート行列の場合には右固有ベクトルの複素転置が左固有ベクトルになることから容易に確認できる。

3 (ユニタリ対角化): 厳密に示すのは実は少し面倒くさい。ここでは、以下のシューア分解を事実と認めて議論を進める<sup>5</sup>。

**定理 2.3** (シューア分解 (Schur decomposition)). 任意の行列  $A$  は、ユニタリ行列  $U$  と上三角行列  $B$  を用いて  $U^\dagger A U = B$  と書ける

$A$  がエルミート行列  $H$  の場合には、

$$B = U^\dagger H U = (U^\dagger H^\dagger U)^\dagger = (U^\dagger H U)^\dagger = B^\dagger \quad (2.12)$$

という関係が成り立つ。ところが  $B$  は上三角、 $B^\dagger$  は下三角なので、両者が一致するには  $B$  が対角行列になるしかない。このとき  $B = U^\dagger H U$  は  $H$  のユニタリ対角化そのものである。□

**[2-1].** シューア分解で得られる上三角行列  $B$  の対角項は、 $A$  の固有値であることを示せ。ただしシューア分解できることは事実として認めてよい。

3の事実から、エルミート行列の固有状態たちはベクトル空間の正規直交基底をなすことが言える。実際、対角化に用いたユニタリ行列を「縦ベクトルを並べたもの」と解釈するならば、これらの縦ベクトルたちがまさに欲しかった正規直交基底そのものである。

ユニタリ行列が「空間の回転」であることを思い出せば、ユニタリ対角化は、エルミート行列の作用が「回転した各直交座標軸に沿った引き延ばし」という意味を持つことを明らかにしてくれる。

<sup>4</sup>なお、ユニタリ対角化の方法は、行および列を入れ替える自明な自由度を除けば一意的であることも示せる。

<sup>5</sup>シューア分解可能であることは、行列サイズ  $n$  の帰納法を用いて示せる。以下概略を示す。

行列  $A$  には、少なくとも一つの固有値  $\lambda$  と対応する固有ベクトル  $\mathbf{v}$  が存在する。ここで、 $\mathbf{u}_1 = \mathbf{v}$  とする正規直交基底  $\{\mathbf{u}_i\}$  をとり、これを横に並べたユニタリ行列を  $U = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)$  とする。すると、 $C := U^\dagger A U$  において、 $C_{21}, C_{31}, \dots, C_{n1}$  はすべてゼロである。帰納法の過程により、 $C$  の右下の  $(n-1) \times (n-1)$  行列を上三角化するユニタリ行列  $V$  が存在する。この  $V$  を用いて  $W = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & V \end{pmatrix}$  というユニタリ行列を定義すると、 $W^\dagger C W = (UW)^\dagger A UW$  は上三角行列になる。

## 2.2 AB と BA の関係

行列は一般には可換でないので、 $AB \neq BA$  である。しかし、固有値だけ見れば両者は一致する<sup>6</sup>。

**定理 2.4.** 任意の  $n \times n$  行列  $A, B$  について、 $AB$  と  $BA$  の固有値は代数的重複度<sup>7</sup>を含めて一致する。

証明. 極めて天下りだが、 $x$  を変数として、以下の二つのブロック行列の恒等式

$$\begin{pmatrix} I & -A \\ O & xI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xI - AB & O \\ xB & xI \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

$$\begin{pmatrix} I & O \\ -B & xI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xI & A \\ O & xI - BA \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

を考えよう。この行列式を考えると、それぞれの式からは

$$x^n \det \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = x^n \det[xI - AB] \quad (2.15)$$

$$x^n \det \begin{pmatrix} xI & A \\ B & I \end{pmatrix} = x^n \det[xI - BA] \quad (2.16)$$

が得られる。両者は多項式として一致するので  $AB$  と  $BA$  の特性方程式は一致する。

$$\det[xI - AB] = \det[xI - BA] \quad (2.17)$$

すなわち、 $AB$  と  $BA$  の固有値は、その代数的重複度を含めて一致する。  $\square$

次に  $AB = BA$  が成り立つ ( $A$  と  $B$  が可換である) 状況を考えよう。この状況は、どういうときに実現するのだろうか。また、 $AB = BA$  が成り立つならば、どういうことが言えるのだろうか<sup>8</sup>。

まず、一般の行列  $A, B$  の場合の結果について述べる。

**定理 2.5.**  $AB = BA$  とする。このとき、任意の  $A$  の固有値  $a_i$  に対し、適切な  $B$  の固有値  $b_j$  と同時固有ベクトル  $\mathbf{x}_{i,j}$  が存在し、

$$A\mathbf{x}_{i,j} = a_i\mathbf{x}_{i,j}, \quad B\mathbf{x}_{i,j} = b_j\mathbf{x}_{i,j} \quad (2.18)$$

が成り立つ。

証明.  $A$  の固有値  $a_i$  の固有空間を  $V_i^a$  とする。この固有空間の任意のベクトル  $\mathbf{x} \in V_i^a$  について、

$$A(B\mathbf{x}) = BA\mathbf{x} = a_i(B\mathbf{x}) \quad (2.19)$$

が成り立つので、 $B\mathbf{x} \in V_i^a$  と分かる。つまり  $B$  は  $V_i^a$  を不変に保つ線形変換である。 $B$  の作用を  $V_i^a$  に制限すると、制限された  $B$  はこの空間  $V_i^a$  内の線形変換なので、固有値と  $V_i^a$  内の固有ベクトルを持つ<sup>9</sup>。それを一つ選べば、それが求めている  $b_j$  と  $\mathbf{x}_{i,j}$  である。  $\square$

<sup>6</sup>以下では一般の場合に対して証明しているのがかなりトリッキーな方法を用いているが、 $B$  が正則ならば  $\det[AB - \lambda I] = \det[B(AB - \lambda I)B^{-1}] = \det[BA - \lambda I]$  と、 $AB$  と  $BA$  の特性方程式が一致することは簡単に示せる。

<sup>7</sup>特性方程式  $\det[A - \lambda I] = 0$  における重解の度合いのこと。

<sup>8</sup>この辺りの話はラックス『線形代数』第6章、山本『行列解析の基礎』第5章などに出ている。

<sup>9</sup>そもそも行列とは、ベクトル空間の線形変換の表現であることに注意。



$A, B$  がエルミート行列である場合<sup>10</sup> には、同時固有ベクトルだけでベクトル空間全体を張ることができる。

**定理 2.6.** エルミート行列  $A, B$  が与えられている。このとき以下は同値。

1.  $AB = BA$  が成り立つ。
2.  $A$  と  $B$  の同時固有ベクトルでベクトル空間全体を張ることができる。

**証明.**  $2 \Rightarrow 1$ : 同時固有ベクトル  $\{\mathbf{x}_{i,j}\}_{i,j}$  ( $A\mathbf{x}_{i,j} = a_i\mathbf{x}_{i,j}$ ,  $B\mathbf{x}_{i,j} = b_j\mathbf{x}_{i,j}$ ) がベクトル空間全体を張っているとすると、任意のベクトル  $\mathbf{y}$  は、同時固有ベクトルの線形結合の形で  $\mathbf{y} = \sum_{i,j} c_{ij}\mathbf{x}_{i,j}$  と書くことができる。このとき、 $(AB - BA)\mathbf{y} = \sum_{i,j} c_{ij}(a_i b_j - b_j a_i)\mathbf{x}_{i,j} = \mathbf{0}$  が得られる。すなわち  $AB - BA$  はゼロ行列である。これは命題 1 を意味する。

$1 \Rightarrow 2$ : ベクトル空間全体は  $A$  の固有空間の直和  $V_1^a \oplus V_2^a \oplus \dots$  で表せるので、 $B$  の固有値  $b_j$  の固有ベクトル  $\mathbf{y}_j$  は、各固有空間の元の線形結合  $\mathbf{y}_j = \sum_i c_i \mathbf{y}_{i,j}$  ( $\mathbf{y}_{i,j} \in V_i^a$ ) の形で一意的に書ける。ところが、これを固有値方程式  $B\mathbf{y}_j = b_j\mathbf{y}_j$  に代入すると

$$\sum_i c_i B\mathbf{y}_{i,j} = B\mathbf{y}_j = b_j\mathbf{y}_j = \sum_i c_i b_j \mathbf{y}_{i,j} \quad (2.20)$$

となる。定理 2.5 の証明で示したように  $B\mathbf{y}_{i,j} \in V_i^a$  なので、各固有空間の要素を比較することで、 $B\mathbf{y}_{i,j} = b_j\mathbf{y}_{i,j}$  を得る。すなわち、 $\mathbf{y}_{i,j}$  は実は  $A$  の固有値  $a_i$ 、 $B$  の固有値  $b_j$  の同時固有ベクトルであると分かる。 $\mathbf{y}_j$  たちはベクトル空間を張っており、各  $\mathbf{y}_j$  は  $\mathbf{y}_{i,j}$  たちに展開され、その一つ一つが同時固有ベクトルなので、結局ベクトル空間全体が同時固有ベクトル  $\mathbf{y}_{i,j}$  たちで張れることが示されたことになる。□

[2-2].  $3 \times 3$  のエルミート行列  $A, B$  で、一方が他方の定数倍ではなく、また  $A, B$  はともに単位行列の定数倍でもないもので、 $AB = BA$  を満たす行列の例を一つ挙げよ。

### 2.3 スペクトル理論とジョルダン標準形

行列は対角化出来ると取り扱いが楽になるが、全ての行列が対角化出来るわけではない。ここでは、対角化できない場合も含めた一般的な行列の性質や取り扱いを考察しよう。

そのためにまず、「対角化できない行列」はどのような性質を持っているのか、その行列の線形変換ではどういうことが起きるのか、を見ることにしよう。対角化できない行列の例として

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

を考えよう。固有方程式  $f_A(x) = 0$  を解くと、 $x = 2$  が重解として得られる。固有値 2 に対応する固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

であり、これ以外の固有ベクトルは存在しないことも簡単に確認できる。

では、これ以外の向きのベクトルでは何が起きているのだろうか。これと直交するベクトルとして  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  がある。このベクトルに対する線形変換  $A$  の作用は

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

<sup>10</sup>より一般に、 $A, B$  がともに対角化可能な行列ならば、以下の定理は成り立つ。

である。つまり、ベクトル  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  もまた線形変換  $A$  によって 2 倍に引き伸ばされているが、それと同時に、それと直交する向きのベクトル  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  が足されてしまっている。言い換えると、図 2 のように、伸ばすと同時に平行移動が付け加わり、この平行移動の効果のため、この変換において「向きが変わらないベクトル」はただ一つ  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  のみとなっている。

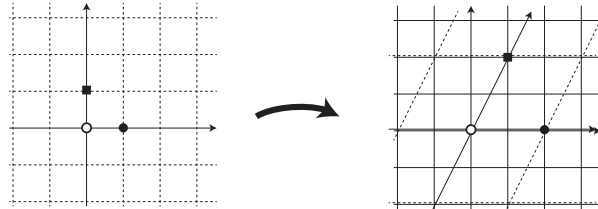


図 2: 対角化できず、一般化固有ベクトルが必要になる線形変換の例。

しかし、 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  も  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  も、ともに「その方向への長さは 2 倍に引き伸ばされる空間」の中におり、余計にくっついたベクトルもまたこの空間内のものである。つまり、この空間内だけで議論を閉じさせることが出来る。そのため、何らかの形で  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  も固有ベクトルの拡張として取り扱えないかを考えてみることにする。そのような発想で導入されるのが「一般化固有ベクトル (generalized eigenvector)」である。

固有ベクトル  $\mathbf{x}$  が固有値  $\lambda$  に対応することは、

$$(A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2.24)$$

を満たすことと同じである。そこでこれを一般化して、

$$(A - \lambda I)^m \mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2.25)$$

を満たすベクトルまで考えることにする。特に、上式を満たすが

$$(A - \lambda I)^{m-1} \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad (2.26)$$

となる  $\mathbf{x}$  を「階数  $m$  の一般化固有ベクトル」という。先程の例であれば、線形変換  $(A - 2I)$  の作用の下で

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{0} \quad (2.27)$$

と写されていくので、 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  は階数 2 の一般化固有ベクトルである。

このとき、以下の非常に重要な定理が得られる<sup>11</sup>。

**定理 2.7** (スペクトル定理<sup>12</sup> (spectral theorem)).  $n$  次元ベクトル空間の線形写像  $A$  の固有ベクトルと一般化固有ベクトル全体は、 $n$  次元ベクトル空間全体を張る。

<sup>11</sup>以下の証明は P. ラックス『線形代数』丸善出版, 第 6 章に基づく。

この定理は、線形変換  $A$  の  $n$  次元ベクトル空間への作用がどのようなものであるかに対する、一つの完全な特徴づけを行っている。

**証明.** スペクトル定理を証明するために、まず行列の多項式の作用の考察から始めよう。2つの複素係数多項式  $f(x)$  と  $g(x)$  で、共通のゼロ点を持たない、つまり  $f(x) = 0$  かつ  $g(x) = 0$  となる共通の  $x$  は存在しないものを考える。これに対し、行列の多項式  $f(A)g(A)$  が作用してゼロとなるベクトル  $\mathbf{x}$

$$f(A)g(A)\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2.28)$$

の集合  $N_{fg}$  を考えることにしよう。このとき、以下の補題が成り立つ。

**補題:** 集合  $N_{fg}$  は、 $f(A)\mathbf{y} = \mathbf{0}$  となるベクトル  $\mathbf{y}$  の集合  $N_f$  と、 $g(A)\mathbf{z} = \mathbf{0}$  となるベクトル  $\mathbf{z}$  の集合  $N_g$  との直和で書ける。つまり任意の  $\mathbf{x} \in N_{fg}$  に対し  $\mathbf{y} \in N_f$  と  $\mathbf{z} \in N_g$  が存在し、 $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{z}$  と書ける。

これを示すために、以下の事実を使う。

**事実:** 複素係数多項式  $f(x)$  と  $g(x)$  が共通のゼロ点を持たないならば、多項式  $a(x), b(x)$  が存在し、 $a(x)f(x) + b(x)g(x) = 1$  と出来る<sup>13</sup>。

上記事実により、多項式  $a(A), b(A)$  が存在し、 $a(A)f(A) + b(A)g(A) = I$  (単位行列) が満たされる。そのため、

$$\mathbf{x} = a(A)f(A)\mathbf{x} + b(A)g(A)\mathbf{x} \quad (2.29)$$

が成り立つ。

ここで

$$a(A)f(A)\mathbf{x} \in N_g, \quad b(A)g(A)\mathbf{x} \in N_f \quad (2.30)$$

が成り立つ<sup>14</sup>。このことは、式 (2.28) を用いると

$$g(A)[a(A)f(A)\mathbf{x}] = a(A)[f(A)g(A)\mathbf{x}] = \mathbf{0} \quad (2.31)$$

となることから簡単に確認できる。これはすなわち、 $\mathbf{x} \in N_{fg}$  を  $a(A)f(A)\mathbf{x} \in N_g$  と  $b(A)g(A)\mathbf{x} \in N_f$  に分解できたということである。よって補題は示された。

では本題のスペクトル定理に戻ろう。任意の  $n$  次元ベクトル  $\mathbf{u}$  について、 $n + 1$  本のベクトルの組  $\mathbf{u}, A\mathbf{u}, A^2\mathbf{u}, \dots, A^n\mathbf{u}$  は線形従属である。そのため、ある  $n$  次以下の多項式  $F$  が存在し、 $F(A)\mathbf{u} = \mathbf{0}$  が成り立つ。代数学の基本定理<sup>15</sup> により、これは複素数  $\lambda_i$  を用いて

$$F(A)\mathbf{u} = \prod_i (A - \lambda_i)^{n_i} \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (2.32)$$

と書ける。これに先程の補題を繰り返し適用することにより、任意のベクトル  $\mathbf{u}$  は、 $(A - \lambda_i)^{n_i}$  が作用するとゼロになるようなベクトルの和の形に分解できることが分かる。これはスペクトル定理そのものである。□

行列  $A$  の固有値  $a_i$  に属する固有ベクトルと一般化固有ベクトルたちが張る空間  $V_i^A$  の構造をもう少し深く考察しよう。 $m$  階の一般化固有ベクトルに  $(A - a_i I)$  を作用させると、階数が1だけ減って  $m - 1$  階の一般化固有ベクトルになる。 $(A - a_i I)$  を作用させていくと、どのようにベクトルは変化していくのだろうか。結果としては、以下のようなきれいな性質が成り立つことが導ける。

<sup>12</sup>これは行列に対するスペクトル定理であるが、いくつかの似ているがやや異なる定理が「スペクトル定理」の名で呼ばれているので注意する必要がある。特に物理において重要なのは、(一般に無限次元の場合も含めた) 自己共役演算子に対するスペクトル定理である。

<sup>13</sup>証明は、ユークリッドの互除法を多項式の割り算に対して適用することで行うことが出来る。 $f(x)$  の方が  $g(x)$  より次数が高いとすると、 $f$  を  $g$  で割ると  $f(x) = c(x)g(x) + h(x)$  (ただし  $h(x)$  は  $g(x)$  より次数は低い) となる。続けて  $g(x)$  を  $h(x)$  で割って、... を繰り返していく。もし1次以上の多項式の時点で割り切れてしまったら、その多項式が  $f(x)$  と  $g(x)$  の共通因数となるので、共通のゼロ点がないという仮定に矛盾。よって定数項まで割り切れないが、割り算のあまりである  $h(x)$  などすべて  $a(x)f(x) + b(x)g(x)$  型をしていることを思い出すと、定数項までたどり着いた際の式は、「 $a(x)f(x) + b(x)g(x) = \text{定数項}$ 」という形になる。両辺を定数項で割れば、これが欲しい式である。

<sup>14</sup>なお、 $N_f$  と  $N_g$  への分解の仕方が一意であることも同様に証明できる。

<sup>15</sup>代数学の基本定理は「任意の  $n$  次多項式は、複素数の範囲で重解を含めて  $n$  個の解を持つ」という定理。

$\mathbf{u}$  と  $\mathbf{v}$  を、固有値  $a_i$  に属する  $m$  ( $m \geq 2$ ) 階の一般化固有ベクトルとする。また両者とも、 $m-1$  階以下のすべての一般化固有ベクトルと直交しているとする。このとき、 $(A - a_i I)$  を作用させると両者は一致する、つまり

$$(A - a_i I)\mathbf{u} = (A - a_i I)\mathbf{v} \quad (2.33)$$

が成り立つならば、 $\mathbf{u} = \mathbf{v}$  である<sup>16</sup>。

これはすなわち、 $(A - a_i I)$  を繰り返し作用させて得られていくベクトルの列は、途中で分岐や合流をせずに  $\mathbf{0}$  まで到達するというを意味している。なので、 $V_i^A$  の基底が、 $(A - a_i I)$  の作用でどう変化するかを図示すると、図 3 のような構造が描ける。

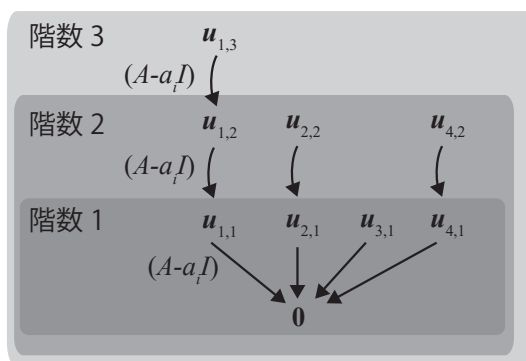


図 3:  $V_i^A$  に属する一般化固有ベクトルたちの基底の、 $(A - a_i I)$  の作用による変化のイメージ図。 $\mathbf{u}_{k,j}$  が、 $k$  番目の系列の、 $j$  階の固有ベクトルを表している。 $(A - a_i I)$  の作用は一本鎖の構造をなしており、複数の高階の一般化固有ベクトルが、 $(A - a_i I)$  の作用で同じ固有ベクトルに移ることはない。

ここまでの観察事実を用いると、任意の行列  $A$  について、適切な正則行列  $P$  が存在し、

$$PAP^{-1} = \begin{pmatrix} X^{[1,1]} & O & \dots & O \\ O & X^{[2,2]} & \ddots & O \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ O & O & \dots & X^{[m,m]} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

$$X^{[i,i]} = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_i & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \lambda_i \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

という形にブロック対角化できることを示すことが出来る<sup>17</sup>。これを「ジョルダン標準形 (Jordan normal form)」という<sup>18</sup>。また各ブロック行列  $X^{[i,i]}$  を「ジョルダン細胞 (Jordan block)」という。一つのジョルダン細胞が、先程導いた「 $(A - a_i I)$  の繰り返しの作用で得られるベクトルの系列一本」を与えるものである。ジョルダン標準形にまで持ち込めば、「左右の一般化固有ベクトル同士が双対基底の関係にあること」も簡単に見て取ることが出来る。

一つ一つのジョルダン細胞は、単位行列の定数倍  $\lambda_i I$  と、何乗かするとゼロ行列になってしまう「べき零

<sup>16</sup>【証明】  $(A - a_i I)(\mathbf{u} - \mathbf{v}) = 0$  より、 $\mathbf{u} - \mathbf{v}$  はゼロでないならば 1 階の一般化固有ベクトル (普通の固有ベクトル) である。ところが、 $\mathbf{u}$  も  $\mathbf{v}$  もともに 1 階の一般化固有ベクトルとは直交しているので、 $\mathbf{u} - \mathbf{v}$  が 1 階の一般化固有ベクトルとはなりえず、ゆえにこれはゼロベクトルである。すなわち  $\mathbf{u} = \mathbf{v}$  である。

<sup>17</sup> $P$  として一般化固有ベクトルを並べたものをとればよい。

<sup>18</sup>ジョルダン標準形に出来ることについての証明は、ここで示したものの以外に、単因子論を用いた代数的な方法が知られている。このあたりの話は堀田良之『加群十話』などに解説がある。

行列 (nilpotent matrix)  $Z$  を用いて

$$X^{[i,i]} = \lambda_i I + Z \quad (2.36)$$

と書けている。ただしべき零行列とは、ある自然数  $m$  が存在し、 $Z^m = O$  となる行列のことである。

## 2.4 行列の関数

ここでは、行列を引数にとり行列を返すような行列関数  $f(A)$  を考えよう。 $f(x)$  がもし多項式  $f(x) = \sum_n c_n x^n$  であるのならば、行列の関数はそのまま代入して  $f(A) = \sum_n c_n A^n$  と定義すればよい。一般の関数の場合には多項式では書けないが、関数を多項式で表す手法としてテイラー展開がある。これを踏まえて、多項式でない場合の行列の関数  $f(A)$  を以下のように定義する。

**定義 2.1** (行列の関数).  $f(x)$  の  $x = 0$  周りの収束半径を  $r$  とし、行列  $A$  の固有値の絶対値はすべて  $r$  未満とする<sup>19</sup>。このとき、行列の関数  $f(A)$  を

$$f(A) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} A^n \quad (2.37)$$

で定義する。

定義を見ると分かるように、行列の関数を知りたいならば、行列のべき乗が計算できる (形にする) 必要がある。べき乗計算をするには、対角化をすれば計算が非常に速くなり見通しもよくなる。なぜなら、行列のべき乗計算は

$$A^k = (X\Lambda X^{-1})^k = X\Lambda^k X^{-1} \quad (2.38)$$

と変形できるが、対角行列のべき乗はそれぞれの項を  $k$  乗するだけなのですぐに行うことができるからである。結局、

$$A^k = X \begin{pmatrix} \lambda_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^k & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n^k \end{pmatrix} X^{-1} \quad (2.39)$$

と、極めて計算が楽になる。テイラー展開にこれを代入すれば、一般に行列の関数が定義されているのであれば、行列の関数  $f(A) = \sum_n c_n A^n$  は

$$f(A) = X \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & f(\lambda_n) \end{pmatrix} X^{-1} \quad (2.40)$$

と計算できる<sup>20</sup>。なお固有ベクトル  $\mathbf{v}_i$  たちの双対基底  $\mathbf{u}_i$  が求まっているのであれば、

$$f(A) = \sum_i f(\lambda_i) \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i \quad (2.43)$$

<sup>19</sup> 収束半径の条件を満たさない場合には、適宜中心を原点から動かして解析接続を行う。

<sup>20</sup> 一般に、 $A$  を対角化可能な行列とすると、

$$f(A) = f(\lambda_i) P_i \quad (2.41)$$

と書ける。ただし  $P_i$  はフロベニウス共変

$$P_i := \prod_{j(\neq i)} \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} (A - \lambda_j I) \quad (2.42)$$

である。これを「シルベスターの公式 (Sylvester's formula)」という。

とも書ける。

[2-3]. 行列  $A := k \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$  について、 $\tan A$  を計算せよ。ただし  $k$  は  $|k| < \pi/2\sqrt{2}$  を満たす適当な実数である。

特に頻出の行列の関数に、行列の指数関数  $e^A$  がある。指数関数は収束半径  $\infty$  なので、これは任意の  $A$  でテイラー展開を用いた書き下しができる。具体的に書くと

$$e^A = I + A + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{6}A^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n \quad (2.44)$$

である。

行列の指数関数の一つの応用例として、連立微分方程式の解を見てみよう。一次の微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = ax \quad (2.45)$$

の解はもちろん  $x(t) = e^{at}x(0)$  である。これと同様に、線形連立微分方程式

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = A\mathbf{x} \quad (2.46)$$

の解は

$$\mathbf{x}(t) = e^{At}\mathbf{x}(0) \quad (2.47)$$

と、行列の指数関数を用いて簡単に解ける。これが確かに解になっていることは、行列の指数関数の微分が

$$\frac{d}{dt}e^{At} = Ae^{At} \quad (2.48)$$

となることをテイラー展開の定義に立ち返って確認すればよい。

[2-4]. 初期状態  $x(0) = x_0, y(0) = y_0$  に対する連立微分方程式

$$\frac{d}{dt}x(t) = 6x(t) + 30y(t) \quad (2.49)$$

$$\frac{d}{dt}y(t) = 30x(t) - 19y(t) \quad (2.50)$$

$$(2.51)$$

の解を求めよ。

ただし行列の指数関数は、数の指数関数の性質をすべて満たすわけではない。例えば、数の指数関数は

$$e^{a+b} = e^a e^b \quad (2.52)$$

という関係を満たすが、行列の指数関数の場合、 $A$  と  $B$  が非可換 ( $AB \neq BA$ ) ならば一般に

$$e^{A+B} \neq e^A e^B \quad (2.53)$$

である<sup>21</sup>。

<sup>21</sup>これを計算する「ベイカー・キャンベル・ハウスドルフの公式 (Baker–Campbell–Hausdorff formula)」も知られている。交換子を  $[A, B] := AB - BA$  で表すことにすると、 $e^A e^B = e^C$ 、ただし  $C$  は以下のように計算できる。

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A, [A, B]] - \frac{1}{12}[B, [A, B]] + \dots \quad (2.54)$$

量子力学の計算では、この展開を適当なところで打ち切ったものがしばしば用いられる。

ただし、以下のような極限を用いた表示が成り立つ。

**定理 2.8** (リーの積公式 (Lie product formula)). 任意の行列  $A, B$  について

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{A/n} e^{B/n} \right)^n \quad (2.55)$$

これは  $A, B$  が有限次元行列の場合の定理だが、無限次元の場合に拡張したのも証明されており、これは「リー・トロッターの積公式 (Lie-Trotter product formula)」と呼ばれる。

証明. テイラー展開すると、

$$e^{(A+B)/n} - e^{A/n} e^{B/n} = O\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (2.56)$$

である。よって

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{A/n} e^{B/n} \right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{(A+B)/n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \right)^n = e^{A+B} \quad (2.57)$$

と、求めたい関係式を得る。 □

また、 $A, B$  がエルミート行列の場合には、以下の関係が成り立つことが知られている。

**定理 2.9** (ゴールデン・トンプソンの不等式 (Golden-Thompson inequality)). 任意のエルミート行列  $A, B$  について

$$\text{Tr}[e^{A+B}] \leq \text{Tr}[e^A e^B] \quad (2.58)$$

統計力学では、カノニカル分布や分配関数の計算において  $e^A$  型の量のトレースをとる必要がよく生じるので、ハミルトニアンが二つの扱いやすい演算子の和として書けている状況 ( $H = H_1 + H_2$ ) において、この不等式が利用されることがある。証明は煩雑なので、章末の補論に回す。

なお、行列式の値は  $e^{A+B}$  と  $e^A e^B$  で一致する。

$$\det[e^{A+B}] = \det[e^A e^B] \quad (2.59)$$

証明は、リーの積公式と  $\det[XY] = \det[X] \det[Y]$  を用いればよい。

## 2.5 <補論> : 正規行列

ここまで述べてきたエルミート行列に対する性質のほとんどは、実は  $AA^\dagger = A^\dagger A$  となる行列である「正規行列 (normal matrix)」に対して成り立つ性質である。正規行列は、非エルミート量子力学<sup>22</sup> の対象のクラスの一つとしてしばしば現れる。

**定理 2.10.** 正規行列は以下の性質を満たす。

1. 正規行列の異なる固有値に属する固有ベクトル同士は互いに直交する。
2. ある行列がユニタリ対角化可能であることの必要十分条件は、その行列が正規行列であることである (テプリッツの定理 (Toeplitz theorem))

<sup>22</sup> 量子開放系や測定を受ける系のダイナミクスを、孤立した系のダイナミクスの枠組で有効的に記述する際、非エルミートなハミルトニアンが出現することがある。

証明. 1 の証明: 正規行列  $A$  の固有値  $\lambda_i$  に対応する (規格化された) 固有ベクトルを  $\mathbf{v}_i$  とする。すると、 $\|(A^\dagger - \lambda_i^* I)\mathbf{v}_i\|^2$  という量を考えると

$$\begin{aligned}\|(A^\dagger - \lambda_i^* I)\mathbf{v}_i\|^2 &= \mathbf{v}_i^\dagger (A - \lambda_i I)(A^\dagger - \lambda_i^* I)\mathbf{v}_i \\ &= \mathbf{v}_i^\dagger AA^\dagger \mathbf{v}_i - \lambda_i^* \mathbf{v}_i^\dagger A \mathbf{v}_i - \lambda_i \mathbf{v}_i^\dagger A^\dagger \mathbf{v}_i + |\lambda_i|^2 \\ &= \mathbf{v}_i^\dagger A^\dagger A \mathbf{v}_i - |\lambda_i|^2 - |\lambda_i|^2 + |\lambda_i|^2 \\ &= 0\end{aligned}\tag{2.60}$$

となるので、 $A^\dagger \mathbf{v}_i = \lambda_i^* \mathbf{v}_i$ 、すなわち  $\mathbf{v}_i$  は行列  $A^\dagger$  の固有値  $\lambda_i^*$  の固有ベクトルと分かる。あとはエルミート行列の場合と同様に

$$\lambda_i \mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j^\dagger A \mathbf{v}_i = (A^\dagger \mathbf{v}_j)^\dagger \mathbf{v}_i = \lambda_j \mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i\tag{2.61}$$

より、 $\lambda_i \neq \lambda_j$  ならば  $\mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i = 0$  が示せる。

2 の証明: まず正規行列がユニタリ対角化可能であることを示す。そのために、「上三角行列  $T$  が正規行列ならば、それは対角行列である」という補題を示す。この補題は、 $T^\dagger T$  と  $TT^\dagger$  の  $i$  番目の対角成分が等しいという関係が

$$\sum_{j=i}^n |T_{ij}|^2 = |T_{ii}|^2\tag{2.62}$$

と書けることから、 $T_{ij} = 0$  ( $j = i + 1, \dots, n$ ) を得ることで示せる。

正規行列  $A$  に対するシュア分解  $A = U^\dagger T U$  ( $T$  は上三角行列) を用いると、

$$AA^\dagger = U^\dagger T U U^\dagger T^\dagger U = U^\dagger T T^\dagger U\tag{2.63}$$

$$A^\dagger A = U^\dagger T^\dagger U U^\dagger T U = U^\dagger T^\dagger T U\tag{2.64}$$

であり、 $AA^\dagger = A^\dagger A$  より、 $TT^\dagger = T^\dagger T$ 、すなわち  $T$  も正規行列と分かる。先の補題により  $T$  は実は対角行列である。よって正規行列  $A$  はユニタリ対角化される。

逆に  $A$  が  $A = U^\dagger D U$  ( $D$  は対角行列) と対角化されるのならば

$$AA^\dagger = U^\dagger D D^\dagger U = U^\dagger D^\dagger D U = A^\dagger A\tag{2.65}$$

と、 $A$  は正規行列と分かる。よって示された。□

## 2.6 <補論>: ゴールデン・トンプソンの不等式の証明

本編で証明を与えなかった、ゴールデン・トンプソンの不等式を証明する。

証明. まず、以下の不等式を帰納法で示す<sup>23</sup>。

補題: 任意の行列  $\{X_i\}$  と自然数  $m$  に対し、

$$\left| \text{Tr} \left[ \prod_{i=1}^{2^m} X_i \right] \right|^{2^m} \leq \prod_{i=1}^{2^m} \text{Tr}[(X_i^\dagger X_i)^{2^{m-1}}]\tag{2.66}$$

$m = 1$  の場合、行列成分を素直に計算すれば結果が正しいことは確認できる。

$m = k$  の場合に成立すると仮定する。 $m = k + 1$  の場合、 $X_i = Y_{2i-1} Y_{2i}$  を  $m = k$  の場合の不等式 (2.66) に代入すると

$$\left| \text{Tr} \left[ \prod_{i=1}^{2^{k+1}} Y_i \right] \right|^{2^k} \leq \prod_{i=1}^{2^k} \text{Tr}[(Y_{2i}^\dagger Y_{2i-1}^\dagger Y_{2i-1} Y_{2i})^{2^{k-1}}]\tag{2.67}$$

<sup>23</sup>ゴールデン・トンプソンの不等式の証明では、最終的にはすべての  $X_i$  に共通の値  $C^2 D^2$  を代入する。そのため、ここで示す補題は過度の一般化をしているように思うかもしれない。しかし、帰納法で示していく際には、 $X_i$  に異なる値も代入できるという設定にしておいた方が、帰納法の仮定が強くなるので、実はこのように一般化しておいた方が証明しやすくなる。



となる。右辺の積の中はすべて同じ形なので、 $i = 1$  の場合の計算を考える。トレース巡回性を使うと

$$\mathrm{Tr}[(Y_2^\dagger Y_1^\dagger Y_1 Y_2)^{2^{k-1}}] = \mathrm{Tr}[(Y_1^\dagger Y_1 Y_2 Y_2^\dagger)^{2^{k-1}}] \quad (2.68)$$

となる。 $X_i = Y_1^\dagger Y_1$  ( $i$  が奇数の場合)、 $X_i = Y_2^\dagger Y_2$  ( $i$  が偶数の場合) と置いて、再び  $m = k$  の場合の不等式 (2.66) を用いると

$$\mathrm{Tr}[(Y_1^\dagger Y_1 Y_2 Y_2^\dagger)^{2^{k-1}}]^2 \leq \mathrm{Tr}[(Y_1^\dagger Y_1)^{2^k}] \mathrm{Tr}[(Y_2^\dagger Y_2)^{2^k}] \quad (2.69)$$

が得られる。一般の  $i$  についてのこれらの結果を式 (2.67) に代入し、全体を二乗することで、 $m = k + 1$  の場合の式

$$\left| \mathrm{Tr} \left[ \prod_{i=1}^{2^{k+1}} Y_i \right] \right|^{2^{k+1}} \leq \prod_{i=1}^{2^{k+1}} \mathrm{Tr}[(X_i^\dagger X_i)^{2^k}] \quad (2.70)$$

を得る。よって補題は示された。

さて、エルミート行列  $C, D$  に対し、全  $i$  で  $X_i = CD$  として式 (2.66) に代入すると

$$\left| \mathrm{Tr} [(CD)^{2^m}] \right| \leq \mathrm{Tr}[(D^\dagger C^\dagger CD)^{2^{m-1}}] = \mathrm{Tr}[(C^2 D^2)^{2^{m-1}}] \quad (2.71)$$

を得る。次に全  $i$  で  $X_i = C^2 D^2$  として  $m - 1$  の場合の式 (2.66) に代入して…、と繰り返していくことにより、最終的に

$$\left| \mathrm{Tr} [(CD)^{2^m}] \right| \leq \mathrm{Tr}[C^{2^m} D^{2^m}] \quad (2.72)$$

が得られる。

最後に、 $C = e^{A/2^m}$ 、 $D = e^{B/2^m}$  と置いて  $m \rightarrow \infty$  極限をとり、リーの積公式を用いることで、求めたいゴールデン・トンプソンの不等式を得る。□

### 3 正定値行列

この章では対象をエルミート行列に限定して、その重要な性質である正定値性について考える。

#### 3.1 正定値行列の性質

まずは行列の正定値性を定義しよう。行列の正定値性にはいくつかの等価な定義・特徴づけが存在する。なお、すでに見たようにエルミート行列の固有値はすべて実数であり、虚部を持たないことには注意しておく。

**定義 3.1.** エルミート行列  $A$  の固有値がすべて正であるとき、行列  $A$  は「正定値 (positive definite)」であるという<sup>24</sup>。また、エルミート行列  $A$  の固有値がすべて非負であるとき、行列  $A$  は「半正定値 (positive semidefinite)」であるという。

**定理 3.1.** エルミート行列  $A$  について、以下は同値。

1.  $A$  は半正定値 (すべての固有値が非負)
2. 任意の  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$  に対し  $\langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle \geq 0$  を満たす。
3.  $A$  はグラム行列 (Gram matrix : 行列  $B$  が存在し  $A = B^\dagger B$  と書ける)

**定理 3.2.** エルミート行列  $A$  について、以下は同値。

1.  $A$  は正定値 (すべての固有値が正)
2. 任意の  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$  に対し  $\langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle > 0$  を満たす。
3.  $A$  はフルランクな行列  $B$  のグラム行列。

これらの定義が等価であることは、エルミート行列はその固有値、固有ベクトルを用いて

$$A = \sum_i \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger \quad (3.1)$$

と書けること、 $\{\mathbf{v}_i\}$  が正規直交基底をなすことを思い出せば、すぐに示せる (各自確認しよう)。

[3-1]. 以下の性質を満たす  $2 \times 2$  実対称行列の例をそれぞれ一つずつ挙げ、それが確かにその例になっていることを示せ。

- (1). 負の行列成分を含む正定値行列。
- (2). すべての行列成分が正だが、半正定値ではない行列。

正定値、半正定値行列はいろいろなところに出てくる。例えば、量子力学では「密度行列  $\rho$ 」が一般の量子状態を表すが、これは半正定値でないといけない。この性質は、 $\langle \mathbf{v}, \rho \mathbf{v} \rangle$  が「密度行列  $\rho$  における状態  $\mathbf{v}$  の出現確率」を表しており、確率は非負でないといけないという事実を反映したものである。また、量子力学では固有値の評価を行いたいことがよくあるが、その際にも  $A \geq B$  のような行列の不等式を用いた議論がしばしばなされる。

<sup>24</sup>文献によっては「正値」と呼ぶこともある。なお、行列のすべての成分が正の実数である行列を「正行列」、非負の実数である行列を「非負行列」などと呼ぶこともある。これらは正定値性とは全く別概念なので注意が必要である。

後の章で見ると、自然な最適化問題が「 $X$  が可能なすべての半正定値行列を動く中で、 $X$  を用いた式～の値を最小化（最大化）せよ」という半正定値計画問題に帰着されることはしばしばある。これは、半正定値行列とグラム行列が同一であることから、ベクトルを動かした場合の内積に関する量の最適化問題が、半正定値行列に関する最適化問題と読み替えられるためである。後述する二次形式の理論においても、(半) 正定値性は重要な役割を果たす。

正定値、半正定値行列の重要な数学的性質をいくつか挙げておこう。

- $A, B$  が (半) 正定値、 $a > 0$  が正の実数ならば、 $A+B, aA$  は (半) 正定値である。特に  $\lambda A + (1-\lambda)B$  ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ) も (半) 正定値なので、(半) 正定値行列全体は凸集合をなす。
- $A$  が正定値なら  $A$  は正則行列であり、 $A^{-1}$  も正定値である。
- $A$  が (半) 正定値、 $X$  が正則行列なら、 $X^\dagger A X$  は (半) 正定値である<sup>25</sup>。
- $A$  がブロック行列で、対角部分のブロックが正方行列であるとする。 $A$  が (半) 正定値ならば、各ブロックの正方行列も (半) 正定値である。

これらの性質の証明も、定義に立ち返れば容易であろう。

[3-2].  $A$  が半正定値なら、 $X^\dagger A X$  は半正定値であることを示せ<sup>26</sup>。

### 3.2 行列のべき根

他にも正定値性に関連した興味深い事実が多数ある。その一つとして、行列の  $p$  乗根を考えよう。行列  $A$  の  $p$  乗根は、 $B^p = A$  を満たす行列  $B$  として定義される。これは一般に一意でないが、 $A$  が半正定値の場合、半正定値行列の範囲内では  $p$  乗根は一意に定まる。エルミート行列  $A$  は、ユニタリ行列  $U$  を用いて

$$A = U^\dagger \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) U \quad (3.2)$$

と対角化できる。 $A$  は半正定値なので、 $\lambda_i$  はすべて非負である。すると、

$$B = U^\dagger \text{diag}(\lambda_1^{1/p}, \lambda_2^{1/p}, \dots, \lambda_n^{1/p}) U \quad (3.3)$$

は  $A$  の  $p$  乗根であり、かつ半正定値である。

これ以外の半正定値行列  $B'$  で、 $(B')^p = A$  を満たすものが存在しないことは簡単に証明できる。 $B' = V^\dagger D V$  と対角化されているとする ( $D$  は対角行列)。 $(B')^p = V^\dagger D^p V = A$  で、これは  $A$  のユニタリ対角化になっているので、 $V = U$ 、 $D^p = \text{diag}(D_1^p, D_2^p, \dots, D_n^p) = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$  である。 $D_i$  たちが正の実数の範囲では、この解は  $D_i = \lambda_i^{1/p}$  に一意に定まる。

**定理 3.3.** 任意の半正定値行列  $A$  に対し、その  $p$  乗根は半正定値行列の中にただ一つ存在する。すなわち、 $A = B^p$  を満たす半正定値行列  $B$  はただ一つ存在する。

### 3.3 行列不等式

行列の正定値、半正定値性を用いて、行列の不等式が定義される<sup>27</sup>。まず行列  $A$  が正定値であることを  $A > 0$ 、半正定値であることを  $A \geq 0$  などと書く。さらにこれを用いて、二つのエルミート行列  $A, B$  について、 $A - B > 0$  である場合に  $A > B$ 、 $A - B \geq 0$  である場合に  $A \geq B$  と、行列の不等式を定義することが出来る。なお、一般には  $A - B$  も  $B - A$  も半正定値ではなく、その場合には  $A$  と  $B$  の間の大小関係は定義されない<sup>28</sup>。

<sup>25</sup>  $X^{-1}$  ではなく  $X^\dagger$  である点に注意

<sup>26</sup>  $X$  が正則行列なら、同様の議論で  $A$  が正定値なら  $X^\dagger A X$  も正定値であることを示せる。

<sup>27</sup> この節の内容は、Bhatia, "Matrix analysis", Springer の Sec.V に基づく。

<sup>28</sup> なのでここで定義された行列の不等式は半順序である。

**定義 3.2** (行列の不等式). 行列  $A, B$  について、 $A \geq B$  ( $A > B$ ) とは、 $A - B$  が半正定値 (正定値) であることを指す。

半正定値行列の 3 番目の性質により、もし  $A \leq B$  ならば、任意の行列  $X$  について

$$X^\dagger A X \leq X^\dagger B X \quad (3.4)$$

が成り立つことが分かる。この性質は基本的だが意外と役に立つ。

実数の領域  $I$  から実数への関数  $f(x)$  について、もし任意の  $x, y \in I$  に対し  $x \leq y$  ならば  $f(x) \leq f(y)$  が成り立つとき、この関数は領域  $I$  で単調であるという<sup>29</sup>。また、もし任意の  $x, y \in I$  と任意の  $0 \leq t \leq 1$  について、 $f(sx + (1-s)y) \leq sf(x) + (1-s)f(y)$  が成り立つとき、この関数は領域  $I$  で (下に) 凸であるという (不等式の向きが逆向きの場合、この関数は上に凸であるという)。これらの概念を行列の場合に拡張する。

**定義 3.3** (作用素単調関数と作用素凸関数). 行列から行列への関数  $f(X)$  が、行列の領域 (集合)  $I$  上の任意の行列  $A \leq B$  ( $A, B \in I$ ) について  $f(A) \leq f(B)$  を満たすとき、この関数は領域  $I$  上で「作用素単調 (operator monotone, matrix monotone とも)」という。

行列から行列への関数  $f(X)$  が、行列の集合  $I$  上の任意の行列  $A \leq B$  ( $A, B \in I$ ) と任意の  $0 \leq t \leq 1$  について、 $f(sA + (1-s)B) \leq sf(A) + (1-s)f(B)$  を満たすとき、この関数は領域  $I$  で (下に) 「作用素凸 (operator convex, matrix convex とも)」であるという<sup>30</sup>。

特に  $f$  が連続関数である場合には、凸性の確認は  $s = 1/2$  の場合のみ、つまり

$$f\left(\frac{A+B}{2}\right) \leq \frac{f(A)+f(B)}{2} \quad (3.5)$$

の場合だけ示せば十分である。

注意しなければならないのは、実数関数の意味で単調または凸な関数が、行列関数の意味でも作用素単調または作用素凸とは限らない点である。例えば、 $f(x) = x^2$  は実数関数の意味では  $x \geq 0$  の領域で単調な関数である。ところが、 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$ 、 $B = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$  はともに半正定値行列であり、 $B - A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \geq 0$  が満たされているが

$$B^2 - A^2 = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

は負の固有値  $\lambda_- = \frac{3-\sqrt{13}}{2}$  を持つのでこれは半正定値ではない。すなわち、 $f(X) = X^2$  は  $X \geq 0$  の領域においても単調ではない。

また  $f(x) = x^3$  は実数関数の意味では  $x \geq 0$  の領域で (下に) 凸な関数である。ところが、 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$ 、 $B = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \geq 0$  はともに半正定値行列であるが、

$$\frac{A^3 + B^3}{2} - \left(\frac{A+B}{2}\right)^3 = \begin{pmatrix} 6 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

<sup>29</sup>正確には単調増大だが、単調と略すことも多い。

<sup>30</sup>英語では、下に凸を「convex」あるいは「lower convex」、上に凸を「concave」あるいは「upper convex」という。

は負の固有値  $\lambda_- = 3 - \sqrt{10}$  を持つのでこれは半正定値でない。すなわち、 $f(X) = X^3$  は  $X \geq 0$  の領域において凸ではない。

もちろん、単調性や凸性がそのまま行列の場合にも拡張されることもある。例えば上でも見た  $f(x) = x^2$  は、行列関数の意味で作用素凸である。これは

$$sA^2 + (1-s)B^2 - (sA + (1-s)B)^2 = s(1-s)(A-B)^2 \geq 0 \quad (3.8)$$

と示すことができる。

$X > 0$  の領域における作用素単調な関数の例としては、 $f(X) = -X^{-1}$  (逆数)、 $X^{1/2}$  (平方根)、 $\ln X$  (対数) などがある。これらの単調性を順に証明しよう。

$-X^{-1}$  の単調性:  $0 < A \leq B$  とする。式 (3.4) で  $X = B^{-1/2}$  と置くことにより、 $B^{-1/2}AB^{-1/2} \leq I$  を得る。 $Y \leq I$  ならば  $Y^{-1} \geq I$  なので、 $B^{1/2}A^{-1}B^{1/2} \geq I$  である。最後に、再び式 (3.4) を用い、 $X = B^{-1/2}$  と置くことで  $A^{-1} \geq B^{-1}$  を得る。

$X^{1/2}$  の単調性:  $0 < A \leq B$  とする。上と同様の計算により、 $I \geq B^{-1/2}AB^{-1/2} = (A^{1/2}B^{-1/2})^\dagger(A^{1/2}B^{-1/2})$  なので、 $A^{1/2}B^{-1/2}$  のすべての固有値  $\lambda_i$  はその絶対値が 1 以下であることが分かる<sup>31</sup>。ここで定理 2.4 より  $XY$  と  $YX$  の固有値は一致するので、 $X = A^{1/2}B^{-1/4}$ 、 $Y = B^{-1/4}$  と置くことにより、 $\lambda_i$  たちは  $B^{-1/4}A^{1/2}B^{-1/4}$  の固有値と一致することが分かる。よって  $\lambda_i$  たちは  $0 \leq \lambda_i \leq 1$  を満たす実数であり、特に  $I \geq B^{-1/4}A^{1/2}B^{-1/4}$  である<sup>32</sup>。これにより  $B^{1/2} \geq A^{1/2}$  を得る。

$\ln X$  の単調性:  $0 < A \leq B$  とする。実数の  $\ln x$  が

$$\ln x = \int_0^\infty \left( \frac{1}{1+t} - \frac{1}{x+t} \right) dt \quad (3.9)$$

と書けること、及び正定値行列  $X$  はユニタリ対角化されることを思い出すと、行列関数  $\ln X$  は

$$\ln X = \int_0^\infty \left( \frac{1}{1+t} I - (X+tI)^{-1} \right) dt \quad (3.10)$$

と書けることが分かる<sup>33</sup>。よって

$$\ln B - \ln A = \int_0^\infty \left( (A+tI)^{-1} - (B+tI)^{-1} \right) dt \quad (3.11)$$

となるが、ここで  $-X^{-1}$  の単調性より、被積分項は半正定値であることが分かる。よって  $\ln B - \ln A \geq 0$  と分かる。

より一般に以下が成り立つ<sup>34</sup>。

**定理 3.4.**  $f(X) = -X^{-1}$ 、 $f(X) = \ln X$ 、 $f(X) = X^a$  ( $0 \leq a \leq 1$ ) は  $X > 0$  の領域において作用素単調関数である。

逆に以下のような素朴な期待は成り立たないことが知られている。

- $f(X) = X^a$  ( $1 < a$ ) は  $X \geq 0$  の領域において作用素単調な関数ではない。
- $A, B \geq 0$  であっても、 $AB + BA$  は半正定値とは限らない。

<sup>31</sup> 対応する規格化された固有ベクトル  $\mathbf{v}_i$  を用いると、 $\mathbf{v}_i^\dagger I \mathbf{v}_i \geq (A^{1/2}B^{-1/2}\mathbf{v}_i)^\dagger(A^{1/2}B^{-1/2}\mathbf{v}_i) = |\lambda_i|^2$  なので。

<sup>32</sup> 後に学ぶ特異値及び演算子ノルムを用いるならば、以下のような説明も出来る。

$I \geq (A^{1/2}B^{-1/2})^\dagger(A^{1/2}B^{-1/2})$  なので、 $1 \geq \|(A^{1/2}B^{-1/2})\| = s_{\max}(A^{1/2}B^{-1/2})$  (最大特異値) が成り立つ。ここで最大固有値は最大特異値で上から押さえられるので、 $1 \geq s_{\max}(A^{1/2}B^{-1/2}) \geq \lambda_{\max}(A^{1/2}B^{-1/2}) = \lambda_{\max}(B^{-1/4}A^{1/2}B^{-1/4})$  である。

<sup>33</sup>  $X = U^\dagger D U$  と対角化されるとすると、 $(X+tI)^{-1} = U^\dagger(D+tI)^{-1}U$  と計算出来るので、逆行列の部分は対角成分だけになり、実数の場合と同様の計算が実行できる。

<sup>34</sup>  $f(X) = X^a$  ( $0 \leq a \leq 1$ ) の単調性の証明は、 $a$  を 2 進展開し、平方根の場合と同様の議論を繰り返し適用していくことで証明出来る。詳細な証明は Bhatia, "Matrix analysis", Sec.V.1 (Theorem V.1.9) に出ている。

では次に作用素凸な関数の議論に進もう。  $X > 0$  の領域における作用素凸な関数の代表例としては、既に示した  $f(X) = X^2$  のほかに、 $X^{-1}$  (逆数)、 $\ln X$  (対数)、 $X \ln X$  などがある。

$X^{-1}$  の凸性: 鍵となるのは以下の関係式である<sup>35</sup>。

$$\begin{aligned} \left(\frac{A+B}{2}\right)^{-1} + \frac{1}{2}(A^{-1} - B^{-1})(A^{-1} + B^{-1})^{-1}(A^{-1} - B^{-1}) &= \frac{1}{2}(A^{-1} + B^{-1})(A^{-1} + B^{-1})^{-1}(A^{-1} + B^{-1}) \\ &= \frac{1}{2}(A^{-1} + B^{-1}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

これにより、

$$\frac{1}{2}(A^{-1} + B^{-1}) - \left(\frac{A+B}{2}\right)^{-1} = \frac{1}{2}(A^{-1} - B^{-1})(A^{-1} + B^{-1})^{-1}(A^{-1} - B^{-1}) \geq 0 \quad (3.13)$$

が得られるので、 $X^{-1}$  は作用素凸だと分かる。

$-\ln X$  の凸性:  $\ln X$  の単調性の場合と同様に、式 (3.9) の表示と  $X^{-1}$  の凸性とを組み合わせることで証明出来る。

$X \ln X$  の凸性:  $\ln X$  の場合と同様に、式 (3.9) の表示を利用する。 $\ln A$  の積分表示を利用すると

$$\begin{aligned} \frac{A \ln A + B \ln B}{2} - \frac{A+B}{2} \ln \frac{A+B}{2} &= \int_0^\infty \left( \frac{A}{2}(A+tI)^{-1} + \frac{B}{2}(B+tI)^{-1} - \frac{A+B}{2} \left( \frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} \right) dt \\ &= \int_0^\infty t \left( \left( \frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} - \frac{1}{2}(A+tI)^{-1} - \frac{1}{2}(B+tI)^{-1} \right) dt \end{aligned} \quad (3.14)$$

と変形できる<sup>36</sup>。被積分項の大かっこの中身は、 $X^{-1}$  の凸性より半正定値である。よってそれに  $t$  をかけて積分して得られる右辺全体もまた半正定値であり、これは  $X \ln X$  の凸性を意味している。

より一般に以下が成り立つ。

**定理 3.5.**  $f(X) = -\ln X$ 、 $f(X) = X \ln X$ 、 $f(X) = -X^a$  ( $0 \leq a \leq 1$ )、 $f(X) = X^a$  ( $-1 \leq a \leq 0$  または  $1 \leq a \leq 2$ ) は  $X > 0$  の領域において作用素凸関数である。

逆に  $f(X) = X^a$  ( $-1 \leq a \leq 0$  でも  $1 \leq a \leq 2$  でもない) は作用素凸関数ではない。

ちなみに  $X \geq 0$  上の作用素単調関数及び作用素凸関数は一般形が知られている<sup>37</sup>。

<sup>35</sup>左辺第二項の二つのカッコを展開し、 $A^{-1}(A^{-1} + B^{-1})^{-1} = (I + B^{-1}A)^{-1}$  などと項別に計算をして、再び因数分解することで1行目右辺が得られる。

<sup>36</sup>二つ目の等号では

$$\frac{A+B}{2} \left( \frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} = \left( \frac{A+B}{2} + tI \right) \left( \frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} - tI \left( \frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} = I - tI \left( \frac{A+B}{2} + tI \right)^{-1} \quad (3.15)$$

などの変形を用いている。

<sup>37</sup> $f(X)$  が  $X \geq 0$  上で作用素単調関数である必要十分条件は、 $f(x)$  が、実数  $a$ 、非負実数  $b \geq 0$ 、及び  $[0, \infty)$  上の非負の値をとる関数  $g(s)$  を用いて

$$f(x) = a + bx + \int_0^\infty \left( -\frac{1}{s+x} + \frac{s}{s^2+1} \right) g(s) ds \quad (3.16)$$

と書けることである。これを「ローナーの定理 (Loewner's theorem)」という。

また、作用素凸と作用素単調とは、以下のつながりが分かっている。ただし以下で  $f(x)$  は  $0 \leq x$  で連続な関数とする。

- $f(X)$  が作用素単調ならば、 $-f(X)$  は作用素凸。
- $-f(X)$  が作用素凸かつ  $f(\infty)$  が負の無限大に発散しないのなら、 $f(X)$  は作用素単調。
- $f(X)$  が作用素単調であることの必要十分条件は、 $Xf(X)$  が作用素凸であること。

以上の内容は、内山充「作用素単調関数と作用素凸関数」[https://www.jstage.jst.go.jp/article/sugaku1947/54/3/54\\_3\\_265/\\_pdf](https://www.jstage.jst.go.jp/article/sugaku1947/54/3/54_3_265/_pdf) による。

### 3.4 <補論>：二次形式

半正定値性と関連する話題として、二次形式の理論を見ておこう。二次形式 (quadratic form) とは、全ての項の次数が 2 の実係数多項式のことである。例えば  $3x^2 - 2xy - 6y^2$  は二次形式である。 $x_1, x_2, \dots, x_n$  の  $n$  変数の一般の二次形式は、 $a_{ij} = a_{ji}$  を満たす係数  $a$  を用いて

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} a_{ij} x_i x_j \quad (3.17)$$

と書ける。 $a_{ij}$  を行列  $A$  の  $(i, j)$  成分とすると、対称性  $a_{ij} = a_{ji}$  より  $A$  は実対称行列である。逆に、一つの実対称行列が一つの二次形式を与える。上の式は

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} \quad (3.18)$$

とも書ける。もし  $A$  が半正定値ならば、多項式  $f(\mathbf{x})$  は常に非負であることが分かる<sup>38</sup>。

実対称行列  $A$  は、適当な行列  $R$  と対角行列  $D := \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$  を用いて

$$A = R^\top D R \quad (3.19)$$

と書くことが出来る。これは対角化とは異なるという点には注意しておこう。対角化の場合は

$$A = R^{-1} D R \quad (3.20)$$

という形に書き直すことを意味していた。今回は、右辺の最初の項が  $R^{-1}$  ではなく  $R^\top$  である。 $R$  が直交行列の場合を除き、両者は一致しない。

さて、 $\mathbf{y} := R\mathbf{x}$  と定義すると

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} = \mathbf{y}^\top D \mathbf{y} \quad (3.21)$$

となる。 $D$  は対角行列、 $\mathbf{y}$  の各項は  $x_1, \dots, x_n$  の一次式なので、上の変形は、与えられた二次形式  $f(\mathbf{x})$  を「 $(n$  個以下の) 独立な一次式の平方の線形和」の形

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i d_i y_i^2 = \sum_i d_i \left( \sum_j R_{ij} x_j \right)^2 \quad (3.22)$$

と書きなおしたのものである。逆に、二次形式を「独立な一次式の平方の線形和」の形で書きたいならば、式 (3.19) の形の表示が得られれば良い。

さて、対角化の方法は本質的には一通りしかない<sup>39</sup> が、式 (3.19) の形の表示は複数存在する点も、対角化との違いである。例えば、単位行列は二次形式  $x^2 + y^2$  に対応する ( $x_1 = x, x_2 = y$  とした) が、この二次形式を「二つの一次式の平方の線形和」で書く方法は

$$x^2 + y^2 = \frac{1}{2}(x+y)^2 + \frac{1}{2}(x-y)^2 = \frac{1}{5}(2x+y)^2 + \frac{1}{5}(x-2y)^2 = \dots \quad (3.23)$$

と多数ある。一般に

$$x^2 + y^2 = \frac{1}{a^2 + b^2}(ax + by)^2 + \frac{1}{a^2 + b^2}(bx - ay)^2 \quad (3.24)$$

という形で書けるので、本質的に異なる形の表示が無数に存在する。これに対応して、実対称行列も

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2+b^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{a^2+b^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

と、式 (3.19) の形の表示が無数にある。実対称行列は直交行列を用いて対角化できるので、直交行列によ

<sup>38</sup>なお、もし  $A$  が正定値であっても、多項式  $f(\mathbf{x})$  は常に正とは限らない点には注意しておく。実際、すべての  $i$  で  $x_i = 0$  ならば、この多項式は 0 になる。

<sup>39</sup>対角化するために掛ける行列は固有ベクトルを並べたものだが、固有ベクトルを並べる順番、及び固有ベクトルを定数倍する自由度が常に存在する。この自由度を除くという意味で「本質的には一通り」と書いた。

る対角化は式 (3.19) の一つの例になっているが、それ以外の表し方も一般に多数ある。

このように、与えられた二次形式に対する式 (3.22) や実対称行列に対する式 (3.19) の形の表示は一般に無数にあるのだが、しかしこのとき現れる対角行列  $D$  の対角成分（あるいは係数  $d_i$ ）は以下を満たす<sup>40</sup>。

**定理 3.6** (シルベスターの慣性法則). 対角行列  $D$  の対角成分  $d_1, \dots, d_n$  中の「正の成分の数」「負の成分の数」「ゼロの成分の数」は、すべての式 (3.19) 形の表示で同じである。

---

<sup>40</sup> 証明を知りたい人は、佐武一郎『線形代数学』、山本哲郎『行列解析の基礎』などを見ていただきたい。



## 4 特異値

この章では、行列を特徴づける重要な量である「特異値」を導入する。特異値は固有値と密接に関連しているが、固有値とは異なる新しい量である。量子力学における複合系のシュミット分解は、特異値分解そのものとして理解することができる。量子系に対する操作や情報科学における様々な処理が、特異値を用いて評価できることも少なくない。

次章で見ると、特異値を利用して行列に対する「ノルム」も導入できる。行列ノルムは、直観的には行列の「大きさ」を定量化したものであり、物理の様々な場所に現れる。

### 4.1 特異値分解

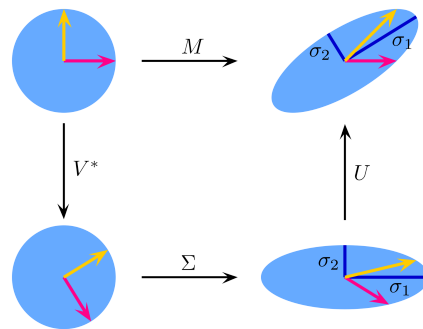
「特異値分解」とは、任意の行列  $A$  に対する以下のような分解である。

**定理 4.1** (特異値分解 (singular value decomposition)). 任意の行列  $A$  は、ユニタリ行列  $U, V$  と、対角成分が非負実数の対角行列  $D$  を用いて

$$A = UDV^\dagger \quad (4.1)$$

と書ける。これを「特異値分解」という。また特異値分解の対角行列に現れる対角成分の数を「特異値 (singular value)」という。

ユニタリ対角化の場合と違い、 $U$  と  $V$  は一般に異なるユニタリ行列である。特異値分解のイメージは、図 4 を見ると分かりやすいだろう。これは  $M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  に対する特異値分解の例である。



$$M = U \cdot \Sigma \cdot V^*$$

図 4: 特異値分解のイメージ図。  $V^*$  で基底の向きを変換し、対角行列  $\Sigma$  で各直交軸方向に伸縮を行い、 $U$  で再び向きを変えている。画像は Wikipedia「特異値分解」より引用。

なお、特異値分解は正方でない行列に対しても実行できる。この場合、真ん中の対角行列は「(ある範囲の) 対角成分のみ非負実数を取り、他はゼロ」という正方でない行列、二つのユニタリ行列はそれぞれ適切なサイズの正方行列となる<sup>41</sup>。以下では、特に断らない場合は正方行列を考察対象とする。

任意の行列の特異値分解が可能であることを示すために、まず「極分解 (polar decomposition)」を導入

<sup>41</sup> 正方行列でない場合には、例えば以下のような特異値分解ができる

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

しよう。これは複素数における極形式の一般化とも見れるものである。任意の複素数  $z$  は

$$z = re^{i\theta} \quad (4.3)$$

と書ける。複素数をかけることを「複素数から複素数への変換」とみなすことができる（複素数  $a$  を複素数  $b = za$  に変換する）。すると、極形式における  $r$  は「 $a$  に対する動径方向の拡大・縮小」、 $e^{i\theta}$  は「原点中心の回転」とみなすことができる。

実は、一般の行列による変換も、このように「拡大・縮小」と「回転」の二つの要素に分けられる。任意の行列  $A$  は、半正定値エルミート行列  $H$  とユニタリ行列  $U$  とを用いて

$$A = HU \quad (4.4)$$

と書くことができる。これは「極分解 (polar decomposition)」と呼ばれる分解である。すでに見たように、エルミート行列の固有ベクトルは互いに直交している。なので、半正定値エルミート行列  $H$  は、ある直交座標に沿って、各軸をそれぞれの固有値だけ拡大・縮小させる変換を表している。一方、ユニタリ行列は座標の回転変換を表している。このように極分解は、線形変換  $A$  を「拡大・縮小」と「回転」に分解するものだと理解できる。

証明. まず極分解が可能であることを示そう<sup>42</sup>。任意の行列  $A$  に対し、 $A^\dagger A$  を考えると、これは半正定値エルミート行列である。 $A^\dagger A$  の規格化された固有ベクトルを  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$  とする。対応する固有値は、 $\lambda_1, \dots, \lambda_k$  は正、 $\lambda_{k+1}, \dots, \lambda_n$  はゼロとする。 $A^\dagger A$  はエルミートなので、 $\{\mathbf{u}\}$  たちは正規直交基底をなす。

ここで、別の正規直交基底  $\{\mathbf{v}\}$  として、 $\mathbf{v}_i = \lambda_i^{-1/2} A \mathbf{u}_i$  ( $i = 1, \dots, k$ ) を満たすものとする<sup>43</sup>。この  $\mathbf{v}_i$  同士が互いに直交することは直接代入して容易に確認できる。すると、 $U = \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\dagger$  と置くと、この  $U$  は確かに

$$U^\dagger U = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\dagger \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\dagger = \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^\dagger = I \quad (4.6)$$

を満たすのでユニタリである。さらに

$$AU^{-1} = AU^\dagger = \sum_{i=1}^n A \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\dagger = \sum_{i=1}^k \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger = \sum_{i=1}^n \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger \quad (4.7)$$

となり、これはエルミートである。よって  $H = \sum_{i=1}^n \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\dagger$  と置けば、 $A = HU$  と極分解される。

特異値分解が可能であることは、極分解が可能であることから直ちに従う。エルミート行列  $H$  はユニタリ対角化可能なので、ユニタリ行列  $W$  と対角行列  $D$  を用いて  $H = W^\dagger D W$  の形で書くことができる。 $WU = V$  とユニタリ行列  $V$  を定義すれば、 $A = W^\dagger D V$  と特異値分解できる。□

[4-1].  $W^\dagger$  と  $V^\dagger$  は、それぞれ  $AA^\dagger$  及び  $A^\dagger A$  の固有ベクトルを並べたものであることを示せ。

また、これを利用して行列  $\begin{pmatrix} 6 & 0 & 6 \\ 2 & 4 & -5 \end{pmatrix}$  を特異値分解せよ。

特異値には、特異値分解によるものとはまた別の標準的な定義の仕方もある。両者は等価な定義を与える。

**定理 4.2.** 任意の行列  $A$  について、 $A^\dagger A$  は半正定値エルミート行列なので、その固有値  $\lambda_i$  は非負の実数であり、その平方根  $s_i = \sqrt{\lambda_i}$  を定義することができる。この  $s_i$  たちは、特異値と一致する。

<sup>42</sup>  $A$  が正則である場合には、以下のように簡単な証明ができる。

もし  $A = HU$  と書けていたとすると、 $AA^\dagger = HUU^\dagger H^\dagger = H^2$  なので、 $H = (AA^\dagger)^{1/2}$  でないといけない。定理 3.3 で見たように行列のべき根は一意的なので、もし  $A$  が極分解されるのであれば、 $H$  はこの形で一意的に定まる。 $A$  の正則性の仮定により、 $A^{-1}$  と  $H^{-1}$  が存在する。ここで実は  $U = H^{-1}A$  はユニタリ行列である。この事実は、自身とその複素転置を掛けると

$$(H^{-1}A)^\dagger H^{-1}A = A^\dagger [(AA^\dagger)^{-1/2}]^\dagger (AA^\dagger)^{1/2} A = A^\dagger (AA^\dagger AA^\dagger)^{-1/2} A = A^\dagger (AA^\dagger)^{-1} A = A^\dagger (A^\dagger)^{-1} A^{-1} A = I \quad (4.5)$$

と単位行列になることから確認できる。

<sup>43</sup>  $i = k+1, \dots, n$  については、正規直交基底をなすようになっていれば自由にとって構わない。

これが同じ特異値の定義を与えることは、 $A = UDV^\dagger$  と特異値分解されているとすると、 $A^\dagger A = VD^2V^\dagger$  とユニタリ対角化の形に書けることから直ちに従う。

## 4.2 特異値の性質

特異値の満たす性質をいくつか見ておこう。

定理 4.3. 正方行列  $A$  の特異値  $\{s_i\}$  について以下が成り立つ

$$|\det A| = \prod_{i=1}^n s_i \quad (4.8)$$

[4-2]. 上記定理を証明せよ。

定理 4.4. 行列  $A$  の特異値を  $\{s_i\}$ 、固有値を  $\{\lambda_i\}$  とする。このとき以下が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \leq \sum_{i=1}^n s_i^2 = \sum_{i,j} |A_{ij}|^2 \quad (4.9)$$

証明. シューア分解 (定理 2.3) を  $A$  に適用し、上三角行列  $T = UAU^\dagger$  を得る。[2-1] より、 $T$  の対角成分は  $A$  の固有値  $\{\lambda_i\}$  の並べ替えである。

ここで

$$\mathrm{Tr}[TT^\dagger] = \sum_i |T_{ii}|^2 + \sum_{i < j} |T_{ij}|^2 \geq \sum_i |T_{ii}|^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 \quad (4.10)$$

である一方、

$$\mathrm{Tr}[TT^\dagger] = \mathrm{Tr}[UAA^\dagger U^\dagger] = \mathrm{Tr}[AA^\dagger] = \sum_{i,j} |A_{ij}|^2 \quad (4.11)$$

であり、 $AA^\dagger$  はエルミート行列なのでそのユニタリ対角化を思い出せば

$$\mathrm{Tr}[AA^\dagger] = \sum_{i=1}^n s_i^2 \quad (4.12)$$

である<sup>44</sup>。よって示された。 □

## 4.3 最小二乗法と一般逆行列

これまで小中高や大学では様々な実験を行ったと思うが、実験で得られるデータは図 5 左のようにばらついたものであったと思う。これに対し、誤差を最小とるように図 5 右のようにデータをフィットしたことはあるだろう。特に、誤差を「ずれの二乗」で定義して、その誤差を最小にするようにするフィットする方法を「最小二乗法 (least squares method)」という。今回は特に簡単な場合として、多項式でフィッティングする状況を考える<sup>45</sup>。

与えられたデータ点を  $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$  とする。これを  $k$  次の多項式でなるべくよく近似することを考える。ただし  $k \simeq N$  だと過学習 (overfitting)<sup>46</sup> が生じうるため、 $k \ll N$  という状況で考える。我々

<sup>44</sup>  $H = U^\dagger D U$  とユニタリ対角化されるとすると、 $\mathrm{Tr}[H] = \mathrm{Tr}[U^\dagger D U] = \mathrm{Tr}[D U U^\dagger] = \mathrm{Tr}[D]$  と計算できる。

<sup>45</sup> 本節の内容は、山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社、第 4 章に基づく。本節の説明が分かりにくいと感じたら、こちらも読んでみていただきたい。

<sup>46</sup> 例えば 9 つのデータ点に対し、8 次関数を用いればすべてのデータ点を通る関数を作ることは出来る。しかし、それだと一般に関数は大きく暴れており、次の 10 個目のデータに対する予測能力は (例えば線形や二次などで近似した場合に比べて) 著しく低くなってしまふ。このような状況を「過学習」という。

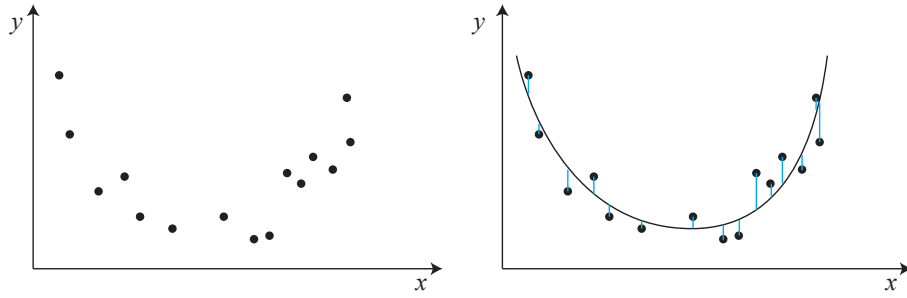


図 5: 左: 最小二乗法の問題設定。与えられたデータ点をよく近似する簡単な多項式関数を探す。右: 二次関数でフィットした例。図の青線の二乗の和を最小化するのが最小二乗法である。

は、 $f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_kx^k$  として

$$S = \sum_{i=1}^N |f(x_i) - y_i|^2 \quad (4.13)$$

を最小にするような  $c_0, \dots, c_k$  の組を求めたい。これを行列表示すると

$$X := \begin{pmatrix} x_1^k & x_1^{k-1} & \dots & x_1 & 1 \\ x_2^k & x_2^{k-1} & \dots & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ x_N^k & x_N^{k-1} & \dots & x_N & 1 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

$$\mathbf{c} := \begin{pmatrix} c_N \\ \vdots \\ c_0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

$$\mathbf{y} := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

について、 $X$  と  $\mathbf{y}$  が与えられた状況で

$$S = |\mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{y}|^2 \quad (4.17)$$

を最小化するような  $\mathbf{c}$  を求める問題となる。以下では、より一般的な形の問題として、上記の形の  $X$  と  $\mathbf{y}$  に限らず、一般の  $X$  と  $\mathbf{y}$  に対し、式 (4.17) で与えられる  $S$  を最小化する問題を考えることにしよう。

この問題は、もし  $X$  が正方行列 ( $k = N$ ) かつ正則行列ならば、 $\mathbf{c} = X^{-1}\mathbf{y}$  とすれば  $S = 0$  となり、簡単に解が求まる。だが我々の関心がある状況は  $X$  が非常に縦長の行列である状況 (行数が列数と比べて非常に多い。  $k \ll N$  という事) であり、そのため逆行列はそもそも存在しないし、 $S = 0$  となるような  $\mathbf{c}$  も一般には存在しない。このような状況であっても、逆行列を一般化した「一般逆行列」を定義することができ、これを用いて原理的には最小二乗法を<sup>47</sup> 解くことができる。

<sup>47</sup>実際に数値的に最小二乗法を解く状況では、一般逆行列を用いる方法は計算コストが膨大になるためあまり用いられていない。

定義 4.1 (一般逆行列<sup>48</sup> (generalized inverse)).  $N \times m$  行列  $X$  ( $N \geq m$ ) の特異値分解が

$$X = U\Lambda_{Nm}(s_1, s_2, \dots, s_{m'})V \quad (4.18)$$

で与えられるとする。ただし  $U, V$  はそれぞれ  $N \times N$ ,  $m \times m$  のユニタリ行列であり、 $m'$  は  $X$  のゼロでない特異値の個数、 $\Lambda_{Nm}(s_1, s_2, \dots, s_{m'})$  は  $(1, 1) \sim (m', m')$  成分がそれぞれ  $s_1 \sim s_{m'}$  であり、残りの成分が全て 0 であるような  $N \times m$  行列である。

このとき、 $X$  の一般逆行列を

$$X^+ = V^\dagger \Lambda_{mN}\left(\frac{1}{s_1}, \frac{1}{s_2}, \dots, \frac{1}{s_{m'}}\right) U^\dagger \quad (4.19)$$

と定義する。

定義を代入することにより、一般逆行列  $X^+$  が以下を満たすことは容易に確認できる。

$$X^+ X X^+ = X^+, \quad X X^+ X = X \quad (4.20)$$

また同じく定義を代入することにより、 $X X^+$  および  $X^+ X$  はエルミート行列であること、さらにその固有値は 1 と 0 の二通りの値のみであることが確認できる。つまり、 $X X^+$  および  $X^+ X$  はある部分空間への射影行列 (projection matrix) である。(なお、与えられた  $X$  に対し、 $X^+ X X^+ = X^+$  と  $X X^+ X = X$  が成り立ち、 $X X^+$  および  $X^+ X$  がエルミート行列であるような行列  $X^+$  は、式 (4.19) で定義された行列しか存在しないことが証明されている<sup>49</sup>。そのため、一般逆行列はこの意味で一意的である。)

この一般逆行列を用いて最小二乗法を解くことが出来る。

定理 4.5.  $\mathbf{c}^* = X^+ \mathbf{b}$  とする。このとき、任意の  $m$  次元ベクトル  $\mathbf{c}$  について

$$|X\mathbf{c}^* - \mathbf{b}| \leq |X\mathbf{c} - \mathbf{b}| \quad (4.21)$$

が成り立つ。すなわち  $\mathbf{c}^*$  は最小二乗解となる。

証明. 示すべきは以下の不等式である。

$$|X X^+ \mathbf{b} - \mathbf{b}| = |-(I - X X^+) \mathbf{b}| \leq |X\mathbf{c} - \mathbf{b}| \quad (4.22)$$

既にみたように  $X X^+$  はある部分空間  $V$  への射影行列である。そのため  $I - X X^+$  はその補空間  $V^\perp$  への射影行列である。さらに、式 (4.20) より

$$(I - X X^+) X \mathbf{c} = X \mathbf{c} - (X X^+ X) \mathbf{c} = X \mathbf{c} - X \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad (4.23)$$

が成り立つ。すなわち、ベクトル  $X \mathbf{c}$  は部分空間  $V^\perp$  と直交している。よって、ベクトル  $X \mathbf{c} - \mathbf{b}$  を部分空間  $V^\perp$  に射影して得られるベクトルは、 $\mathbf{b}$  を部分空間  $V^\perp$  に射影して得られるベクトルに等しく、 $-(I - X X^+) \mathbf{b}$  だと分かる。ベクトルは、射影するとノルムが小さくなる<sup>50</sup> ことが知られているので、 $|X \mathbf{c} - \mathbf{b}| \geq |(I - X X^+)(X \mathbf{c} - \mathbf{b})| = |-(I - X X^+) \mathbf{b}|$  と求めたい不等式が得られた。□

<sup>48</sup> 「ムーア・ペンローズ逆行列 (Moore-Penrose inverse)」「疑似逆行列 (psuedoinverse)」などとも呼ばれる。

<sup>49</sup> 証明は例えば山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社 4.2 節に出ている。

<sup>50</sup> 「 $\mathbf{a}$  と  $\mathbf{b}$  が直交しているとき、 $|\mathbf{a} + \mathbf{b}| \geq |\mathbf{a}|$  が成り立つ」と言ってもよい。

## 5 ノルム

### 5.1 ベクトルのノルム

まずベクトル空間の元に対する「ノルム」というものを導入しよう。ノルムは、ベクトル空間の元のある種の「長さ」を定量化するものである。

**定義 5.1** (ノルム (norm) )。ノルム  $|\cdot|$  とは、以下の性質を満たす  $K$  上<sup>51</sup>のベクトル空間  $V$  から非負実数  $\mathbb{R}^{\geq 0}$  への写像である。ただし以下  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ 、 $a \in K$  である。

- 独立性:  $|\mathbf{x}| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$
- 斉次性:  $|a\mathbf{x}| = |a| |\mathbf{x}|$
- 劣加法性:  $|\mathbf{x} + \mathbf{y}| \leq |\mathbf{x}| + |\mathbf{y}|$

ベクトル  $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$  の代表的なノルムとしては、以下の  $p$ -ノルムがある。

**定義 5.2** ( $p$ -ノルム)。ベクトル  $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$  の  $p$ -ノルム ( $1 \leq p$ ) を

$$|\mathbf{x}|_p := \left( \sum_i |x_i|^p \right)^{1/p} \quad (5.1)$$

で定義する。ただし  $p = \infty$  の場合は

$$|\mathbf{x}|_\infty := \max_i |x_i| \quad (5.2)$$

で定義する。

$p = \infty$  の場合は、 $p \rightarrow \infty$  の極限としても得ることができる ( $\lim_{p \rightarrow \infty} |\mathbf{x}|_p = |\mathbf{x}|_\infty$ )。  $p = 2$  の場合は「ユークリッドノルム」、 $p = \infty$  の場合は「最大値ノルム」とも呼ばれる。特に注記がない場合、ベクトルのノルムはユークリッドノルムを指している場合が多い。この講義ノートでもその慣習に従う。

$p$ -ノルムが本当にノルムであること、すなわちノルムの公理を満たしていること、は確認する必要がある。独立性と斉次性は明らかなので、非自明なのは劣加法性である。この証明はいささか難しいので、この章の後半の 5.3 節で示すことにする。

一般のノルム  $|\cdot|$  が与えられると、そのノルムを用いて  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$  と定義することにより、2つの元  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  の間の「距離 (distance)」を定義することができる。このように定義された距離は、確かに距離の公理<sup>52</sup>を満たしている。なお、すべてのノルムは対応する距離を持つが、対応するノルムを持たない距離も定義できる<sup>53</sup>。

$p$ -ノルムは以下の性質を満たす。

**定理 5.1.** 任意の  $\mathbf{x}$  と  $1 \leq p \leq q$  に対し

$$|\mathbf{x}|_p \geq |\mathbf{x}|_q \quad (5.3)$$

<sup>51</sup>体  $K$  には絶対値が定義されている必要がある。  $K$  は実数  $\mathbb{R}$  または複素数  $\mathbb{C}$  にとるのが普通である。

<sup>52</sup> $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  が距離であるためには

- 非退化性:  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$
- 対称性:  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{y}, \mathbf{x})$
- 三角不等式:  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + d(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \geq d(\mathbf{x}, \mathbf{z})$

を満たす必要がある。なお、これらの性質から非負性  $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0$  は導出できる。

<sup>53</sup>最も極端な例は、 $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  として、 $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  のときは 0、 $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$  のときは常に 1 とする「離散距離 (discrete metric)」である。

証明.  $a := \frac{q}{p} \geq 1$ ,  $z_i := |x_i|^p$  と置くと、証明すべき式は

$$\left( \sum_i z_i \right)^a \geq \sum_i z_i^a \quad (5.4)$$

と書ける。 $f(t) = t^a$  は単調増大かつ下に凸な関数なので、 $t$  が大きいほど傾きも大きくなる。よって  $(t+s)^a \geq t^a + s^a$  が成り立つ。これを用いて、要素数  $n$  に対する帰納法により<sup>54</sup>、求める式 (5.4) を得る。□

定理 5.2. 任意の  $\mathbf{x}$  に対し

$$|\mathbf{x}|_1 \leq \sqrt{n} |\mathbf{x}|_2 \leq n |\mathbf{x}|_\infty \quad (5.5)$$

証明. 以下、記述を簡単にするため、 $x_i$  は実かつ非負として、絶対値は外して記述する。

一つ目の不等式は

$$\left( \sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \leq n \sum_{i=1}^n x_i^2 \quad (5.6)$$

と書ける。この不等式は、左辺を展開して相加相乗平均の不等式  $2xy \leq x^2 + y^2$  を適用することで直ちに示せる。

二つ目の不等式は

$$\sum_{i=1}^n x_i^2 \leq n \left( \max_i x_i \right)^2 \quad (5.7)$$

と書けるが、これは  $\max$  の定義より明らかである。□

## 5.2 行列のノルム

では次に行列のノルムを定義しよう。まず、よく用いられる行列のノルムである「シャッテンノルム」を導入する。

定義 5.3 (シャッテンノルム (Schatten norm)).  $n \times n$  行列  $A$  の特異値を  $s_1, \dots, s_n$  とする。このとき、行列  $A$  のシャッテン  $p$ -ノルムは、特異値を並べたベクトルの  $p$ -ノルム、すなわち

$$\|A\|_p := \left( \sum_{i=1}^n s_i^p \right)^{1/p} \quad (5.8)$$

で定義する。

$p = \infty$  の場合は、シャッテンノルムは最大特異値

$$\|A\|_\infty := \max_i s_i \quad (5.9)$$

であり、これは特に「演算子ノルム (operator norm)」または「スペクトルノルム (spectral norm)」と呼ばれる。

行列のノルムとして、演算子ノルムは特によく用いられる。添え字を付けずにただ  $\|A\|$  と書いた場合、演算子ノルムを指すことが多い。この講義でもそのような表記を用いる。それ以外のよく用いられるシャッテンノルムでは、 $p = 1$  の場合が「トレースノルム (trace norm)」、 $p = 2$  の場合が「フロベニウスノルム (Frobenius norm)」と呼ばれている。

<sup>54</sup> 求める式は  $(\sum_{i=1}^n z_i)^a \geq \sum_{i=1}^n z_i^a$  と書ける。 $n = k$  で成り立つと仮定する。 $n = k+1$  の場合、帰納法の仮定と  $(t+s)^a \geq t^a + s^a$  を用いて  $(\sum_{i=1}^{k+1} z_i)^a = ((\sum_{i=1}^k z_i) + z_{k+1})^a \geq (\sum_{i=1}^k z_i)^a + z_{k+1}^a \geq \sum_{i=1}^{k+1} z_i^a$  と示せる。

シャッテンノルムが確かにノルムの公理を満たすことは確認する必要がある。独立性と斉次性は明らかなので、非自明なのは劣加法性である。この証明はいささか面倒なので、後の 8.3 章で示すことにする。

特異値の性質より、任意のユニタリ行列  $U, V$  に対し、明らかに

$$\|UAV\|_p = \|A\|_p \quad (5.10)$$

が成り立つ。またシャッテン  $p$ -ノルムは特異値を並べたベクトルに対する  $p$ -ノルムなので、定理 5.1、定理 5.2 より以下が直ちに従う。

**定理 5.3.** 任意の  $A$  と  $1 \leq p \leq q$  に対し

$$\|A\|_p \geq \|A\|_q \quad (5.11)$$

**定理 5.4.** 任意の  $A$  に対し

$$\|A\|_1 \leq \sqrt{n}\|A\|_2 \leq n\|A\|_\infty \quad (5.12)$$

式 (4.9) の右の等式より、 $p = 2$  のフロベニウスノルムは行列の各成分を二乗して足したものと一致する。

$$\|A\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2 \quad (5.13)$$

次に、シャッテンノルムとは別の、よく用いられる行列のノルムである「誘導ノルム」を定義しよう。

**定義 5.4** (誘導ノルム (induced norm)).  $p$ -ノルムが誘導する行列ノルム  $\|\cdot\|_p^{\text{ind}}$  を

$$\|A\|_p^{\text{ind}} = \max_{\|\mathbf{x}\|_p=1} \|A\mathbf{x}\|_p \quad (5.14)$$

で定義する<sup>55</sup>。

[5-1].  $p = 1$  および  $p = \infty$  の誘導ノルムは、それぞれ絶対値をとった行列成分の行および列における和の最大値に一致する、すなわち

$$\|A\|_1^{\text{ind}} = \max_j \sum_i |A_{ij}| \quad (5.15)$$

$$\|A\|_\infty^{\text{ind}} = \max_i \sum_j |A_{ij}| \quad (5.16)$$

が成り立つことを示せ。

行列を線形変換として見ることにすると、誘導ノルムは、対応するベクトルノルムで見て「その線形変換はどのくらいベクトルを引き延ばせるか」の上限を与える量となる。特に重要なのは、通常のノルム (ユークリッドノルム) である  $p = 2$  の場合である。

<sup>55</sup> $p$ -ノルムに限らない一般のベクトルノルムに対しても、誘導ノルムを定義することはできる。



定理 5.5. ユークリッドノルムの誘導ノルムは、演算子ノルムと一致する。

$$\|A\|_2^{\text{ind}} = \|A\|_\infty \quad (5.17)$$

証明.

$$(\|A\|_2^{\text{ind}})^2 = \max_{|\mathbf{x}|=1} \mathbf{x}^\dagger A^\dagger A \mathbf{x} = \lambda_{\max}(A^\dagger A) = s_{\max}^2(A) = \|A\|_\infty^2 \quad (5.18)$$

ただし二つ目の等式では、エルミート行列  $A^\dagger A$  の最大固有値の表示を用いた。□

この性質があるため、演算子に関する不等式評価では、演算子ノルムを用いた不等式がよく表れる。例えば量子力学では、ハミルトニアンが大きければ大きいほど素早く時間発展できるので、時間発展の速度を評価する際には「ハミルトニアンの大きさ」を用いた不等式評価を行いたいが、その際には演算子ノルムがしばしば用いられる。また、観測物理量のゆらぎが小さいことを示したい場合には、ゆらぎを「観測物理量のとりうる大きさ×小さい量」のような形で上から押さえることになるが、この際の「観測物理量の大きさ」が演算子ノルムで評価されることも多い。

定義 5.5. 行列  $A$  の固有値の絶対値の最大値  $\rho(A) := \max_i |\lambda_i|$  を、行列  $A$  の「スペクトル半径 (spectral radius)」という。

定理 5.6. 任意の誘導ノルム<sup>56</sup>はスペクトル半径よりも大きい。

$$\rho(A) \leq \|A\|_p^{\text{ind}} \quad (5.19)$$

証明. 最大固有値を  $\lambda_{\max}$  と書く。  $|\mathbf{x}|_p = 1$  となる固有ベクトルを用いた固有値方程式  $A\mathbf{x} = \lambda_{\max}\mathbf{x}$  の両辺のノルムを考えることで

$$|A\mathbf{x}|_p = |\lambda_{\max}\mathbf{x}|_p = |\lambda_{\max}| |\mathbf{x}|_p = |\lambda_{\max}| \quad (5.20)$$

を得る。  $|\mathbf{x}|_p = 1$  の条件下では  $|A\mathbf{x}|_p \leq \|A\|_p^{\text{ind}}$  なので、任意の誘導ノルムでスペクトル半径は上から押さえられる。□

[5-2].  $2 \times 2$  行列で、演算子ノルムがスペクトル半径よりも真に大きい例を一つ挙げよ。

### 5.3 劣加法性の証明 (不等式の技法紹介)

この節では、 $p$ -ノルムが劣加法性を満たすことを証明する。劣加法性の証明には、いろいろな不等式を用いる必要がある。不等式の利用は物理の問題を扱ううえでも非常に重要なので、この節にはそうした不等式の紹介という側面もある。

定理 5.7 (ジェンセンの不等式 (Jensen's inequality)).  $f(x)$  を下に凸な関数、  $\{c_i\}_{i=1}^n$  を、  $c_i \geq 0$ 、  $\sum_{i=1}^n c_i = 1$  を満たす任意の係数とする。このとき、任意の  $\{x_i\}_{i=1}^n$  について以下の不等式が成り立つ。

$$f\left(\sum_{i=1}^n c_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) \quad (5.21)$$

関数が上に凸の場合は、不等式の向きが逆向きになる。

<sup>56</sup>これは  $p$ -ノルムが誘導したノルムに限らず、一般の誘導ノルムで成り立つ。

ジェンセンの不等式は、 $n = 2$  の場合は凸の定義そのもので、 $n \geq 3$  の場合は数学的帰納法によって証明することができる<sup>57</sup>。ここでは以下の図 6 を見ることで、それが成り立つことを図形的に確認するとどめる。

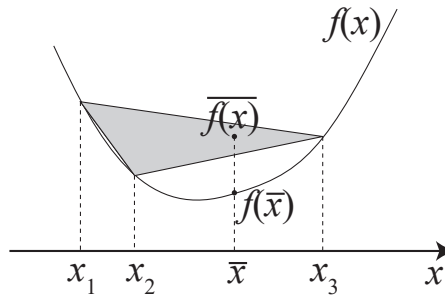


図 6: ジェンセンの不等式が成り立つ理由を表した図。ただし  $\bar{x} := \sum_{i=1}^n c_i x_i$ 、 $\overline{f(x)} := \sum_{i=1}^n c_i f(x_i)$  である。 $\overline{f(x)}$  が常に灰色の多角形の中にあるのに対し、 $f(\bar{x})$  は常に関数  $y = f(x)$  の曲線上で、これは灰色の領域よりも下にある。

ちなみに p-ノルムとは直接関係ないが、Jensen の不等式を利用すると、 $x_i \geq 0$  に対して成り立つ相乗平均の不等式 (inequality of arithmetic and geometric means)

$$\frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n} \geq \sqrt[n]{x_1 x_2 \cdots x_n} \quad (5.23)$$

が簡単に導ける。

[5-3]. 式 (5.23) を、ジェンセンの不等式を用いて導出せよ。

**定理 5.8** (ヤングの不等式 (Young's inequality)).  $a, b > 0$ 、 $p, q > 0$ 、 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$  とする。このとき

$$\frac{a^p}{p} + \frac{b^q}{q} \geq ab \quad (5.24)$$

**証明.**  $f(x) = e^x$  は下に凸な関数である。 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$  より、ジェンセンの不等式を用いると

$$\frac{1}{p} e^x + \frac{1}{q} e^y \geq e^{x/p + y/q} \quad (5.25)$$

が得られる。 $x = p \ln a$ 、 $y = q \ln b$  と置くと、求めたいヤングの不等式 (5.24) を得る。□

**定理 5.9** (ヘルダーの不等式 (Hölder's inequality)).  $p, q > 0$ 、 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$  とする。また  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  を  $n$  次元ベクトルとする。このとき

$$\sum_{i=1}^n |x_i y_i| \leq |\mathbf{x}|_p |\mathbf{y}|_q = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p} \left( \sum_{i=1}^n |y_i|^q \right)^{1/q} \quad (5.26)$$

<sup>57</sup>  $n = k$  までジェンセンの不等式が成り立つとする。 $C = \sum_{i=1}^k c_i$  とする。このとき、

$$\sum_{i=1}^{k+1} c_i f(x_i) = \sum_{i=1}^k c_i f(x_i) + c_{k+1} f(x_{k+1}) \leq C f\left(\frac{\sum_{i=1}^k c_i x_i}{C}\right) + c_{k+1} f(x_{k+1}) \leq f\left(C \frac{\sum_{i=1}^k c_i x_i}{C} + c_{k+1} x_{k+1}\right) = f\left(\sum_{i=1}^{k+1} c_i x_i\right) \quad (5.22)$$

となり、 $n = k + 1$  でも成り立つことが示せる。

証明. ヤングの不等式において、 $a = |x_i| / |\mathbf{x}|_p$ 、 $b = |y_i| / |\mathbf{y}|_q$  と置くと

$$\frac{|x_i|^p}{p|\mathbf{x}|_p^p} + \frac{|y_i|^q}{q|\mathbf{y}|_q^q} \geq \frac{1}{|\mathbf{x}|_p|\mathbf{y}|_q} |x_i y_i| \quad (5.27)$$

を得る。 $i$  について 1 から  $n$  まで和をとれば、

$$\frac{1}{|\mathbf{x}|_p|\mathbf{y}|_q} \sum_i |x_i y_i| \leq \sum_i \frac{|x_i|^p}{p|\mathbf{x}|_p^p} + \frac{|y_i|^q}{q|\mathbf{y}|_q^q} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 \quad (5.28)$$

となり、これは求めたかったヘルダーの不等式そのものである。□

いよいよ、 $p$ -ノルムの劣加法性を証明する。

**定理 5.10** (ミンコフスキーの不等式<sup>58</sup> (Minkowski's inequality)).  $1 \leq p$  のとき

$$|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p \leq |\mathbf{x}|_p + |\mathbf{y}|_p \quad (5.29)$$

証明. 式 (5.29) の左辺を  $p$  乗すると

$$|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^p = \sum_i |x_i + y_i|^p \leq \sum_i |x_i| |x_i + y_i|^{p-1} + \sum_i |y_i| |x_i + y_i|^{p-1} \quad (5.30)$$

と評価できる。右辺第一項に対し、 $q = \frac{p}{p-1}$  と置いてヘルダーの不等式を当てはめると

$$\sum_i |x_i| |x_i + y_i|^{p-1} \leq \left( \sum_i |x_i|^p \right)^{1/p} \left( \sum_i (|x_i + y_i|^{p-1})^{p/(p-1)} \right)^{(p-1)/p} = |\mathbf{x}|_p |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} \quad (5.31)$$

が得られる。右辺第二項も同様に評価できるので、まとめると、

$$|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^p \leq |\mathbf{x}|_p |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} + |\mathbf{y}|_p |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} = (|\mathbf{x}|_p + |\mathbf{y}|_p) |\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1} \quad (5.32)$$

が得られる。両辺を  $|\mathbf{x} + \mathbf{y}|_p^{p-1}$  で割り、求めたかったミンコフスキーの不等式 (5.29) を得る。□

<sup>58</sup>このミンコフスキーは、ミンコフスキー時空に名を残すヘルマン・ミンコフスキー (Hermann Minkowski) である。

## 6 凸性と双対性

この章では、行列とベクトルはすべて実数のみを成分に持つものとする<sup>59</sup>。

### 6.1 凸性と超平面分離定理

**定義 6.1** (凸集合). ベクトル空間  $V$  の部分集合  $W$  について、 $W$  の任意の元  $x, y \in W$  と任意の  $0 \leq t \leq 1$  について、 $tx + (1-t)y \in W$  が成り立つとき、 $W$  は凸であるという。

凸集合の定義の意味を図示すると図 7 左のようになる。 $W$  に含まれる二つの点  $x, y$  を結んだ線分がすべてすっぽりと  $W$  に含まれている、というのが凸集合の定義である。逆にある集合が凸でない場合には、図 7 右のように、ある  $x, y$  が存在し、 $x, y$  を結んだ線分が  $W$  の外側に飛び出す。前の章で見た「関数  $f(x)$  が下に凸」というのは、「集合  $S := \{(x, y) | y \geq f(x)\}$  が凸」と読み替えられる。

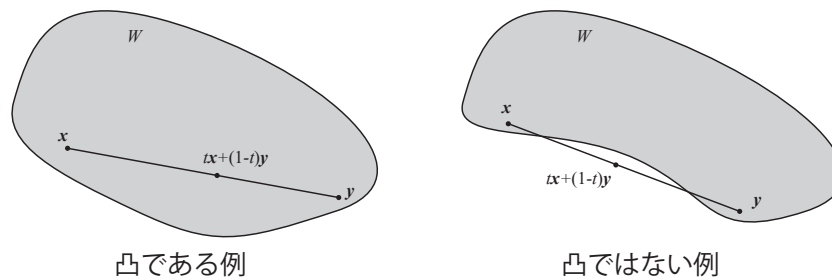


図 7: 左: 凸集合の例。右: 凸でない集合の例。

[6-1].  $A$  を与えられた  $n \times m$  実行列とする。集合  $S := \{y | y = Ax, x \geq 0\}$  は凸であることを示せ。ただし  $x \geq 0$  は、 $m$  次元ベクトル  $x$  のすべての成分が非負であることを意味している。

凸集合を特徴づけるために、内部及び境界をきちんと定義しておこう。

**定義 6.2** (内点と境界点). 集合  $S$  に含まれる点  $x$  について、「ある  $\varepsilon > 0$  が存在し、任意の  $|y - x| < \varepsilon$  となる  $y$  が  $S$  に含まれる」が成り立つとき、点  $x$  は集合  $S$  の「内点 (interior point)」であるという。内点ではない点を、集合  $S$  の「境界点 (boundary point)」という。

要するに、 $x$  の近傍がすべてすっぽり  $S$  に含まれている点を内点と呼ぶということである。定義により、開集合は境界点を持たず、逆に閉集合は境界点で囲まれた集合である<sup>60</sup>。

凸集合  $S$  が  $n$  次元空間中にある場合、境界点の集合は  $n - 1$  次元以下である。

**定義 6.3** (端点). 閉凸集合  $S$  において、 $S$  に含まれる二つの点の内点として表せない点を、その閉凸集合  $S$  の「端点 (end)」という。

閉凸集合において、端点は必ず境界点だが、境界点は必ずしも端点ではない。例えば  $\mathbb{R}^2$  中の閉集合  $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$  を考えると、境界点は  $x = 0, x = 1, y = 0, y = 1$  の 4 つの線分だが、端点は  $(0, 0), (0, 1), (1, 1), (1, 0)$  の 4 つの頂点のみである。角ばっている集合の場合にはこのように端点は有限個の点のみであるが、境界が曲がっている集合の場合には事情が異なる。例えば  $x^2 + y^2 \leq 1$  の円の場合、 $x^2 + y^2 = 1$  の円周上の点はすべて端点である。

<sup>59</sup>この章の内容は、P. ラックス『線形代数』丸善出版、第 12, 13 章に基づく

<sup>60</sup>これは距離空間における開集合の定義そのものである。

**定理 6.1** (カラテオドリの定理 (Caratheodory's theorem)).  $n$  次元空間中の閉凸集合の任意の点は、 $n + 1$  個以下の端点の内分で表せる。

直観ではそんな感じもする定理だが、きちんと示そうとすると細かな議論が割と面倒くさい。ここでは証明の概略を示すにとどめる<sup>61</sup>。

1.  $n$  次元中の閉凸集合  $S$  中の与えられた点  $\boldsymbol{x}$  について、それを通過する線分を考えると、これはどこかで境界と交差する。その境界点  $\boldsymbol{x}_1^1$  と  $\boldsymbol{x}_1^2$  が端点ではない場合、「 $\boldsymbol{x}_1^1$  を内分点として与えることのできる点の集合  $S_1^1$ 」を考えることができる。 $S_1^1$  は閉凸集合であり、次元は  $n - 1$  以下である。 $(\boldsymbol{x}_1^2$  も同様とする)
2.  $n - 1$  次元中の閉凸集合  $S_1^1$  中の与えられた点  $\boldsymbol{x}_1^1$  について、上と同じ手続きを繰り返して、 $\boldsymbol{x}_2^{1,1}, \boldsymbol{x}_2^{1,2}$  が得られる。これをさらに繰り返して  $\boldsymbol{x}_3^{1,1,1}, \dots$  が順に得られる。 $S_1^1, S_2^1, \dots$  と進みにつれ、次元が少なくとも一つずつ下がっていくので、高々  $n$  回で手続きは終わり、そのとき端点に到達する。
3. このようにして得られた端点たちを結んで作られる凸体  $T$  を考える。端点は  $2^n$  個以下であり、構成により  $T$  は  $\boldsymbol{x}$  を含む。
4.  $n$  次元の凸超多面体は、超多面体の端点を頂点に持つ頂点数  $n + 1$  個の超角錐たちに分割できる。
5.  $\boldsymbol{x}$  は  $T$  の端点を頂点に持つ頂点数  $n + 1$  個の超角錐のどれかに含まれるので、 $n + 1$  個の端点の内分で  $\boldsymbol{x}$  を与えることができる。

さて凸集合の満たす重要な性質として「超平面分離定理<sup>62</sup>」がある。それを述べるために、まず一般次元のベクトル空間における「超平面 (hyperplane)」を定義しよう。今回は特に、 $n$  次元ベクトル空間における  $n - 1$  次元の超平面を考える。 $n - 1$  次元超平面は、規格化されたベクトル  $\boldsymbol{v}$  ( $|\boldsymbol{v}| = 1$ ) と数  $a$  を用いて

$$\{\boldsymbol{x} \mid \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{x} \rangle = a\} \quad (6.1)$$

と書くことができる。ただし  $\langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{v}^\dagger \boldsymbol{x}$  は内積である<sup>63</sup>。この超平面は、 $\boldsymbol{v}$  と垂直で、かつ原点からの距離が  $a$  であるような空間である (図 8)。

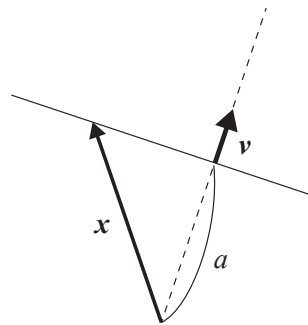


図 8: 超平面のイメージ図

ベクトル空間は、超平面によって 2 つに分割される。特にその一方の「半空間 (half-space)」は

$$\{\boldsymbol{x} \mid \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{x} \rangle \leq a\} \quad (6.2)$$

のように書くことができる (不等号を逆にすればもう一方の半空間が指定できる)。

<sup>61</sup>P. ラックス『線形代数』丸善出版 第 12 章に証明が出ているので、興味のある方はそちらをご覧ください。

<sup>62</sup>「分離超平面定理」ともいう。

<sup>63</sup>今は実ベクトルに限って考えているので、 $\boldsymbol{v}^\dagger \boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}^\top \boldsymbol{x}$  と書いてもよい。

**定理 6.2** (超平面分離定理 (hyperplane separating theorem)). ベクトル空間中に、互いに重なり合わない二つの閉凸集合  $A, B$  がある<sup>64</sup>。このとき、 $A$  と  $B$  を分離する超平面が存在する。すなわち、適切なベクトル  $v$  と実数  $a$  が存在し、任意の  $x \in A$  について  $\langle v, x \rangle > a$ 、かつ任意の  $y \in B$  について  $\langle v, y \rangle < a$  が成り立つ。

超平面分離定理の主張を図示すると、図 9 のようになる。このような超平面 (図では線) を必ず引けるというのが、超平面分離定理の主張である。直感的には明らかともいえるが、きちんと示そうと思うと少し工夫が必要である。超平面分離定理は、以下の定理から直ちに従う。こちらの定理を超平面分離定理と呼ぶこともある。

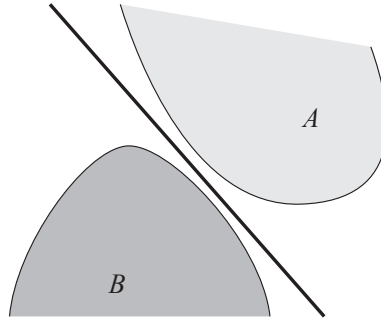


図 9: 超平面分離定理のイメージ図。

**定理 6.3.**  $S$  を閉凸集合、 $y$  を  $S$  に含まれない点とする。このとき、 $S$  を含むが  $y$  を含まない半空間が存在する。

定理 6.3 を認めれば、超平面分離定理 (定理 6.2) は直ちに導ける。

**定理 6.3** を認めた超平面分離定理 (定理 6.2) の証明。集合  $C$  として

$$C := \{x - z \mid x \in A, z \in B\} \quad (6.3)$$

というものを考える。 $A, B$  が凸なので  $C$  も凸である。また、 $A$  と  $B$  が重なり合っていないことから、 $C$  は原点を含まない。そのため定理 6.3 により、ベクトル  $v$  と実数  $c$  で、任意の  $w \in C$  について  $\langle v, w \rangle > c$  かつ  $\langle v, 0 \rangle = 0 < c$  を満たすものが存在する。

特に  $x^* \in A$  として  $\langle v, x \rangle$  を最小化するもの<sup>65</sup>、 $z^* \in B$  として  $\langle v, z \rangle$  を最大化するものを選べば

$$\langle v, w^* \rangle = \langle v, x^* \rangle - \langle v, z^* \rangle = \min_x \langle v, x \rangle - \max_z \langle v, z \rangle > c > 0 \quad (6.4)$$

が成り立つことがわかる。よって、超平面として、 $v$  はそのまま、 $a$  は  $a = \max_z \langle v, z \rangle + \frac{c}{2}$  と選べば、求めたかった分離平面が得られる。□

## 6.2 線形計画問題の弱双対定理

一定の拘束条件の下で、何かを最大化・最小化したい、という状況は、様々な場所で直面するタイプの問題である。例えば、以下のような問題を考えてみよう。

<sup>64</sup>  $A, B$  両方とも開凸集合であっても構わない。ただし一方が開で一方が閉だと反例がある。

<sup>65</sup>  $\langle v, x \rangle$  が下限を持たないとすると、 $\langle v, w \rangle = \langle v, x - z \rangle$  がいくらでも小さく出来てしまうので、 $\langle v, w \rangle = \langle v, x - z \rangle > c$  が任意の  $x \in A, z \in B$  で成り立つような  $c$  は存在しなくなってしまう。

なお、 $A, B$  は閉集合なので最小化、最大化するような点は集合内部に存在する。

Q:あなたはフェスティバルでお菓子を販売する計画をしており、そのための調理機械を何台か購入しようとしている。フェスティバルは3日あり、初日はクッキー1000枚、2日目はマドレーヌ300個、3日目はスコーン400個を作る必要がある。調理機械はAとBの2種類があり、1台が1日に作れるお菓子の数は以下の表の通りである。機械の値段はAが5万円、Bが3万円とする。必要なお菓子が作れるように、なるべく値段を押さえて機械を購入したい。機械A,Bをそれぞれ何台買うのが最も得か。

	機械 A	機械 B
クッキー	70 枚	40 枚
マドレーヌ	20 個	20 個
スコーン	25 個	10 個

これを線形代数の言葉で書くと次のようになる。

$$\min_{x_A, x_B} \begin{pmatrix} 5 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_A \\ x_B \end{pmatrix} \quad \text{s.t.} \quad \begin{pmatrix} 70 & 40 \\ 20 & 20 \\ 25 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_A \\ x_B \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} 1000 \\ 300 \\ 400 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_A \\ x_B \end{pmatrix} \geq \mathbf{0} \quad (6.5)$$

ただし、ベクトルの間の不等式  $\mathbf{a} \geq \mathbf{b}$  は、ベクトルのすべての成分で  $\mathbf{a}$  の方が  $\mathbf{b}$  よりも値が大きい、つまり  $a_i \geq b_i$  が全  $i$  で成り立つということを意味する。また「s.t.」は「such that」の略で「次の条件を満たすように」という意味である。「s.t.」以下に書かれているのが拘束条件で、この条件を満たすように  $x_A, x_B$  は値をとる。

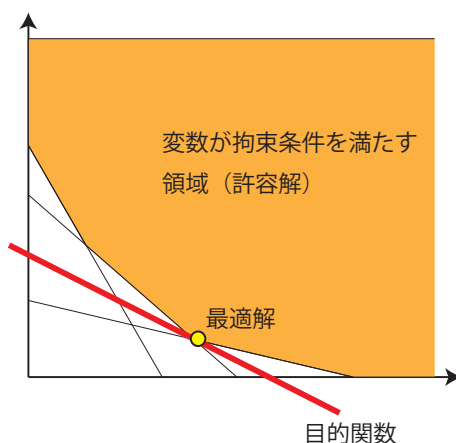


図 10: 線形計画問題の例。オレンジの領域中の点で、その点を通る与えられた傾きの直線(目的関数)が可能な限り下になるようにしたい。

機械の台数は本当は整数値のみをとるので、これは離散最適化問題なのだが、以下では取り扱いやすくするため任意の実数値の台数も許すことにして考えることにする。そうするとこの問題は、以下のような「線形計画問題」の一種となる<sup>66</sup>。

**定義 6.4** (線形計画問題 (linear programming problem)). 以下の形の最適化問題を線形計画問題と呼ぶ。

$$\min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} \geq b_i, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (6.6)$$

ただしここで  $\mathbf{c}, \mathbf{a}_i, b_i$  は与えられたベクトル及び数であり、 $i \in \{1, \dots, m\}$  は拘束条件のラベルである。

<sup>66</sup>s.t. 以降の不等号は等号の場合もある。

先程のお菓子の例であれば、 $\mathbf{c}$ 、 $\mathbf{a}_i$  は 2 次元ベクトルで、 $m = 3$  である。前の例では図 10 のように状況を図示することで最適解は割と簡単に求められるが、一般にはベクトルや行列が 100 次元など非常に高次元であり、直感的には全く取り扱えなくなる。

さてここで、「最適解らしき解  $\mathbf{x}'$ 」が得られたとしよう。我々は、この  $\mathbf{x}'$  が本当に最適であることを確認したい。変数が 2 個であれば図 10 のように図を描けば確認できたが、100 次元ではそういうことは出来ないで、得られた「最適解らしき解  $\mathbf{x}'$ 」が本当に最適なのかの確認は容易ではない。しかし幸いなことに、これを確認する方法が存在する。それは「双対問題」を利用する方法である。

**定理 6.4** (弱双対定理 (weak duality theorem)). 線形計画問題 (6.6) の「双対問題 (dual problem)」を

$$\max_{y_1, y_2, \dots, y_m \geq 0} \sum_{i=1}^m b_i y_i \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^m y_i \mathbf{a}_i \leq \mathbf{c} \quad (6.7)$$

で定義する。双対問題に対し、元の問題 (6.6) は「主問題 (primal problem)」という。

最適解かは関係なく、拘束条件を満たす変数の組を「許容解 (feasible solution)」という。例えばこの主問題であれば、 $\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} \geq b_i$  かつ  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$  である  $\mathbf{x}$  はすべて許容解である。

このとき、任意の主問題及び双対問題の許容解  $\mathbf{x}$ 、 $y_1, \dots, y_m$  について

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x} - \sum_{i=1}^m b_i y_i \geq 0 \quad (6.8)$$

が成り立つ。特に等号が成り立つならば、そのときの  $\mathbf{x}$  と  $y_1, \dots, y_m$  は、それぞれ主問題及び双対問題の最適解である<sup>67</sup>。

双対問題の見た目は複雑で意味が分かりにくいので、再びお菓子の例で考えることにしよう。今までは機械を買ってお菓子を作る人のみを考えていたが、ここで「機械を売る人」の視点で見てみよう。機械を売る人には、「機械を売る」と「機械は売らずに自分で機械を使ってお菓子を作る」という二通りの選択肢がある。二通りの選択肢の中で「機械を売る」方を選ぶということは、売る人から見ると「その機械が生み出せるお菓子の価値<sup>68</sup> (お菓子の価格×個数)」よりも「1 台の販売価格」の方が高いということである。クッキー、マドレーヌ、スコーンの妥当な価格を  $y_1, y_2, y_3$  とすると、この条件は機械 A, B についてそれぞれ

$$70y_1 + 20y_2 + 25y_3 \leq 50000 \quad (6.9)$$

$$40y_1 + 20y_2 + 10y_3 \leq 30000 \quad (6.10)$$

ということを意味する<sup>69</sup>。この式は  $\sum_i y_i \mathbf{a}_i \leq \mathbf{c}$  に対応する。

一方、 $\sum_{i=1}^m b_i y_i = 1000y_1 + 300y_2 + 400y_3$  は、フェスティバルでの (その価格の元での) 総売上である。この状況での双対問題は、「さまざまなお菓子の価格設定のうち、『売り手が機械を売ってくれる』という条件の下での、総売上の最大値はいくらか」という問題である。弱双対定理の主張は、「どの機械についても『一台の機械が生み出せる価値よりも機械の販売価格の方が高い』ようなお菓子の価格状況ならば、『機械を売らずに自分でお菓子を作った場合の (その価格の元での) 総売上』よりも「機械の総販売収益」の方が高い、ということである。

弱双対定理を用いると、もし「最適解らしき解  $\mathbf{x}'$ 」について、ある許容解  $y'_1, \dots, y'_m \geq 0$  が存在し

$$\mathbf{c}^\top \mathbf{x}' - \sum_{i=1}^m b_i y'_i = 0 \quad (6.11)$$

<sup>67</sup> もし等号達成する  $\mathbf{x}$  が最適でないとなると、最適解  $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^* \leq \mathbf{c}^\top \mathbf{x}$  について  $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}^* - \sum_{i=1}^m b_i y_i < 0$  となり、式 (6.8) に矛盾する。

<sup>68</sup> もちろん実際には原材料費などがかかるが、ここでは原材料費は無視できるほど安く、機械さえあればお菓子ができる状態を考える。

<sup>69</sup> 売り手にとっては、フェスティバル以外には機械の使い道はないということにしておく。



が成り立った場合、 $\mathbf{x}'$  が確かに最適解（の一つ）であり、 $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}'$  が確かに最小値であると確認できる。一般に、最適解らしき解が本当に最適解であることの確認は易しくない（それより小さい値にならないことをきちんと示さないといけないが、それは難しい）ので、このような方法で最適性の確認ができるのは非常に便利である。

証明. 主問題 (6.6) の拘束条件に  $y_i$  を掛けて  $i$  の和をとり、双対問題 (6.7) の拘束条件を転置して右から  $\mathbf{x}$  を掛けることで、求めたい不等式

$$\sum_i b_i y_i \leq \sum_i y_i \mathbf{a}^\top \mathbf{x} \leq \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \quad (6.12)$$

が得られる。□

### 6.3 線形計画問題の強双対定理

弱双対定理は、「もし主問題と双対問題の最適値が一致すれば」その値が確かに最適値であること保証してくれた。だが弱双対定理は、主問題と双対問題の最適値が一致するのかどうかは教えてくれない。もし一致しなければ、弱双対定理で最適値か否かを確認することはできない。しかし幸いなことに、実は真つ当な線形計画問題においては、主問題と双対問題の最適値が一致することが証明されている。それが「強双対定理」あるいは単に「双対定理」と呼ばれる定理である。

**定理 6.5** (強双対定理 (strong duality theorem)). 線形計画問題の主問題と双対問題双方において、許容解が存在し、また最適値の発散が生じないとする。このとき、主問題の最小値と双対問題の最大値は一致する。

先程のお菓子の例であれば、強双対定理の主張は「あるお菓子の価格設定が存在して、『機械を売ってもらえる条件の下での最大の総売上』は『機械の購入費用』と一致する」ということである。

強双対定理を示すため、まず以下の補題を示す。

**定理 6.6** (ファーカス・ミンコフスキーの補題 (Farkas-Minkowski lemma)). 任意の  $m \times n$  実行列  $A$  と  $n$  次元実ベクトル  $\mathbf{b}$  について、必ず以下の一方のみが成り立つ。

1. 非負の  $n$  次元ベクトル  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$  が存在し、 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  が成り立つ。
2.  $m$  次元ベクトル  $\mathbf{y}$  が存在し、 $\mathbf{y}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$  かつ  $\mathbf{y}^\top \mathbf{b} < 0$  が成り立つ。

証明. 1 が成り立つとする。2 の一つ目の条件  $\mathbf{y}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$  が成り立つなら、1 の仮定により存在が示される  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$  を用いて、 $0 = \mathbf{0}^\top \mathbf{x} \leq \mathbf{y}^\top A\mathbf{x} = \mathbf{y}^\top \mathbf{b}$  が得られる。すなわち 2 の二つ目の条件  $\mathbf{y}^\top \mathbf{b} < 0$  は成り立たない。よって 1 が成り立つとき 2 は成り立たない。

逆に、1 が成り立たないとする。集合  $S$  として  $S := \{\mathbf{y} | \mathbf{y} = A\mathbf{x}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$  を考える。  $S$  は凸集合であり、また  $\mathbf{0} \in S$  である。1 が成り立たないので  $\mathbf{b} \notin S$  である。超平面分離定理の補題 (定理 6.3) より、ベクトル  $\mathbf{v}$  と実数  $a$  が存在し、任意の  $S$  の元  $\mathbf{p} \in S$  について  $\mathbf{v}^\top \mathbf{p} \geq a$  かつ  $\mathbf{v}^\top \mathbf{b} < a$  が成り立つように出来る。我々は、この  $\mathbf{v}$  が、実は 2 が存在を主張する  $\mathbf{y}$  であることを示す。

まず  $\mathbf{0} \in S$  より  $0 \geq a$  が得られるので、2 の二つ目の条件  $\mathbf{v}^\top \mathbf{b} < a \leq 0$  が成り立つ。

また、 $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}$  ( $\mathbf{p} \in S$ ) は下限を持つので、 $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}' < 0$  となるような  $\mathbf{p}' \in S$  は存在しない<sup>70</sup>。そのため任意の  $A\mathbf{x} = \mathbf{p} \in S$  について  $\mathbf{v}^\top A\mathbf{x} = \mathbf{v}^\top \mathbf{p} \geq 0$  が言える。 $\mathbf{x}$  は任意なので、これが成り立つには  $\mathbf{v}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$ 、すなわち 2 の一つ目の条件が成り立つ必要がある<sup>71</sup>。□

この定理の条件 1 を、等式  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  から不等式  $A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}$  に変更してみよう。一見するとだいぶ複雑になったように見えるが、これは

<sup>70</sup>もし  $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}' < 0$  となるような  $\mathbf{p}' \in S$  が存在したとすると、任意の  $k > 0$  について  $\mathbf{p} = k\mathbf{p}' \in S$  なので、 $\mathbf{v}^\top \mathbf{p}$  は下限を持たなくなってしまう。

<sup>71</sup> $\mathbf{x}$  として単位ベクトル  $\mathbf{e}^i$  ( $i$  番目の成分のみ 1、他は 0 であるベクトル) をとれば、 $\mathbf{v}^\top A$  の  $i$  番目の成分が非負であることが言える。

非負の  $2n$  次元ベクトル  $\begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix} \geq \mathbf{0}$  が存在し、 $(A \ I) \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix} = \mathbf{b}$  が成り立つ

という条件と等価である。この事実に着目することにより、ファークス・ミンコフスキーの補題 (定理 6.6) から以下が得られる。

**定理 6.7.** 任意の  $m \times n$  実行列  $A$  と  $n$  次元実ベクトル  $\mathbf{b}$  について、必ず以下の一方のみが成り立つ。

1. 非負の  $n$  次元ベクトル  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$  が存在し、 $A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}$  が成り立つ。
2.  $m$  次元ベクトル  $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$  が存在し、 $\mathbf{y}^\top A \geq \mathbf{0}^\top$  かつ  $\mathbf{y}^\top \mathbf{b} < 0$  が成り立つ。

[6-2]. 定理 6.7 を示せ。特に 2 に  $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$  という条件が追加されていることに注意すること。

ではいよいよ強双対定理の証明に進もう。

強双対定理 (定理 6.5) の証明. 線形計画問題の主問題 (6.6) の最適値を  $s$  とする。

$$s = \min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{x}^\top A \geq \mathbf{b}^\top, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (6.13)$$

ただし  $A$  は  $\mathbf{a}_i$  たちを並べた行列  $A := (\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \cdots \ \mathbf{a}_m)$  であり、 $\mathbf{b} = (b_1 \ b_2 \ \cdots \ b_m)$  は  $m$  次元ベクトルである<sup>72</sup>。弱双対定理 (6.8) により、双対問題の拘束の下で  $s - \sum_{i=1}^m b_i y_i \geq 0$  が成り立つことは分かっており、その等号を達成する組が存在することを示したい。なので  $s - \sum_{i=1}^m b_i y_i \leq 0$  となる組  $\mathbf{y}$  が存在することが言えればよい。これを言うには、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ -s \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} A \\ -\mathbf{b}^\top \end{pmatrix} \mathbf{y} \quad (6.14)$$

を満たす非負の  $m$  次元ベクトル  $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$  の存在を示せばよい。ただし  $\begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ -s \end{pmatrix}$  は  $n+1$  次元ベクトル、 $\begin{pmatrix} A \\ -\mathbf{b}^\top \end{pmatrix}$  は  $(n+1) \times m$  行列である。

主張に反し、式 (6.14) を満たす  $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$  が存在しなかったとして矛盾を導こう。定理 6.7 より、ある  $m+1$  次元ベクトル  $\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{z}' \\ z_{m+1} \end{pmatrix} \geq \mathbf{0}$  が存在し、 $\mathbf{z}^\top \begin{pmatrix} A \\ -\mathbf{b}^\top \end{pmatrix} \geq \mathbf{0}^\top$  かつ  $\mathbf{z}^\top \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ -s \end{pmatrix} < 0$  を満たす。ただし  $\mathbf{z}$  の最初の  $m$  成分を束ねて  $\mathbf{z}'$  と置いた。以下  $z_{m+1} = 0$  の場合と  $z_{m+1} \neq 0$  の場合とで場合分けする。

$z_{m+1} = 0$  の場合、 $\mathbf{z}'^\top A \geq \mathbf{0}^\top$  かつ  $\mathbf{z}'^\top \mathbf{c} < 0$  を満たすベクトル  $\mathbf{z}' \geq \mathbf{0}$  が存在することになる。すると定理 6.7 より、 $A\mathbf{y} \leq \mathbf{c}$  を満たす  $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$  は存在しない。しかしこれは双対問題 (6.7) が許容解を持つという仮定に矛盾する。

$z_{m+1} \neq 0$  の場合、 $\mathbf{z}$  を定数倍しても関係式に影響はない<sup>73</sup> ので、 $z_{m+1} = 1$  として一般性を失わない。このとき  $\mathbf{z}'^\top A - \mathbf{b}^\top \geq \mathbf{0}^\top$  かつ  $\mathbf{z}'^\top \mathbf{c} < s$  を満たす  $\mathbf{z}' \geq \mathbf{0}$  が存在することになる。しかしこれは、主問題 (6.6) について  $\mathbf{x} = \mathbf{z}'$  と置けば、 $\mathbf{c}^\top \mathbf{x}$  が  $s$  よりも小さい値をとることを意味しており、これは  $s$  がこの問題の最小値であることに矛盾する。

よってどちらの場合も矛盾が導かれたので、元の仮定が誤りであり、式 (6.14) を満たす  $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$  は存在する。□

#### 6.4 <補論> : 超平面分離定理の証明

以下、定理 6.3 の証明を与える。

そのために、原点を内部に含む閉凸集合  $S$  に対し、以下のゲージ関数

$$p(\mathbf{x}) := \arg \min_r \left( \frac{\mathbf{x}}{r} \in S \right) \quad (6.15)$$

<sup>72</sup>この表示では、 $\mathbf{a}^\top \mathbf{x} \geq b_i$  を転置したうえで並べている。

<sup>73</sup>2つの式  $\mathbf{z}^\top \begin{pmatrix} A \\ -\mathbf{b}^\top \end{pmatrix} \geq \mathbf{0}^\top$  と  $\mathbf{z}^\top \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ -s \end{pmatrix} < 0$  はともに右辺がゼロなので、全体を定数倍することができる。

を定義する。右辺は「 $\mathbf{x}/r$  が  $S$  に含まれるようになる最小の  $r$ 」という意味である。明らかに、 $\mathbf{x} \in S$  ならば  $r \leq 1$ 、 $\mathbf{x} \notin S$  ならば  $r > 1$  となる。また、 $\mathbf{x}/r \in S$ 、 $\mathbf{y}/s \in S$  のとき、 $S$  の凸性より

$$\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{r + s} = \frac{r}{r + s} \frac{\mathbf{x}}{r} + \frac{s}{r + s} \frac{\mathbf{y}}{s} \in S \quad (6.16)$$

なので、 $p$  は「劣加法的 (subadditive)」

$$p(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \leq p(\mathbf{x}) + p(\mathbf{y}) \quad (6.17)$$

であることも分かる<sup>74</sup>。

定理 6.3 を示すには、以下が示せれば十分である。

**定理 6.8** (ハーン・バナッハの定理 (Hahn-Banach theorem)).  $V$  をベクトル空間、 $W$  をその部分ベクトル空間とする。 $F$  を  $V \rightarrow \mathbb{R}$  の劣加法的な同次関数<sup>75</sup>とする。また  $g$  を  $W \rightarrow \mathbb{R}$  の線形関数とし、任意の  $\mathbf{x} \in W$  について

$$g(\mathbf{x}) \leq F(\mathbf{x}) \quad (6.18)$$

が成り立つとする。このとき、 $V$  上の線形関数  $G$  が存在し、 $W$  上では  $g$  と一致し ( $\mathbf{x} \in W$  ならば  $g(\mathbf{x}) = G(\mathbf{x})$ )、さらに  $V$  全域で

$$G(\mathbf{x}) \leq F(\mathbf{x}) \quad (6.19)$$

が満たされるものが存在する。

要するに、制限された空間  $W$  内で線形関数  $g$  が劣加法関数  $F$  によって上から押さえられているのならば、その大小関係を維持したまま、 $g$  を  $W$  の外側にまで適切に拡張することができるということである。通常、ハーン・バナッハの定理というと無限次元空間を考えて議論するが、ここではその簡単な場合である有限次元空間の場合に限って証明を行う<sup>76</sup>。

**証明.**  $W$  と  $V$  の次元の差が 1 である場合について証明すれば十分である (あとは帰納的に手続きを繰り返せばよいので)。

$\mathbf{u} \notin W$  を固定する。 $V$  の任意の元  $\mathbf{x}$  は、適切な  $\mathbf{w} \in W$  と  $t \in \mathbb{R}$  を用いて  $\mathbf{x} = \mathbf{w} + t\mathbf{u}$  と書ける。 $G(\mathbf{x})$  の値は、 $c := G(\mathbf{u})$  と置くと、 $G$  の線形性より

$$G(\mathbf{x}) = G(\mathbf{w}) + tG(\mathbf{u}) = g(\mathbf{w}) + tc \quad (6.20)$$

と書ける。よって線形関数  $G$  を求める問題は、実数  $c$  を定める問題に帰着する。

課されている条件 (6.19) は、

$$g(\mathbf{w}) + tc \leq F(\mathbf{w} + t\mathbf{u}) \quad (6.21)$$

という条件となる<sup>77</sup>。 $t \geq 0$  の場合、式 (6.21) の両辺を  $t$  で割り、 $\boldsymbol{\eta} := \mathbf{w}/t$  と置くと

$$c \leq F(\boldsymbol{\eta} + \mathbf{u}) - g(\boldsymbol{\eta}) \quad (6.22)$$

という条件が得られる。 $t < 0$  の場合、式 (6.21) の両辺を  $-t$  で割り、 $\boldsymbol{\xi} := -\mathbf{w}/t$  と置くと

$$c \geq g(\boldsymbol{\xi}) - F(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) \quad (6.23)$$

という条件が得られる。もし任意の  $\boldsymbol{\eta}$  と  $\boldsymbol{\xi}$  に対し

$$g(\boldsymbol{\xi}) - F(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) \leq F(\boldsymbol{\eta} + \mathbf{u}) - g(\boldsymbol{\eta}) \quad (6.24)$$

<sup>74</sup>式 (6.16) は、 $p(\mathbf{x}) = r$ 、 $p(\mathbf{y}) = s$  のとき  $\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{r + s} \in S$  であることを主張するので、ここから  $p(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \arg \min_t \left( \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{t} \in S \right) \leq r + s$  がいえる。

<sup>75</sup> $F(a\mathbf{x}) = aF(\mathbf{x})$  が成り立つということ

<sup>76</sup>無限次元の場合も、証明の本質はほぼ同じである。

<sup>77</sup>この式 (6.21) が任意の  $\mathbf{w} \in W$  で満たされるような  $c$  の存在を示せればよい。

が満たされることを示せば、任意の  $\boldsymbol{\eta}$  と  $\boldsymbol{\xi}$  に対し式 (6.22) と式 (6.23) をともに満たすような  $c$  が存在するということがいえる<sup>78</sup>。なので式 (6.24) を示せばよい。

式 (6.24) は移項すれば

$$g(\boldsymbol{\xi}) + g(\boldsymbol{\eta}) \leq F(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}) + F(\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{u}) \quad (6.25)$$

と書けるので、これを任意の  $\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi} \in W$  に対して示せばよい。ところで  $g$  の線形性及び式 (6.18) の仮定より、この左辺は

$$g(\boldsymbol{\xi}) + g(\boldsymbol{\eta}) = g(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}) \leq F(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}) \quad (6.26)$$

と評価できる。さらに  $F$  の劣加法性より

$$F(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\eta}) \leq F(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}) + F(\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{u}) \quad (6.27)$$

が言える。これらをつなぎ合わせることで式 (6.25) が得られる。よって示された。  $\square$

なお、ハーン・バナッハの定理を用いれば、定理 6.3 は以下のように簡単に示せる。

**定理 6.3 の証明.** 部分ベクトル空間  $W$  として、一次元空間  $W := \{\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x} = k\boldsymbol{y}, k \in \mathbb{R}\}$  を選ぶ。 $W$  の任意の元  $\boldsymbol{x}$  は  $\boldsymbol{x} = k\boldsymbol{y}$  の形で書けるが、この  $k$  を用いて線形関数  $g$  を  $g(\boldsymbol{x}) = k$  と定義する。さらに、劣加法関数  $F$  として、式 (6.15) で定義されたゲージ関数  $p(\boldsymbol{x})$  をとる。すると、 $\boldsymbol{y}$  が  $S$  の外側にあるという条件より、 $W$  上においては  $g(\boldsymbol{x}) \leq p(\boldsymbol{x})$  が常に成り立つ。

ハーン・バナッハの定理を適用すると、 $V$  全域で  $G(\boldsymbol{x}) \leq p(\boldsymbol{x})$  を満たす線形関数  $G(\boldsymbol{x}) : V \rightarrow \mathbb{R}$  が得られる。 $G(\boldsymbol{x}) = 1$  の面が求めたい超平面である。  $\square$

## 6.5 <補論> : 半正定値計画問題とサポートベクターマシン

線形計画問題をさらに一般化させた最適化問題として「半正定値計画問題」というものがある。線形計画問題では拘束条件は一次の式であったが、半正定値計画問題では拘束条件は二次の式で与えられる。

**定義 6.5** (半正定値計画問題 (semidefinite programming problem)).  $A_1, \dots, A_m, C$  は実対称行列、 $b_1, \dots, b_m$  は実数で、これらが与えられているとする。半正定値計画問題は

$$\min_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{x}^\top C \boldsymbol{x}, \quad \text{s.t. } \boldsymbol{x}^\top A_i \boldsymbol{x} \geq b_i \quad (6.28)$$

という最適化問題である<sup>79</sup>。ただし  $\boldsymbol{x}$  は実ベクトルである。

線形計画問題との類似性を見るには、 $X = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top$  と置くとよい。すると  $X$  を実対称行列として

$$\min_X \text{Tr}[CX], \quad \text{s.t. } \text{Tr}[A_i X] \geq b_i, \quad X \geq O \quad (6.29)$$

とすると、その構造が似通っていることが分かるだろう。ただし  $X \geq O$  は  $X$  が半正定値であることを意味している。

**定理 6.9** (半正定値計画問題の弱双対定理). 式 (6.29) の双対問題を

$$\max_{y_1, \dots, y_m \geq 0} \sum_{i=1}^m b_i y_i \quad \text{s.t. } \sum_{i=1}^m y_i A_i \leq C \quad (6.30)$$

で定義する。

<sup>78</sup>あるいは  $\max_{\boldsymbol{\xi}} [g(\boldsymbol{\xi}) - F(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u})] \leq \min_{\boldsymbol{\eta}} [F(\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{u}) - g(\boldsymbol{\eta})]$  が満たされること、と言った方が分かりやすいかもしれない。もしこの不等式が成り立つなら、 $c = (\max_{\boldsymbol{\xi}} [g(\boldsymbol{\xi}) - F(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u})] + \min_{\boldsymbol{\eta}} [F(\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{u}) - g(\boldsymbol{\eta})]) / 2$  ととればよい。

<sup>79</sup>拘束条件に  $\boldsymbol{x}$  の一次の項が含まれていてもよい。

主問題、双対問題それぞれの許容解に対し

$$\text{Tr}[CX] - \sum_{i=1}^m b_i y_i \geq 0 \quad (6.31)$$

が成り立つ

線形計画問題の場合と同様に、これにより最適解の候補  $X'$  が確かに最適解であることの確認ができる。

証明. 双対問題式 (6.30) の拘束条件に右から  $X$  を掛けてトレースをとることで

$$\text{Tr}[CX] \geq \sum_{i=1}^m y_i \text{Tr}[A_i X] \geq \sum_{i=1}^m y_i b_i \quad (6.32)$$

が成り立つことから示せる。ただし 2 つ目の不等式は主問題の拘束条件を用いている。□

線形計画問題の場合と同様に、半正定値計画問題においても、等号達成が実際になされるという強双対定理も示されている。ここでは証明は省略し結果のみ紹介する<sup>80</sup>。

**定理 6.10** (半正定値計画問題の強双対定理). 半正定値計画問題において、主問題が  $X > O$  (正定値) の許容解を持ち、双対問題が (等号のない)  $\sum_{i=1}^m y_i A_i < C$  を満たす許容解を持つとする。さらに最大値・最小値の発散は起きないとする。このとき、主問題の最小値と双対問題の最大値は一致する。

半正定値計画問題の応用として、データ分類とサポートベクターマシンの話を見よう。「与えられた手書きの数字を 0~9 に分類する」「動物の写真を見て、それが何の動物か分類する」「正しいメールとスパムメールを識別する」のような分類 (classification) のタスクは、機械学習への応用もよくなされている情報科学の重要な課題である。ここでは特にもっとも簡単な場合として、入力を二通りのラベルに分類し、しかもその分類が超平面 (一次関数) で完璧に行える状況を考えることにしよう<sup>81</sup>。

一つの入力は、 $d$  個の実数の組で指定されているものとする。 $i$  番目の入力データは、 $d$  次元ベクトル  $\mathbf{x}_i$  で与えられる。各入力へのラベルは  $\pm 1$  の二値とし、 $i$  番目の入力のラベルを  $t_i$  と書く。例えば図 11 上のように、赤が +1、青が -1 の入力であり、この二つが平面 (直線) で分離出来る状況を考える。

入力を分離する平面 (直線) は多数存在する (図 11 下) が、「よい分離」の基準として「分離平面と、その平面に最も近い入力データ点までの距離が最大化されている」という基準を使うことにしよう。例えば、図 11 左や図 11 中央のような平面よりも図 11 右のような平面の方を「よりよい分離」とみなすということである。分離平面と最も近いデータ点との間の距離を「マージン (margin)」と呼ぶ。この基準は「マージン最大化 (margin maximization)」と呼ばれている。マージン最大化で分離平面を学習していく方法を「サポートベクターマシン (support vector machine)<sup>82</sup>」といい、機械学習では基本的な手法の一つとなっている。

分離平面の式を  $\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = 0$  とすると、 $i$  番目のデータ点とこの平面との間の距離は

$$d_i = \frac{t_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b)}{|\mathbf{w}|} \quad (6.33)$$

と書ける。ただし +1 のデータ点の方が分離平面の上側にあるとした。この分離平面におけるマージンを  $M$  とすると、

$$d_i = \frac{t_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b)}{|\mathbf{w}|} \geq M \quad (6.34)$$

<sup>80</sup> 証明を知りたい人は、適当な最適化問題・線形計画問題の教科書を見ていただきたい。

<sup>81</sup> もちろん実際の分類問題では、分離は平面よりも複雑な関数で行われることが多く、またノイズがあるため分離は完璧ではない状況を取り扱わないといけない。ここで考えているのは極めて理想的かつ単純化された状況である。

<sup>82</sup> 分離平面の詳細は、分離平面に近いごく少数のデータ点にのみ依存している。このデータ点を「サポートベクター」ということから、この名前がついている。

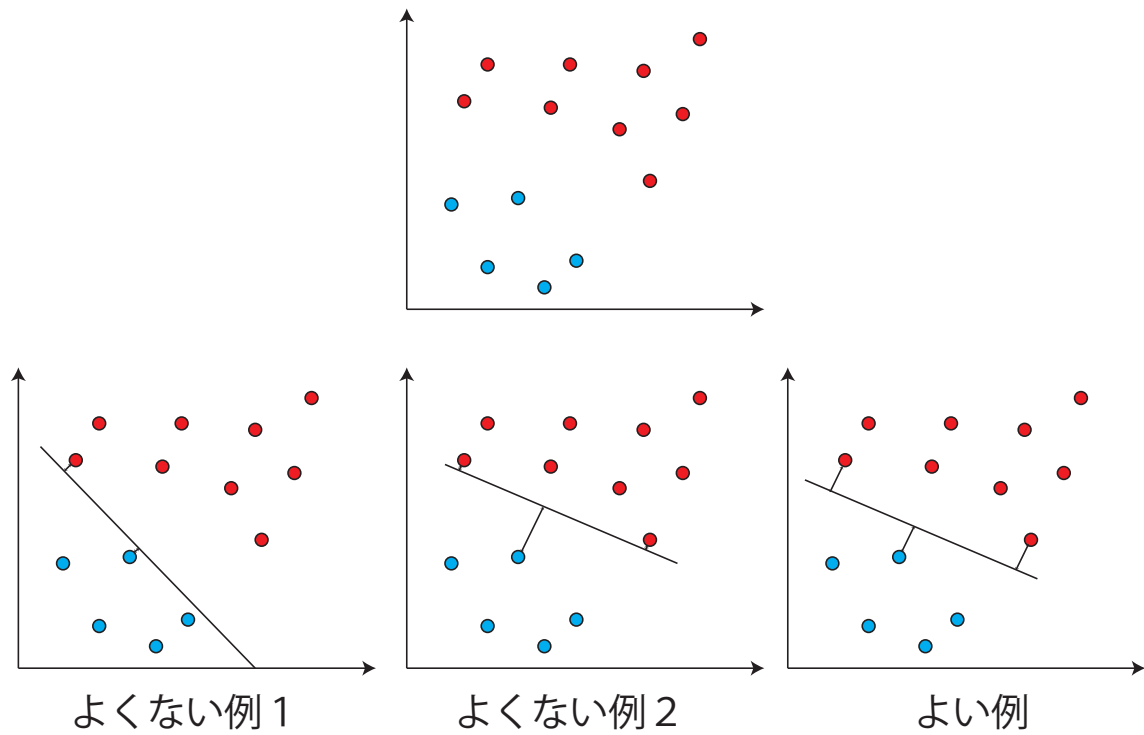


図 11: 上: 分類のタスクの例。赤と青のデータ点を分離する直線を探す。下左: よくない分類例 1. 分離平面とデータ点が近い。下中央: よくない分類例 2. 分離平面が赤のデータ点に寄りすぎている。下右: よい分類例。赤と青、データ点とからの分離平面までの距離が大きくとれている。

がすべての  $i$  で満たされる。我々の課題は、 $M$  を最大化するような  $w, b$  を探すことである。

ここで、 $w$  と  $b$  をともに定数倍しても左辺は変わらないという事実に着目すると、特に  $|w| = \frac{1}{M}$  としても一般性を失わない。すると、式 (6.34) は

$$t_i(w^\top x_i + b) \geq 1 \quad (6.35)$$

と書き直すことができ、これが拘束条件となる。最大化すべき  $M$  の情報は  $w$  のノルムの情報に押し込まれており、 $|w|^2 = \frac{1}{M^2}$  を最小化する最適化問題となる。これは、以下の半正定値計画問題

$$\min_{w, b} w^\top w \quad \text{s.t.} \quad t_i(w^\top x_i + b) \geq 1 \quad (6.36)$$

と同じであり、半正定値計画問題はすでにみたように取り扱いがよく分かっているので、これも同様に解くことができる。

## 7 majorization と確率行列

この章では、行列及びベクトルは実成分のものを考える<sup>83</sup>。

### 7.1 majorization

ここでは、二つの実ベクトル間の関係である majorization<sup>84</sup> を導入しよう。majorization を定義するため、 $n$  次元実ベクトル  $\mathbf{x}$  に対し、その成分を入れ替えて降順にしたベクトル  $\mathbf{x}^\downarrow$  ( $x_1^\downarrow \geq x_2^\downarrow \geq \dots \geq x_n^\downarrow$ ) を導入する<sup>85</sup>。昇順にしたものは同様に  $\mathbf{x}^\uparrow$  ( $x_1^\uparrow \leq x_2^\uparrow \leq \dots \leq x_n^\uparrow$ ) と書く。

**定義 7.1** (majorization). 二つの  $n$  次元実ベクトル  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  が

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \quad (7.1)$$

を満たしており、さらに任意の  $1 \leq m \leq n$  について

$$\sum_{i=1}^m x_i^\downarrow \leq \sum_{i=1}^m y_i^\downarrow \quad (7.2)$$

が満たされるとき、 $\mathbf{y}$  は  $\mathbf{x}$  を「majorize する」といい<sup>86</sup>、 $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  と書く。

majorization は、ベクトル  $\mathbf{x}$  のラベル ( $x_i$  の添え字  $i$  の部分) は重要ではなく、ベクトルの各成分に値がどのように分布しているのかだけが関心事である場合に、有用な比較基準となる。例えば熱統計力学においては、状態分布がどれだけ「乱雑に近いか」を特徴づけている<sup>87</sup>。量子情報におけるリソース理論では、与えられた量子状態からどれだけエンタングルメントを取り出せるか、という問題が majorization の言葉で記述される<sup>88</sup>。情報理論では、統計的な推定・決定の問題における「情報の多さ」の比較のために majorization が用いられる。また経済学においては、財の分配の不等性の特徴づけ (ジニ係数など) においてこうした考え方が用いられる。

いくつか具体例を見ておこう。まず、 $\sum_i p_i = 1$  と規格化されている確率分布のベクトルについて

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{n} \\ \frac{1}{n} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \end{pmatrix} \prec \mathbf{p} \prec \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

という関係が成り立つ。また例えば、以下は majorize する関係にある二つのベクトルである。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \prec \begin{pmatrix} \frac{5}{8} \\ \frac{1}{8} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

<sup>83</sup> この章の執筆にあたり、Bhatia, "Matrix analysis", Springer, Sec.II、山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社、第 2 章などを参照している。

<sup>84</sup> 日本語訳がない (カタカナで「メジャライゼーション」と書くぐらい?) ので、ここでは英語のままにする。

<sup>85</sup> つまり、 $1 \sim n$  上の適切な置換  $\pi$  が存在し、 $x_i = x_{\pi(i)}^\downarrow$  を満たすということである。

<sup>86</sup> 英語だと「 $\mathbf{x}$  は  $\mathbf{y}$  に majorize される ( $\mathbf{x}$  is majorized by  $\mathbf{y}$ )」という言い方をすることも多い。

<sup>87</sup> 詳細は補論で議論する。

<sup>88</sup> 例えば M. ニールセン、I. チャン『量子コンピュータと量子通信』の第 12 章 (第 3 巻) に関連する記述がある。

これは

$$\frac{1}{2} \leq \frac{5}{8} \tag{7.5}$$

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} \leq \frac{5}{8} + \frac{1}{4} \tag{7.6}$$

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{6} = \frac{5}{8} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} = 1 \tag{7.7}$$

が成り立つことから確認できる。一方、以下は互いに一方が他方を majorize する関係にはない<sup>89</sup>。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \not\prec \begin{pmatrix} \frac{5}{9} \\ \frac{2}{9} \\ \frac{2}{9} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \frac{5}{9} \\ \frac{2}{9} \\ \frac{2}{9} \end{pmatrix} \not\prec \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{7.8}$$

これは、

$$\frac{1}{2} \leq \frac{5}{9} \tag{7.9}$$

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{3} \geq \frac{5}{9} + \frac{2}{9} \tag{7.10}$$

という関係から確認できる。

$\mathbf{x}$  が確率ベクトル、すなわち全成分が非負 ( $x_i \geq 0$ ) かつ和が1 ( $\sum_{i=1}^n x_i = 1$ ) であるときには、「ローレンツカーブ (Lorenz curve)<sup>90</sup>」が有用である。ローレンツカーブは、原点 (0,0) から (1,1) に向けて、点  $(\frac{m}{n}, \sum_{i=1}^m x_i^\downarrow)$  ( $m = 1, 2, \dots, n-1$ ) を結んで作られる折れ線である<sup>91</sup> (図 12)。構成により、すべてのローレンツカーブは直線  $y = x$  より上部を通る。また、majorization の定義から直ちにわかるように、 $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  のとき、またそのときに限り、 $\mathbf{y}$  のローレンツカーブはすべての場所で  $\mathbf{x}$  のローレンツカーブの上部にある。これは majorization の視覚的に分かりやすい定義でもある。

ローレンツカーブは、確率分布が不均一な (大きな値と小さな値がともにある) ほど上に出っ張り、均一に近いほど  $y = x$  に近づく。物理や情報の観点からいうと、確率混合を行うほど上の出っ張りがなくなって  $y = x$  に近づいてくると理解できる。

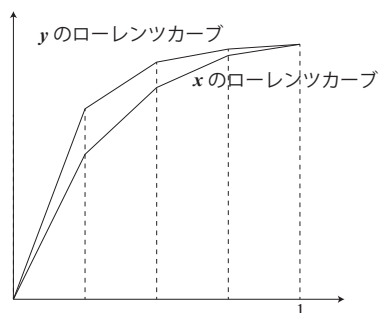


図 12: ローレンツカーブの具体例およびそれと majorization との関係。  $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  であることは、 $\mathbf{y}$  のローレンツカーブが全域で  $\mathbf{x}$  のローレンツカーブよりも上にあることと等価である。

[7-1]. 確率ベクトル  $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$  が、  $\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$  を majorize することもされることもない条件を求めよ。

<sup>89</sup>一般の二つのベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  の間には、一方が他方を majorize する関係にはない。ただし、もし  $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  かつ  $\mathbf{y} \prec \mathbf{z}$  ならば、 $\mathbf{x} \prec \mathbf{z}$  が成り立つ。すなわち、majorization の関係は推移率を満たす。majorization は順序ではなく半順序をなしている。

<sup>90</sup>ローレンツカーブは、経済学者 Max Lorenz にちなんで名付けられたものである。ローレンツカーブやローレンツ変換の Hendrik Lorentz とも、ローレンツゲージの Luitvig Lorenz とも、カオスのローレンツアトラクタの Edward Lorenz とも関係ない。

<sup>91</sup>経済学においては、これを 180 度回転させた形で用いることが多い。そうすると、すべてのローレンツカーブは  $y = x$  の下部を通る。



さて、二つのベクトルの和が一致するという条件 (7.1) が満たされているならば、majorization の条件式 (7.2) は、任意の  $1 \leq m \leq n$  について

$$\sum_{i=1}^m y_i^\uparrow \leq \sum_{i=1}^m x_i^\uparrow \quad (7.11)$$

が成り立つという条件に置き換えても等価な定義を与える。しかしこの等価性は、式 (7.1) が満たされない場合にはもはや成り立たない。そのため、以下の二つの majorization 的な関係が定義できる。

**定義 7.2.** 条件 (7.1) を満たさない、つまり一般に  $\sum_{i=1}^n x_i \neq \sum_{i=1}^n y_i$  である、二つの  $n$  次元実ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  を考える。条件式 (7.2) が任意の  $1 \leq m \leq n$  で成り立つとき、 $\mathbf{y}$  は  $\mathbf{x}$  を「submajorize する」といい、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  と書く<sup>92</sup>。同様に、条件式 (7.11) が任意の  $1 \leq m \leq n$  で成り立つとき、 $\mathbf{y}$  は  $\mathbf{x}$  を「supermajorize する」といい、 $\mathbf{x} \prec^w \mathbf{y}$  と書く。

さて、majorization と等価な特徴づけはいくつか知られている。その一つに、絶対値を用いた特徴づけがある。以下、関数  $|\cdot|^+$  を

$$|x|^+ := \begin{cases} x & : x \geq 0 \\ 0 & : x < 0 \end{cases} \quad (7.12)$$

と定義する。

**定理 7.1.**  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  を二つの  $n$  次元実ベクトルとする。

- $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  の必要十分条件は、任意の実数  $t$  について以下の不等式が成り立つことである。

$$\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+ \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t|^+ \quad (7.13)$$

- $\mathbf{x} \prec^w \mathbf{y}$  の必要十分条件は、任意の実数  $t$  について以下の不等式が成り立つことである。

$$\sum_{i=1}^n |t - x_i|^+ \leq \sum_{i=1}^n |t - y_i|^+ \quad (7.14)$$

- $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  の必要十分条件は、任意の実数  $t$  について以下の不等式が成り立つことである。

$$\sum_{i=1}^n |x_i - t| \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t| \quad (7.15)$$

$\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  の場合の証明を与える。他の場合も同様である。

**証明.** 必要性 ( $\Rightarrow$ ): 与えられた  $t$  に対し、 $k$  を  $x_k^\downarrow \geq t \geq x_{k+1}^\downarrow$  となるように選ぶ<sup>93</sup>。このとき

$$\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+ = \sum_{i=1}^k (x_i^\downarrow - t) \leq \sum_{i=1}^k (y_i^\downarrow - t) \leq \sum_{i=1}^k |y_i - t|^+ \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t|^+ \quad (7.16)$$

となるので、欲しい不等式が得られる。ただし最後の 2 つの不等式では  $|a|^+ \geq a$ 、 $|a|^+ \geq 0$  をそれぞれ用いている。

<sup>92</sup>submajorization を「weak majorization」と呼ぶこともあり、 $\prec_w$  の添え字  $w$  はその頭文字である。

<sup>93</sup> $x_0 < t$  及び  $x_n > t$  の場合を扱うため、形式的に  $x_0^\downarrow = \infty$ 、 $x_{n+1}^\downarrow = -\infty$  と置く。

十分性 ( $\Leftarrow$ ): 与えられた  $m$  に対し、 $t = y_m^\downarrow$  とする。このとき

$$\left(\sum_{i=1}^m y_i^\downarrow\right) - my_m^\downarrow = \sum_{i=1}^n |y_i - y_m^\downarrow|^+ \geq \sum_{i=1}^n |x_i - y_m^\downarrow|^+ \geq \sum_{i=1}^m |x_i - y_m^\downarrow|^+ \geq \sum_{i=1}^m (x_i^\downarrow - y_m^\downarrow) = \left(\sum_{i=1}^m x_i^\downarrow\right) - my_m^\downarrow \quad (7.17)$$

となる。ただし最後の2つの不等式では  $|a|^+ \geq 0$ 、 $|a|^+ \geq a$  をそれぞれ用いている。これが任意の  $m$  で成り立つので、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  が得られる。□

[7-2].  $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  の場合の証明を与えよ。ただし  $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  の場合の結果は既知として用いてよい。

証明は難しくなかったが、図形的なイメージを与えた方が理解しやすいであろう。きちんとした証明には場合分けが必要だが、ここでは特定の場合だけ考える。 $n$ 次元確率ベクトル  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  のローレンツカーブに対し、そのローレンツカーブと接するような傾き  $nt$  の直線を引こう (図 13)。すると、 $\mathbf{x}$  の切片の値は  $\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+$  になることが分かる ( $\mathbf{y}$  も同様)。そのため、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  の場合に  $\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+ \leq \sum_{i=1}^n |y_i - t|^+$  が成り立つことは、図より明らかとなる。

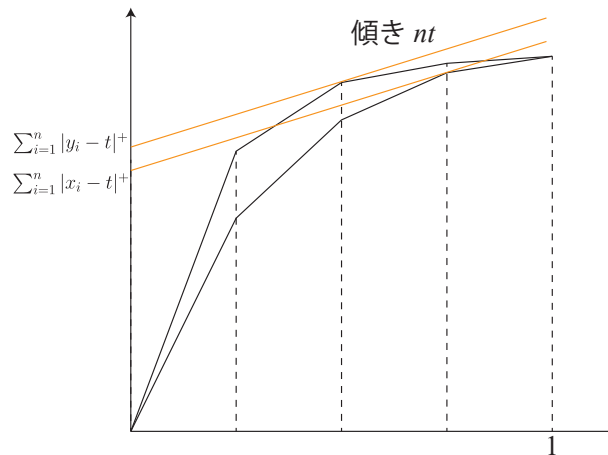


図 13: 定理 7.1 の視覚的なイメージ。  $\sum_{i=1}^n |x_i - t|^+$  及び  $\sum_{i=1}^n |y_i - t|^+$  は、図のようにローレンツカーブが接するような傾き  $nt$  の直線の切片の大きさに等しい。

## 7.2 二重確率行列との関係

**定義 7.3** (確率行列). ある  $n \times n$  行列  $A$  について、すべての行列成分が非負 (任意の  $i, j$  について  $A_{ij} \geq 0$ ) であり、さらにすべての列の和が 1、つまり任意の  $1 \leq i \leq n$  について

$$\sum_{j=1}^n A_{ji} = 1 \quad (7.18)$$

が成り立つとき、この行列は「確率行列 (stochastic matrix)」であるという。

**定義 7.4** (二重確率行列). ある行列  $A$  が確率行列であり、さらにすべての行の和が 1、つまり任意の  $1 \leq i \leq n$  について

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} = 1 \quad (7.19)$$

が成り立つとき、この行列は「二重確率行列 (doubly stochastic matrix)」であるという。

確率ベクトル  $\mathbf{p}$  に確率行列  $A$  を作用させると、得られるベクトル  $\mathbf{q} = A\mathbf{p}$  もまた確率ベクトルになる。

二重確率行列は、特に一様分布  $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \end{pmatrix}$  を定常分布に持つ ( $\mathbf{u} = A\mathbf{u}$ )。このあたりの話は講義後半の確率過程の章で取り扱う。

二重確率行列は以下のきれいな特徴づけを持つ。

**定理 7.2** (バーコフの定理 (Birkhoff's theorem)).  $n \times n$  行列  $A$  について、以下は同値。

1.  $A$  は二重確率行列
2.  $A$  は、置換行列たちの古典確率混合として書ける。すなわち、置換行列たち  $\{P_i\}$  と非負の重み  $c_i$  ( $c_i \geq 0, \sum_i c_i = 1$ ) があり、 $A = \sum_i c_i P_i$  と書ける。

**証明.**  $2 \Rightarrow 1$  は明らか。

$1 \Rightarrow 2$  を示す際には、『二重確率行列の集合  $D$ 』が (行列のなす空間において) 閉凸集合であることを用いる。カラテオドリの定理 (定理 6.1) により、任意の二重確率行列は、 $D$  の端点の古典混合で表せる。そのため、「二重確率行列の集合  $D$  の端点はすべて置換行列である」ことを示せば、求めたい命題 2 は示されたことになる<sup>94</sup>。すべての行列成分が 0 または 1 の二重確率行列は明らかに置換行列なので、以下では、0 でも 1 でもない行列成分を持つ二重確率行列は端点ではない (ある 2 つの二重確率行列の確率混合として書ける) ことを示す。

二重確率行列  $A$  の行列成分  $A_{i_0 j_0}$  が 0 でも 1 でもない値をとっているとする。すると行  $i_0$  の規格化条件より、 $j_0$  とは異なる列  $j_1$  で、 $0 < A_{i_0 j_1} < 1$  を満たす  $j_1$  が存在する。すると今度は列  $j_1$  の規格化条件より、 $i_0$  とは異なる行  $i_1$  で、 $0 < A_{i_1 j_1} < 1$  を満たす  $i_1$  が存在する。これを繰り返して、 $A_{i_0 j_0} \rightarrow A_{i_0 j_1} \rightarrow A_{i_1 j_1} \rightarrow A_{i_1 j_2} \rightarrow \dots$  という文字列を作ることができる。

さて、 $i, j$  としてとりうる値は高々  $n$  通りしかないので、この並びの中ではどこかで必ず同じ値が出現する。今、 $j_m = j_n$  ( $m < n$ ) となったとしよう。このとき、図 14 のように「0 でも 1 でもない値をとる行列成分」をつないだループが作れる。このループに現れる行列成分を、順に「 $+\varepsilon$  する」「 $-\varepsilon$  する」と交互に変え、 $\varepsilon$  が十分小さければ別の二重確率行列を得ることができる。また、これの正負を入れ替えて、順に「 $-\varepsilon$  する」「 $+\varepsilon$  する」と交互に変えても、同じく二重確率行列を得ることができる。この二つの二重確率行列を  $\frac{1}{2}$  ずつ確率混合したものは、元の二重確率行列  $A$  である。よって、0 でも 1 でもない行列成分を持つ二重確率行列は端点ではないことが示された。  $\square$

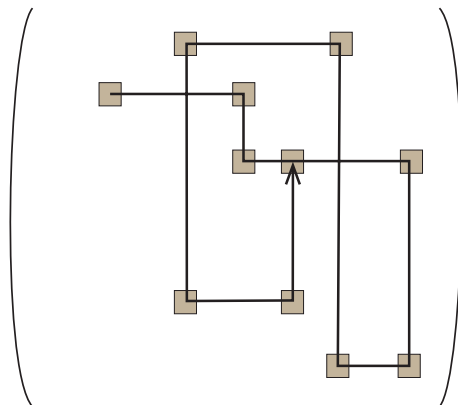


図 14: バーコフの定理の証明における「ループ」のイメージ図。一つの正方形が一つの行列要素  $A_{ij}$  を表している。0 でも 1 でもない行列成分を縦横につないでいくことで、必ずどこかにループが出来る。

ではいよいよ、majorization に関する二重確率行列による特徴づけを行う。

<sup>94</sup>この証明は、P. ラックス『線形代数』丸善出版、第 12 章を参照した。

定理 7.3 (定理 : ハーディ・リトルウッド・ポリヤの定理 (Hardy-Littlewood-Polya theorem) ).  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  を  $n$  次元実ベクトルとする。このとき、以下はすべて等価。

1.  $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$
2. 任意の下に凸な関数  $f(x)$  について、 $\sum_i f(x_i) \leq \sum_i f(y_i)$
3. ある二重確率行列  $A$  が存在し、 $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$  と書ける

この定理とバーコフの定理を組み合わせることで、 $\mathbf{y}$  が  $\mathbf{x}$  を majorize する ( $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  となる) ようなベクトル  $\mathbf{x}$  のなす集合は、置換行列  $\{P_i\}$  たちを用いて作られるベクトルたち  $\{P_i\mathbf{y}\}$  を端点に持つ凸集合であると分かる。

証明.  $2 \Rightarrow 1$ : 任意の  $t$  について  $f_t(x) = |x - t|$  は下に凸な関数なので、定理 7.1 (式 (7.15)) を用いることで示せる。

$3 \Rightarrow 2$ : 凸性の性質から直ちに従う。具体的には、ジェンセンの不等式 (定理 5.7) を用いることで

$$\sum_i f(x_i) = \sum_i f\left(\sum_j A_{ij}y_j\right) \leq \sum_i \sum_j A_{ij}f(y_j) = \sum_i f(y_i) \quad (7.20)$$

と求めたい不等式が証明出来る。

$1 \Rightarrow 3$ : この証明中で最も難しいパートである。色々な証明が知られている<sup>95</sup> が、ここではまず直観的にも理解しやすくかつ構成的である図形的な方法を用いよう<sup>96</sup>。直後に超平面分離定理を用いた別証明を与える。

必要ならば  $\mathbf{x} \rightarrow a\mathbf{x} + b \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ 、 $\mathbf{y} \rightarrow a\mathbf{y} + b \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$  と変換することにより<sup>97</sup>、 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  は確率ベクトルとして

一般性を失わない。これらのローレンツカーブから、二重確率行列  $A$  を具体的に構成する。

図 15 のように、 $\mathbf{x}$  のローレンツカーブの辺を一本目から順に伸ばす。 $\mathbf{y}$  のローレンツカーブと衝突したら、「元々ローレンツカーブの辺である部分」と「延長した部分」、それぞれに重なるように伸ばした線の上の部分相似縮小する。これを  $n-1$  本目の辺まで行う。このプロセスで、 $\mathbf{y}$  のローレンツカーブの各辺 (図 15 では、1~4 本目が順に赤、緑、青、オレンジに塗られている) は分割されるが、その長さは変化しないことに注意しておく。

このプロセスが終了した際、

$$A_{ij} = \frac{\mathbf{y} \text{ のローレンツカーブの } j \text{ 番目の辺のうち、終了時に } i \text{ 番目の区間の上にいるものの長さ}}{\mathbf{y} \text{ のローレンツカーブの } j \text{ 番目の辺の長さ}} \quad (7.21)$$

と置けば、この  $A$  が確率行列であり、また  $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$  かつ  $\mathbf{1} = A\mathbf{1}$  (二重確率性) を満たすことは図より確認できる<sup>98</sup>。□

<sup>95</sup>山本哲郎『行列解析ノート』サイエンス社第 2 章や R. Bhatia, "Matrix Analysis", Springer, Sec.II では、T 変換を経由した構成が示されている。

<sup>96</sup>ここでの証明は、拙稿で恐縮だが N. Shiraishi, "Two constructive proofs on d-majorization and thermo-majorization". J. Phys. A Math. Theor. 53 425301 (2020) の特別な場合に当たる。

<sup>97</sup> $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$  は任意の二重確率行列  $A$  の作用で自分自身に移るので、定数倍することと  $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$  を足すこととは majorization の性質を

変えない。ローレンツカーブの上下関係も、これらの操作で変更を受けないことは容易に確認できる。

<sup>98</sup>例えばプロセス終了時の第一区間の赤線の  $y$  軸方向長さは  $A_{11}y_1$ 、緑線の  $y$  軸方向長さは  $A_{12}y_2$  である。よって第一区間  $y$  方向は  $x_1 = A_{11}y_1 + A_{12}y_2$  という関係を示している。同様に、赤線の  $x$  軸方向の長さは  $A_{11} \cdot \frac{1}{n}$ 、緑線の  $x$  軸方向の長さは  $A_{12} \cdot \frac{1}{n}$  である。よって第一区間  $x$  方向は  $\frac{1}{n} = A_{11} \frac{1}{n} + A_{12} \frac{1}{n}$  という関係を示している。他の区間も同様であり、これにより  $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$  かつ  $\mathbf{1} = A\mathbf{1}$  が示せる。

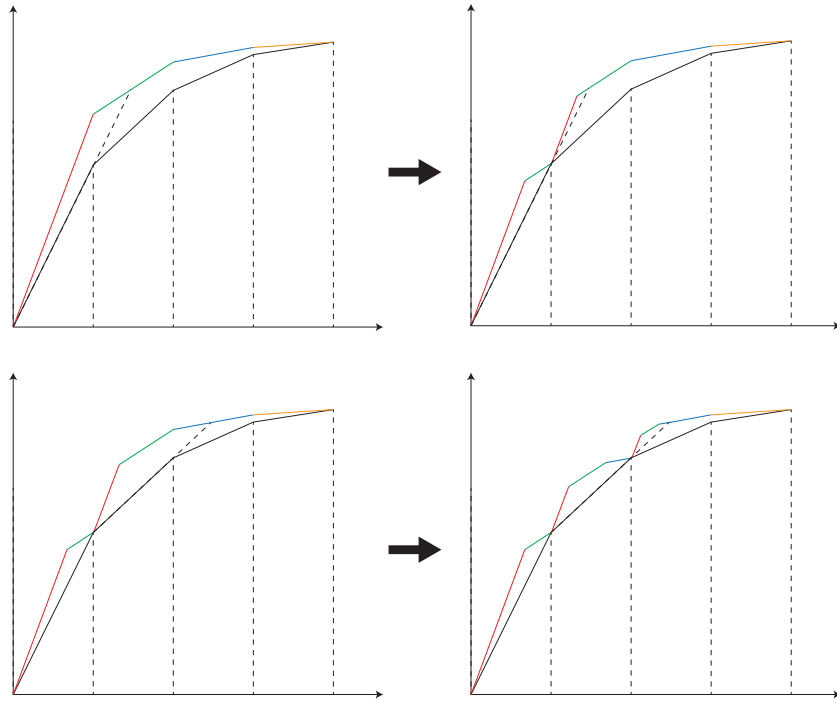


図 15:  $\mathbf{x} \prec \mathbf{y}$  の場合に、 $\mathbf{x} = A\mathbf{y}$  となる二重確率行列  $A$  を構成する方法。色ごとの線の長さは、この手続きをしていっても変化しない点に注意。

超平面分離定理を用いた  $1 \Rightarrow 3$  の別証明. 超平面分離定理を用いて、 $1 \Rightarrow 3$  を背理法で証明する<sup>99</sup>。

二重確率行列  $T$  を用いて  $T\mathbf{y}$  と書けるベクトルの集合を  $S$  とする。  $S$  は閉凸集合である。  $\mathbf{x} \notin S$  として矛盾を導く。超平面分離定理により、  $\mathbf{x} \notin S$  ならば、あるベクトル  $\mathbf{r}$  が存在し、任意の  $\mathbf{z} \in S$  について

$$\mathbf{r}^\top \mathbf{z} < \mathbf{r}^\top \mathbf{x} \quad (7.22)$$

と出来る。  $\mathbf{r}$  及び  $\mathbf{y}$  を降順に並べ替える置換行列をそれぞれ  $P, Q$  とする。  $\mathbf{x}' := P\mathbf{x}$  と置き、  $\mathbf{z}$  として  $\mathbf{z} = PQ\mathbf{y}$  を選ぶ。置換行列は  $P^\top = P^{-1}$  である点に注意すると、この選択の下での式 (7.22) は

$$\mathbf{r}^\downarrow \top (\mathbf{y}^\downarrow - \mathbf{x}') < 0 \quad (7.23)$$

と言い換えられる。  $\mathbf{x}'$  は  $\mathbf{x}$  の置換なので、  $\mathbf{x}' \prec \mathbf{y}^\downarrow$  である。

ところが、降順に並んだ任意の  $n$  次元ベクトル  $\mathbf{w}$  について

$$\mathbf{w}^\top (\mathbf{y}^\downarrow - \mathbf{x}') = \sum_{i=1}^n w_i (y_i^\downarrow - x'_i) = \sum_{i=1}^n (w_i - w_{i+1}) \sum_{k=1}^i (y_k^\downarrow - x'_k) \geq 0 \quad (7.24)$$

が成り立つ。ただし  $w_{n+1} = 0$  と形式的に置いた。これは  $\mathbf{w} = \mathbf{r}^\downarrow$  とすると式 (7.23) に矛盾する。よって仮定が誤りであり、  $\mathbf{x} \in S$  である。  $\square$

また、この証明とほぼ同様の証明により、以下が示せる。ただしベクトルについての不等式  $\mathbf{a} \leq \mathbf{b}$  で、ベクトルの全成分  $i$  について  $a_i \leq b_i$  が成り立つということを意味する。

<sup>99</sup>この証明は、T. Sagawa, "Entropy, Divergence, and Majorization in Classical and Quantum Thermodynamics", Springer, Sec.3 を参照した。

定理 7.4. 以下は等価。

1.  $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$
2. 任意の下に凸な単調増大関数  $f(x)$  について、 $\sum_i f(x_i) \leq \sum_i f(y_i)$
3. ある二重確率行列が存在し、 $\mathbf{x} \leq A\mathbf{y}$  と書ける

ハーディ・リトルウッド・ポリヤの定理の 1-2 間の関係に似ている、別の結果を紹介しよう。関数  $f(x)$  と  $n$  次元ベクトル  $\mathbf{x}$  を用いて、 $f(x_1), \dots, f(x_n)$  と並べた  $n$  次元ベクトルを  $f(\mathbf{x})$  と書くことにする。

定理 7.5.  $f(x)$  は単調増大かつ下に凸な関数とする。このとき、もし  $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  ならば、 $f(\mathbf{x}) \prec_w f(\mathbf{y})$  が成り立つ。

証明.  $f$  の単調性より、 $f(\mathbf{x})$  を降順に並べた  $f^\downarrow(\mathbf{x})$  の  $i$  番目の成分は  $f_i^\downarrow(\mathbf{x}) = f(x_i^\downarrow)$  である。さて、 $n$  次元ベクトル  $\mathbf{x}^\downarrow$  に対し、最初の  $k$  個  $x_1^\downarrow, \dots, x_k^\downarrow$  のみを抜き出して並べた  $k$  次元ベクトルを  $\mathbf{x}^{\downarrow, [k]}$  と書くことにする。すると、 $\mathbf{x} \prec_w \mathbf{y}$  より  $\mathbf{x}^{\downarrow, [k]} \prec_w \mathbf{y}^{\downarrow, [k]}$  が成り立つ。定理 7.4 の 1  $\Rightarrow$  2 を用いることで、 $\sum_{i=1}^k f(x_i^\downarrow) \leq \sum_{i=1}^k f(y_i^\downarrow)$  を得る。これが任意の  $k$  で成り立つので、 $f(\mathbf{x}) \prec_w f(\mathbf{y})$  が言える。  $\square$

### 7.3 <補論> : d-majorization 及び確率行列との関係

majorization の一般化である d-majorization (あるいは relative majorization<sup>100</sup>) というものを導入しよう。

まずはローレンツカーブを、2つの確率分布の組  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  に対して一般化する。  $a_i := p_i/q_i$  と定義する。このとき、 $a_i$  を降順にするような順番に  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$  を並べ替えたものをそれぞれ  $\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*$  と書く。すなわち、 $p_1^*/q_1^* \geq p_2^*/q_2^* \geq \dots \geq p_n^*/q_n^*$  である。これを用いて、 $(0,0)$  と  $(1,1)$  を、頂点  $(\sum_{i=1}^m p_i^*, \sum_{i=1}^m q_i^*)$  を結んで得られるのが、 $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  のローレンツカーブである (図 16)。  $\mathbf{q}$  として一様分布  $(1/n, \dots, 1/n)^\top$  をとると、 $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  のローレンツカーブは通常の  $\mathbf{p}$  のローレンツカーブに一致する。

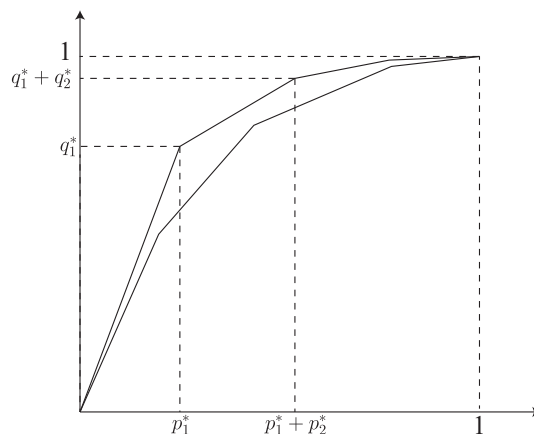


図 16: d-majorization におけるローレンツカーブ。

majorization の場合は、降順への並べ替えの下での  $n$  個の不等式で majorization を定義し、ローレンツカーブの上下関係はそこから導かれる定理という位置づけであった。これに対し d-majorization の場合は、ローレンツカーブの上下関係自体は d-majorization の定義とする。

<sup>100</sup>歴史的にはいろいろな呼び方で呼ばれており、特に d-majorization はもともと別の概念を指すために用いられていたこともあるので、この呼び名が妥当なのかはわかりと微妙ではある。ただ、最近は d-majorization と呼ばれることが多いので、ここでもその呼び方を用いる。

**定義 7.5** (d-majorization). 2つの確率分布の組  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  について、 $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  が  $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$  を d-majorize することを、 $0 \leq x \leq 1$  のすべての場所で  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  のローレンツカーブが  $(\mathbf{p}', \mathbf{q}')$  のローレンツカーブの上部に位置することで定義する。これを  $(\mathbf{p}', \mathbf{q}') \prec (\mathbf{p}, \mathbf{q})$  と書く。

**定理 7.6.** 以下はすべて等価

1.  $(\mathbf{p}', \mathbf{q}') \prec (\mathbf{p}, \mathbf{q})$
2. 任意の実数  $t$  に対し、以下が成立<sup>101</sup>

$$\sum_i |p'_i - tq'_i|^+ \leq \sum_i |p_i - tq_i|^+ \quad (7.25)$$

3. 任意の下に凸な関数  $f(x)$  に対し、以下が成立

$$\sum_i q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_i q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (7.26)$$

4. ある確率行列  $T$  が存在し、 $\mathbf{p}' = T\mathbf{p}$ 、 $\mathbf{q}' = T\mathbf{q}$  と出来る。

**証明.**  $4 \Rightarrow 3$ : ジェンセンの不等式 (定理 5.7) を用いることで、以下のように直ちに導ける。

$$\sum_i q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) = \sum_i q'_i f\left(\sum_k \frac{T_{ik}q_k}{q'_i} \frac{p_k}{q_k}\right) \leq \sum_{i,k} q'_i \frac{T_{ik}q_k}{q'_i} f\left(\frac{p_k}{q_k}\right) = \sum_k q_k f\left(\frac{p_k}{q_k}\right) \quad (7.27)$$

ただしジェンセンの不等式を適用するところでは  $\sum_k T_{ik}q_k = q'_i$  を、最後の等式では  $\sum_i T_{ik} = 1$  を、それぞれ用いている。

$3 \Rightarrow 2$ :  $f(x) = |x - t|^+$  と置けばよい。

$2 \Rightarrow 1$ : 定理 7.1 と同様のアイデアで示せる。

$1 \Rightarrow 4$ : 定理 7.3 の  $1 \Rightarrow 3$  と同様のアイデアで示せる。 □

特に  $\mathbf{q}$  として温度  $T$  のギブス分布 (カノニカル分布) を選ぶと、d-majorization は「ギブス分布をギブス分布に移すような写像 (ギブス保存写像) で、ある状態を別の状態に移せるか」という問題と言い換えられる<sup>102</sup>。これはある種「温度  $T$  の等温環境の下での状態変換」の理論とみなすことが出来る<sup>103</sup>。

<sup>101</sup>今は  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$  の総和が 1 と定まっているので、 $\sum_i |p_i - tq_i| = 2 \sum_i [|p_i - tq_i|^+ - (p_i - tq_i)] = 2(\sum_i |p_i - tq_i|^+) + t - 1$  という形で  $|\cdot|$  と  $|\cdot|^+$  は結びつく。なので、 $|\cdot|$  と  $|\cdot|^+$ 、どちらを用いても構わない。

<sup>102</sup>「量子熱力学 (quantum thermodynamics)」や「リソース理論 (resource theory)」という分野においては、このように「あるクラスの写像のみで、どの状態からどの状態に変換できるか」という問題が研究されている。

<sup>103</sup>古典系においてはギブス保存写像は以下のように言い換えることができる: 対象系の状態 A から B に温度  $T$  のギブス保存写像で変換が可能であることの必要十分条件は、「状態が温度  $T$  のカノニカル分布である補助系 (熱浴をイメージ)」と状態が A の対象系の合成系にエネルギー保存する操作を行って、対象系の状態を B に変換出来ることである。(M. Horodecki and J. Oppenheim, *Fundamental limitations for quantum and nanoscale thermodynamics*, Nat. Comm. 4, 2059 (2013)、N. Shiraishi, "Two constructive proofs on d-majorization and thermo-majorization". J. Phys. A Math. Theor. 53 425301 (2020))

## 8 <補論>：固有値評価

この章では、エルミート行列の固有値を降順に並べたもの  $\lambda^\downarrow$  に対するさまざまな評価式を導く<sup>104</sup>。

### 8.1 固有値の変分表示

以下の結果は基本的である。

**定理 8.1.**  $n \times n$  のエルミート行列  $A$  の固有値を降順に並べたものを  $\lambda_1^\downarrow \geq \lambda_2^\downarrow \geq \dots \geq \lambda_n^\downarrow$  とする。固有値  $\lambda_i^\downarrow$  に対応する固有状態を  $\mathbf{v}_i$  と書く。 $M_{i,j} := \text{span}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_{i+1}, \dots, \mathbf{v}_j)$  を、 $i$  番目～ $j$  番目の固有状態で張られた  $j-i+1$  次元部分空間とする。このとき、任意の  $M_{i,j}$  に含まれる長さ 1 のベクトル  $\mathbf{x} \in M_{i,j}$  について、以下が成り立つ。

$$\lambda_j^\downarrow \leq \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle \leq \lambda_i^\downarrow \quad (8.1)$$

**証明.**  $\mathbf{x} = \sum_{k=i}^j c_k \mathbf{v}_k$  と展開する。このとき  $\langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \sum_{k=i}^j |c_k|^2 \lambda_k^\downarrow$  であるが、 $\lambda_j \leq \lambda_k \leq \lambda_i$  及び  $\sum_{k=i}^j |c_k|^2 = 1$  より、求める式を得る。□

次の定理の証明には、本章の以降の部分で繰り返し見る技法である「次元のカウンティング」が用いられている。議論そのものは極めて単純だが、これと定理 8.1 を組み合わせることで、色々な結果が証明出来る。

**定理 8.2** (クーラン・フィッシャーのミニマックス定理 (Courant-Fischer minimax theorem)).  $n \times n$  のエルミート行列  $A$  の固有値を降順に並べたものを  $\lambda_1^\downarrow \geq \lambda_2^\downarrow \geq \dots \geq \lambda_n^\downarrow$  とする。また、 $S_k$  を  $n$  次元ベクトル空間  $\mathbb{C}^n$  の  $k$  次元部分空間とする。このとき、以下が成り立つ。

$$\lambda_k^\downarrow = \max_{S_k} \min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \min_{S_{n-k+1}} \max_{\substack{\mathbf{x} \in S_{n-k+1} \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle \quad (8.2)$$

**証明.** 一つ目の等式のみ証明する。

今、部分空間  $S_k$  と  $M_{k,n}$  の次元について

$$\dim S_k + \dim M_{k,n} = n + 1 > n \quad (8.3)$$

なので、任意の  $S_k$  について、長さ 1 のベクトル  $\mathbf{y}(S_k)$  で  $\mathbf{y}(S_k) \in S_k$  かつ  $\mathbf{y}(S_k) \in M_{k,n}$  を満たすものが必ず存在する。これを用いて

$$\max_{S_k} \min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle \leq \max_{S_k} \langle \mathbf{y}(S_k), A\mathbf{y}(S_k) \rangle \leq \max_{\mathbf{y} \in M_{k,n}} \langle \mathbf{y}, A\mathbf{y} \rangle = \lambda_k^\downarrow \quad (8.4)$$

と上から押さえられる。最後の等式は定理 8.1 による。ところが、 $S_k = M_{1,k}$  ととれば

$$\min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} \langle \mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \lambda_k^\downarrow \quad (8.5)$$

が成り立つ。よって式 (8.4) の等号は達成可能であり、欲しかった変分表現の式を得る。□

$k$  に対する和をとることにより、以下の結果が得られる。

<sup>104</sup>この章の内容は、山本哲郎『行列解析の基礎』サイエンス社、第 6 章、Bhatia, "Matrix analysis", Springer, Sec.II, Sec.III, R. Horn and C. Johnson, "Topics in matrix analysis", Cambridge University Press, Chap. 4 などに基づく。



**定理 8.3** (カイ・ファンの最大原理 (Ky Fan's maximum principle) ). 設定は定理 8.2 と同じとする。このとき、以下が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow = \max_{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, A\mathbf{x}_i \rangle \quad (8.6)$$

ただし  $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$  は、互いに直交する  $k$  個の長さ 1 のベクトルの組として可能なものすべてを走るものとする。

これを利用すると、 $\mathbf{x}_i$  として特に単位ベクトルのみをとるようにする<sup>105</sup> ことにより、「 $A$  の対角成分を並べたベクトル」は「固有値を並べたベクトル」に submajorize されるという結果

$$\begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{22} \\ \vdots \\ A_{nn} \end{pmatrix} \prec_w \boldsymbol{\lambda} \quad (8.7)$$

が得られる。これは「シュアの定理 (Schur's theorem)」と呼ばれる。

また、

$$\max_{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, (A+B)\mathbf{x}_i \rangle \leq \max_{(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{y}_i, A\mathbf{y}_i \rangle + \max_{(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{z}_i, B\mathbf{z}_i \rangle \quad (8.8)$$

なので<sup>106</sup>、以下の定理もカイ・ファンの最大原理から直ちに従う。

**定理 8.4.** 任意のエルミート行列  $A, B$  に対し、任意の  $k$  について

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(A+B) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(A) + \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B) \quad (8.10)$$

これよりもさらに精度の高い「リツキーの定理」は、次の章で証明する。

## 8.2 行列の和の固有値

$n \times n$  エルミート行列  $A, B$  に対し、両者の和を  $C := A + B$  とする。

**定理 8.5** (ワイルの不等式 (Weyl's inequality) ). 上記設定の下、以下が成り立つ。

$$\lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_j^\downarrow(B) \geq \lambda_{i+j-1}^\downarrow(C) \quad (8.11)$$

$$\lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_j^\downarrow(B) \leq \lambda_{i+j-n}^\downarrow(C) \quad (8.12)$$

ただし一つ目の式は  $i + j \leq n + 1$ 、二つ目の式は  $i + j \geq n + 1$  の条件下とする。

<sup>105</sup> これは  $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$  の走る範囲を制限するものであり、そのため最大値は  $\max_{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, A\mathbf{x}_i \rangle$  と同じかそれを下回ることが分かる。

<sup>106</sup>  $\sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i, (A+B)\mathbf{x}_i \rangle$  を最大化する  $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$  を  $(\mathbf{x}_1^*, \dots, \mathbf{x}_k^*)$  と書くと、以下のように評価できる。

$$\sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i^*, (A+B)\mathbf{x}_i^* \rangle = \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i^*, A\mathbf{x}_i^* \rangle + \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{x}_i^*, B\mathbf{x}_i^* \rangle \leq \max_{(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{y}_i, A\mathbf{y}_i \rangle + \max_{(\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_k)} \sum_{i=1}^k \langle \mathbf{z}_i, B\mathbf{z}_i \rangle \quad (8.9)$$

証明. 一つ目の不等式のみ示す。

3つの部分空間  $M_{i,n}^A, M_{j,n}^B, M_{1,i+j-1}^{A+B}$  は、次元の和が  $\dim M_{i,n}^A + \dim M_{j,n}^B + \dim M_{1,i+j-1}^{A+B} = 2n+1 > 2n$  なので、3つの部分空間すべてに属する長さ1のベクトル  $\mathbf{y}$  が存在する。 $\mathbf{y} \in M_{i,n}^A$  より  $\langle \mathbf{y}, A\mathbf{y} \rangle \leq \lambda_i^\downarrow(A)$ 、 $\mathbf{y} \in M_{j,n}^B$  より  $\langle \mathbf{y}, B\mathbf{y} \rangle \leq \lambda_j^\downarrow(B)$  が得られる。一方、 $\mathbf{y} \in M_{1,i+j-1}^{A+B}$  より

$$\langle \mathbf{y}, A\mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{y}, B\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, C\mathbf{y} \rangle \geq \lambda_{i+j-1}^\downarrow(C) \quad (8.13)$$

が得られる。すべて組み合わせることで求める結果を得る。□

ワイルの不等式 (定理 8.5) の特殊な場合として、

$$\lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_n^\downarrow(B) \leq \lambda_i^\downarrow(C) \leq \lambda_i^\downarrow(A) + \lambda_1^\downarrow(B) \quad (8.14)$$

という固有値の不等式評価が得られる。また、 $X, Y$  をエルミート行列としたとき、式 (8.14) で  $A = Y$ 、 $B = X - Y$ 、 $C = X$  と置くことにより

$$\max_i \left| \lambda_i^\downarrow(X) - \lambda_i^\downarrow(Y) \right| \leq \|X - Y\| \quad (8.15)$$

という評価が得られる<sup>107</sup>。これは「ワイルの摂動定理 (Weyl's perturbation theorem)」と呼ばれている<sup>108</sup>。さらに式 (8.14) の特殊な場合として、以下の定理が得られる。

**定理 8.6** (ワイルの単調性定理 (Weyl's monotonicity theorem)).  $A, H$  をエルミート行列とし、さらに  $H$  は半正定値 ( $H \geq 0$ ) とする。このとき

$$\lambda_i^\downarrow(A) \leq \lambda_i^\downarrow(A + H) \quad (8.16)$$

が成り立つ。

$A, B, A + B$  の固有値の間には、以下の submajorization の関係が成り立つ。

**定理 8.7** (リツキーの定理 (Lidskii's theorem)).  $A, B$  をエルミート行列とする。このとき、以下が成り立つ。

$$\lambda^\downarrow(A + B) - \lambda^\downarrow(A) \prec_w \lambda(B) \quad (8.17)$$

左辺の  $\lambda^\downarrow(A + B) - \lambda^\downarrow(A)$  は  $\lambda_i^\downarrow(A + B) - \lambda_i^\downarrow(A)$  たちを並べたベクトルだが、これは必ずしも降順に並んでいるわけではない点に注意しよう。定理 8.4 (の右辺第一項を左辺に移項したもの) とリツキーの定理の左辺を比較すると

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(A + B) - \lambda_i^\downarrow(A) \leq \sum_{i=1}^k (\lambda^\downarrow(A + B) - \lambda^\downarrow(A))_i^\downarrow \quad (8.18)$$

であり、そのためリツキーの定理の方がより強い不等式である。

証明. リツキーの定理は、任意のサイズ  $k$  の  $\{1, 2, \dots, n\}$  の部分集合  $S$  について

$$\sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A + B) - \lambda_j^\downarrow(A) \leq \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B) \quad (8.19)$$

が成り立つことと等価なので、以下この不等式の証明を行う。

<sup>107</sup> 得られる式は  $\lambda_n^\downarrow(X - Y) \leq \lambda_n^\downarrow(X) - \lambda_1^\downarrow(Y)$ 、 $\lambda_1^\downarrow(X - Y) \leq \lambda_1^\downarrow(X) - \lambda_n^\downarrow(Y) \leq \lambda_1^\downarrow(X - Y)$  である。 $X - Y$  がエルミートなので  $\|X - Y\| = \max(|\lambda_n^\downarrow(X - Y)|, |\lambda_1^\downarrow(X - Y)|)$  が成り立ち、これにより求めたかった式が得られる。

<sup>108</sup> 「摂動」という名前がついているが、 $Y$  が小さい必要はない。

必要ならば  $B - \lambda_k^\downarrow(B)I$  を  $B$  と置き直すことにより、 $\lambda_k^\downarrow(B) \geq 0$  かつ  $\lambda_{k+1}^\downarrow(B) \leq 0$  が成り立つとして一般性を失わない<sup>109</sup>。ここで、 $B = UDU^\dagger$  とユニタリ対角化されるとして、対角行列  $D$  を対角成分が非負の部分  $D_+$  と対角成分が負の部分  $D_-$  に分け ( $D = D_+ + D_-$ )、これに対応するように  $B$  も  $B_+ = UD_+U^\dagger$  と  $B_- = UD_-U^\dagger$  に分ける。構成より  $B_+$  と  $-B_-$  は半正定値であり、 $B_+$  の固有値は  $\lambda_1^\downarrow(B), \dots, \lambda_k^\downarrow(B)$  及び  $n - k$  個の 0 である。

ワイルの単調性定理 (定理 8.6) より  $\lambda_j^\downarrow(A+B) \leq \lambda_j^\downarrow(A+B_+)$  及び  $\lambda_j^\downarrow(A+B_+) - \lambda_j^\downarrow(A) \geq 0$  が任意の  $j$  で成り立つ。よって式 (8.19) 左辺は

$$\sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B) - \lambda_j^\downarrow(A) \leq \sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B_+) - \lambda_j^\downarrow(A) \leq \sum_{j=1}^n \lambda_j^\downarrow(A+B_+) - \lambda_j^\downarrow(A) = \text{Tr}[A+B_+] - \text{Tr}[A] = \text{Tr}[B_+] \quad (8.21)$$

と評価できる。ところが、 $\text{Tr}[B_+] = \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B)$  である。よって式 (8.19) が示された。□

### 8.3 特異値の評価

これまで示してきた固有値に対する不等式は、容易に特異値に対する不等式に拡張できる。例えば、以下の定理は定理 8.4 の特異値への拡張である。

**定理 8.8.** 任意の  $n \times n$  行列  $A, B$  に対し、任意の  $k$  について

$$\sum_{i=1}^k s_i^\downarrow(A+B) \leq \sum_{i=1}^k s_i^\downarrow(A) + \sum_{i=1}^k s_i^\downarrow(B) \quad (8.22)$$

以下の証明法が雛形である。この講義では示さないが、他の様々な固有値に対する定理は、この証明法を用いることで特異値に対する定理に拡張できる<sup>110</sup>。

**証明.** 以下のような  $2n \times 2n$  エルミート行列を考える。

$$\tilde{A} := \begin{pmatrix} O & A \\ A^\dagger & O \end{pmatrix} \quad (8.27)$$

$n \times n$  行列  $A^\dagger A$  の固有値は  $s_1^2(A), \dots, s_n^2(A)$  である。対応する固有ベクトルを  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$  とする。これを用いて、 $\tilde{A}$  の固有値、固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} O & A \\ A^\dagger & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \pm s_i \mathbf{v}_i \\ A^\dagger \mathbf{v}_i \end{pmatrix} = \pm s_i \begin{pmatrix} \pm s_i \mathbf{v}_i \\ A^\dagger \mathbf{v}_i \end{pmatrix} \quad (8.28)$$

<sup>109</sup> この証明だと、どこで集合  $S$  のサイズが  $k$  である事実を使っているか分りにくいが、実はこの置き換えの正当化において

$$\sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B) - \sum_{j \in S} \lambda_j^\downarrow(A+B - \lambda_k I) = |S| \lambda_k = k \lambda_k = \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B) - \sum_{i=1}^k \lambda_i^\downarrow(B - \lambda_k I) \quad (8.20)$$

という形で  $|S| = k$  が用いられている。

<sup>110</sup> 例えばクーラン・フィッシャーのミニマックス定理 (定理 8.2) に対応して、任意の行列  $A$  について

$$s_k^\downarrow(A) = \max_{S_k} \min_{\substack{\mathbf{x} \in S_k \\ |\mathbf{x}|=1}} |\mathbf{A}\mathbf{x}| = \min_{S_{n-k+1}} \max_{\substack{\mathbf{x} \in S_{n-k+1} \\ |\mathbf{x}|=1}} |\mathbf{A}\mathbf{x}| \quad (8.23)$$

が得られる。またワイルの不等式 (定理 8.5) に対応して、任意の行列  $A, B$  について

$$s_i^\downarrow(A) + s_j^\downarrow(B) \geq s_{i+j-1}^\downarrow(A+B) \quad (8.24)$$

$$s_i^\downarrow(A) + s_j^\downarrow(B) \leq s_{i+j-n}^\downarrow(A+B) \quad (8.25)$$

が成り立つ。ただし一つ目の式は  $i+j \leq n+1$ 、二つ目の式は  $i+j \geq n+1$  の条件下とする。またワイルの摂動定理 (8.15) に対応して、任意の行列  $A, B$  について

$$\max_i |s_i^\downarrow(A) - s_i^\downarrow(B)| \leq \|A - B\| \quad (8.26)$$

成り立つ。

と書けることが分かる。特に  $\tilde{A}$  の正の固有値は  $s_1(A), \dots, s_n(A)$  である (負の固有値は  $-s_1(A), \dots, -s_n(A)$  である)。よって、 $\tilde{A}$  に対し定理 8.4 を適用し、 $1 \leq k \leq n$  の範囲を見れば、これは求めたかった結果そのものである。□

これにより、シャッテン  $p$ -ノルムの劣加法性が証明出来る。

**定理 8.9.** 任意の行列  $A, B$  と任意の  $1 \leq p$  に対し、

$$\|A + B\|_p \leq \|A\|_p + \|B\|_p \quad (8.29)$$

**証明.** 定理 8.8 は、submajorization の関係  $s^\downarrow(A + B) \prec_w s^\downarrow(A) + s^\downarrow(B)$  を意味する。 $f(x) = x^p$  ( $1 \leq p$ ) は下に凸な単調増大関数なので、定理 7.4 の  $1 \Rightarrow 2$  を用いることで

$$\|A + B\|_p^p = \sum_i s_i^p(A + B) \leq \sum_i (s_i^\downarrow(A) + s_i^\downarrow(B))^p \quad (8.30)$$

を得る。一方、ベクトルの  $p$ -ノルムに対する劣加法性より

$$\left[ \sum_i (s_i^\downarrow(A) + s_i^\downarrow(B))^p \right]^{1/p} \leq \left[ \sum_i s_i^{\downarrow p}(A) \right]^{1/p} + \left[ \sum_i s_i^{\downarrow p}(B) \right]^{1/p} = \|A\|_p + \|B\|_p \quad (8.31)$$

が言える。これらより求めたかった結果を得る。□

## 第II部

# 確率論とその応用

## 9 ガウス積分とラプラス近似

第II部では、確率計算及びそれに関連する技法を取り扱う。特に物理学などで出てくる問題設定では、何らかの意味で分布が特定の値に鋭いピークを持つ状況が大半である<sup>111</sup>。例えば統計力学では、物理量の分布は鋭いピークを持つことが常であり、これは「マクロな物体のマクロな物理量はほとんど確実に特定の値をとる」ことの反映である。他にも、長時間平均がほとんど確実に特定の値に落ち着く状況や、情報科学であればデータが大量にあるので特定の値に収斂している状況など、このような「分布が鋭いピークを持つ」状況は頻繁に出現する。

この章では、ピークを持つ分布の典型例であるガウス分布とガウス積分を扱い、特に分布が鋭い状況での近似手法である鞍点近似を学ぶ。その後の章では、分布がピークを持つような状況の解析に役立つ様々な道具を見ていく。

### 9.1 多変数ガウス積分

一変数のガウス積分は、1年生の重積分の練習問題としてすでに学んでいるはずである。確認のために結果を書いておく。

**定理 9.1** (ガウス積分 (Gaussian integral))。  $a > 0$  に対し、以下が成り立つ<sup>112</sup>

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (9.1)$$

証明. 式 (9.1) の積分の値を  $I$  とすると、極座標に変数変換して

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x^2+y^2)} = \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} r d\theta e^{-ar^2} = 2\pi \int_0^{\infty} dr r e^{-ar^2} = \frac{\pi}{a} \quad (9.2)$$

となる。全体のルートをとることで、求めたい式 (9.1) を得る。 □

ガウス積分は積分範囲が  $-\infty$  から  $\infty$  であり、また両端では被積分項はすみやかにゼロに減衰するので、 $x \rightarrow x+t$  と変数をシフトさせてもガウス積分の値は変わらない。この事実を利用すると、指数の方に1次の項が加わった場合

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2+bx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}\left(x-\frac{b}{a}\right)^2+\frac{b^2}{2a}} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \quad (9.3)$$

と計算できる。ただし係数  $\frac{1}{2}$  は今後の計算をきれいにするためにつけた。

では多変数の場合のガウス積分に進もう。多変数の場合、指数の肩は  $x_1, x_2, \dots$  の二次以下の多項式である。特に二次の項たちは、二次形式の理論により実対称行列  $A$  を用いて  $\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$  の形にまとめられる (3.4節参照)。ただし再び係数  $\frac{1}{2}$  は後の計算をきれいにするためにつけた。同様に一次の項は、実ベクトル  $\mathbf{b}$  を用いて  $\mathbf{b}^T \mathbf{x}$  とまとめられる。これらの表示を用いて、式 (9.3) と同様に多変数ガウス積分は以下のように計算できる。

<sup>111</sup> どちらかという、そのような値の集中が起きていないマクロな対象はそもそも扱いようがないともいえる。我々が関心を持つ物理の対象は、何らかの意味で普遍性を有しているのが常であり、マクロな物体についての普遍性は「ミクロには多様だが、マクロに見ると常に特定の性質を示す」のような形をとることがほとんどである。

<sup>112</sup> これは積分区間が  $-\infty$  (あるいは  $0$ ) から  $\infty$  だから計算できる。不定積分  $\int dx e^{-ax^2}$  は初等関数の範囲では積分できないことが知られている。

**定理 9.2** (多変数ガウス積分).  $\mathbf{x}$  を  $n$  変数ベクトルとする。  $n \times n$  の正定値実対称行列  $A$  に対し、以下が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det A}} e^{\frac{1}{2}\mathbf{b}^T A^{-1}\mathbf{b}} \quad (9.4)$$

一変数の場合には二次の係数は正である必要があったが、多変数の場合には二次の係数は正定値行列である必要がある (正定値行列は 3 章で既に見た)。

**証明.** まず一次の項がない場合を考えよう。  $n$  次元空間全体の積分  $\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}$  は、どの正規直交基底に沿った向きでも結果は同じである。そこで、  $A$  の規格化された固有ベクトル  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$  を基底に用いることにしよう。対応する  $A$  の固有値は  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  とする。この基底に沿わせて  $\mathbf{x} = \sum_i y_i \mathbf{v}_i$  と書くと、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x}} &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \sum_i y_i \mathbf{v}_i^T A \sum_j y_j \mathbf{v}_j} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} e^{-\frac{1}{2} \sum_i \lambda_i y_i^2} \\ &= \sqrt{\prod_i \frac{2\pi}{\lambda_i}} \\ &= \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det A}} \end{aligned} \quad (9.5)$$

と計算できる。

一次の項がある場合は、一変数の場合と同様に平方完成すればよい。具体的には

$$-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - A^{-1}\mathbf{b})^T A (\mathbf{x} - A^{-1}\mathbf{b}) + \frac{1}{2}\mathbf{b}^T A^{-1}\mathbf{b} \quad (9.6)$$

と計算できる。一変数の場合と同様に、変数の並進シフトはガウス積分の結果を変えない。これらの事実を組み合わせることで欲しかった結果を得る。  $\square$

確率変数の分布が  $P(\mathbf{x}) = C \cdot e^{-a\mathbf{x}^2/2}$ 、あるいは多変数ならば  $P(\mathbf{x}) = C \cdot e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}/2}$  と書けるとき、この確率分布を「ガウス分布 (Gaussian distribution)」という (一次以下の項が指数の肩に含まれていてもよい)。ただし  $C$  は規格化のための定数である。

以下、

$$\langle Z \rangle := \int d\mathbf{x} Z(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}) \quad (9.7)$$

で  $Z$  の平均値を表す。なおここで、  $\int d\mathbf{x}$  は多変数  $\mathbf{x}$  の積分  $\int dx_1 \int dx_2 \cdots$  を表す。

**定義 9.1** (分散・共分散). 一般の確率分布について、

$$\langle \Delta x_i^2 \rangle := \int d\mathbf{x} \Delta x_i^2 P(\mathbf{x}), \quad \langle \Delta x_i \Delta x_j \rangle := \int d\mathbf{x} \Delta x_i \Delta x_j P(\mathbf{x}) \quad (9.8)$$

を、それぞれ変数  $x_i$  の「分散 (variance)」、変数  $x_i$  と  $x_j$  の間の「共分散 (covariance)」という。ただし  $\Delta x_i := x_i - \langle x_i \rangle$  は平均からのずれである。

**定理 9.3.** ガウス分布  $P(\mathbf{x}) = C \cdot e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x}/2}$  において、変数  $\mathbf{x}$  の分散・共分散<sup>113</sup>は、  $A$  の逆行列と一致する。

$$\langle x_i x_j \rangle = (A^{-1})_{ij} \quad (9.9)$$

一変数の場合には、平均ゼロ、分散  $\sigma$  のガウス分布は  $C \cdot e^{-x^2/2\sigma}$  という形をしていたことを基礎統計で習ったと思うが、これはその自然な拡張になっている。なお、確率分布が一次以下の項を伴っている場合は、適宜原点をシフトさせて計算すればよい。

証明.  $A = VDV^\dagger$  とユニタリ対角化 (今は実行列なので直交対角化) されるとする。ただし  $D$  は対角行列  $\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  とする。積分変数として  $\mathbf{y} = V^\dagger \mathbf{x}$  を用いることにする。すると計算したい共分散は

$$\langle x_i x_j \rangle = C \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} (V\mathbf{y})_i (V\mathbf{y})_j e^{-\frac{1}{2} \sum_k \lambda_k y_k^2} \quad (9.10)$$

と表せる。変数  $y_i$  たちは独立な一変数のガウス分布の直積なので

$$C \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dy_i y_j e^{-\frac{1}{2} \sum_k \lambda_k y_k^2} = \frac{1}{\lambda_i} \delta_{ij} \quad (9.11)$$

である。これを式 (9.10) に代入すると

$$C \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} (V\mathbf{y})_i (V\mathbf{y})_j e^{-\frac{1}{2} \sum_k \lambda_k y_k^2} = \sum_m V_{im} V_{jm} \frac{1}{\lambda_m} = (VD^{-1}V^\dagger)_{ij} = (A^{-1})_{ij} \quad (9.12)$$

と求めたかった結果を得る。 □

[9-1]. 2変数の確率分布  $P(x, y) = C \exp(-6x^2 - 4xy - 9y^2 + 4x - 2y)$  を考える。これが確率分布となるように係数  $C$  を定めよう。この分布における  $x$  の分散と  $xy$  間の共分散を求めよ。

## 9.2 複素ガウス積分

では次に、ガウス積分の係数を複素数に拡張しよう。複素数のガウス積分は、経路積分や場の量子論の計算で頻出する。また、フーリエ変換を用いている場合にも複素ガウス積分が現れる。

結果からいうと、係数が複素数になっても、これまでの結果はそのまま成り立つ。

**定理 9.4** (複素ガウス積分).  $\alpha$  を実部が正の複素数、 $\beta$  を任意の複素数とする。このとき以下が成り立つ<sup>114</sup>。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-\beta)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (9.13)$$

証明は、 $\beta$  の複素数への拡張と、 $\alpha$  の複素数への拡張とに分ける。

$\beta$  の複素数への拡張の証明.  $a$  を実数、 $\beta = -ib$  ( $b$  は実数) とする<sup>115</sup>。被積分関数の引数  $x$  を、複素数  $z$  に拡張する。 $z$  の関数  $e^{-az^2}$  が複素平面全域で極を持たないことに注意する。

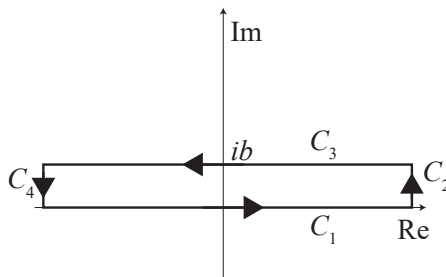


図 17:  $\beta = ib$  の場合の計算のための複素積分の経路。

<sup>113</sup> 二次項のみのガウス分布は平均がゼロなので、平均からのずれ  $\Delta x_i$  と  $x_i$  そのものは一致する。

<sup>114</sup> 複素数の平方根は、 $\alpha = re^{i\theta}$  に対し  $\sqrt{\alpha} = \sqrt{r}e^{i\theta/2}$  と定義する。

<sup>115</sup>  $\beta$  の実部が効かないのは、実数の場合の並進シフトがガウス積分の値を変えないことによって示されている。よって  $\beta$  が虚部だけの場合を考えれば十分である。

$e^{-az^2}$  に対し、図 17 のような積分経路  $C$  の複素積分を考える。無限遠方における  $\pm\infty \rightarrow \pm\infty + ib$  の積分 ( $C_2, C_4$ ) は明らかにゼロ、また極がないので  $C$  の複素積分全体の値もゼロである。よって

$$\int_C dz e^{-az^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2} + \int_{\infty+ib}^{-\infty+ib} dz e^{-az^2} = 0 \quad (9.14)$$

が得られる。これは  $\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-a(z-\beta)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-az^2}$  を意味している。

なおここでの議論は、 $a$  が実部が正の一般の複素数の場合にも拡張できる □

$\alpha$  の複素数への拡張の証明。  $\beta$  の複素数への拡張が一般の  $\alpha$  で実行可能なので、ここでは  $\beta = 0$  の場合を証明すれば十分である。  $\alpha = ae^{i\theta}$  ( $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}$ ) とする。 ガウス積分の被積分関数は偶関数なので、求めたい結果を得るには

$$\int_0^{\infty} dx e^{-ae^{i\theta}x^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{i\theta/2} \quad (9.15)$$

が示せればよい。

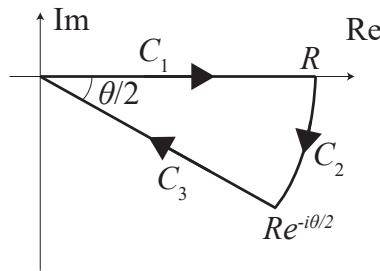


図 18:  $\alpha$  の複素数への拡張の証明の際の複素積分の経路。

この積分を求めるため、図 18 のような積分経路での  $e^{-ae^{i\theta}z^2}$  の複素積分を考える。ただし最終的に  $R \rightarrow \infty$  の極限をとる。  $C_1$  の積分が求めたい積分である。  $C_2$  の積分は

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{-\theta/2} R d\phi \cdot e^{-ae^{i\theta}R^2 e^{2i\phi}} \leq \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{-\theta/2} d\phi \cdot \left| R e^{-ae^{i\theta}R^2 e^{2i\phi}} \right| = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{-\theta/2} d\phi \cdot R e^{-aR^2 \cos(\theta+2\phi)} = 0 \quad (9.16)$$

であり寄与を持たない<sup>116</sup>。  $C_3$  の積分は、  $z = te^{-i\theta/2}$  と置換することで

$$\int_{C_3} dz e^{-ae^{i\theta}z^2} = \int_{\infty}^0 e^{-i\theta/2} dt e^{-at^2} = -e^{-i\theta/2} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (9.17)$$

となる。積分経路  $C$  に沿った全体の複素積分の値はゼロであることより、示したかった式 (9.15) を得る。 □

[9-2]. 以下の積分を求めよ

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{(-4i-3)x^2 + (3i+2)x} \quad (9.18)$$

ちなみに、 $\alpha$  が純虚数の場合 ( $|\theta| = \frac{\pi}{2}$  で実部がゼロの場合) にも同様の結果が成り立つ。これは、式 (9.16) の右から二番目の積分の被積分関数が

$$\int_0^{-\pi/4} d\phi R e^{-aR^2 \sin(-2\phi)} \leq \int_0^{-\pi/4} d\phi R e^{-aR^2(-4\phi)/\pi} = \frac{\pi R (1 - e^{-aR^2})}{4aR^2} \quad (9.19)$$

と上から評価でき、最後の項は  $R \rightarrow \infty$  でゼロに収束することから確認できる。よって

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix^2} = \sqrt{i\pi} \quad (9.20)$$

<sup>116</sup>  $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}$ ,  $-\frac{\theta}{2} \leq \phi \leq 0$  なので、 $\cos(\theta+2\phi) > 0$  である点に注意。



が得られる。この実部と虚部をそれぞれ取り出したものを「フレネル積分」といい<sup>117</sup>、光学の計算でよく用いられる。

定理 9.5 (フレネル積分 (Fresnel integrals) ) .

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \sin(x^2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(x^2) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad (9.21)$$

### 9.3 ラプラス近似と鞍点法

ここでは、物理のあらゆるところで用いられる強力な近似手法である「ラプラスの方法」、あるいはその複素数版である「鞍点法」を見よう。

ラプラスの方法で計算するのは、以下のような形の積分である。

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} \quad (9.22)$$

ただし  $f(x)$  は滑らかな関数<sup>118</sup> で、その最小値はゼロとなるように原点を定めておく。特に  $N$  が非常に大きな状況を考える。

$f(x)$  が最小値ゼロをとる点はただ一カ所である状況を考える (最小値をとる点が複数個所ある場合には、それぞれの個所に対して以下の手続きを行う)。 $f(x)$  の最小点を  $x^*$  とする。 $x = x^*$  においては、被積分関数は  $g(x^*)e^{-Nf(x^*)} = g(x^*)$  をとる。一方、 $x$  が少しでも  $x^*$  から離れると、 $N$  が大きい状況では  $e^{-Nf(x)}$  は急激に小さくなる (図 19)。たとえ  $f(x) = 0.01$  であっても、 $N = 10000$  であれば  $e^{-Nf(x)} = e^{-100}$  と非常に小さい値となる。そのため、積分  $I$  の値を決めるのは、 $x = x^*$  近傍のみであり、そこから遠く離れた領域での挙動は  $N$  が大きい限り影響がないと考えられる。

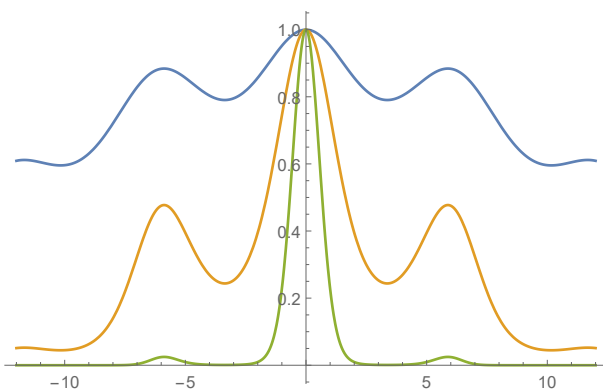


図 19:  $f(x) = \frac{1}{300}x^2 + \frac{1}{10}(1 - \cos x)$  の下での  $e^{-Nf(x)}$  の  $N = 1, 6, 30$  (順に青、オレンジ、緑) のプロット。 $N$  が大きくなるにつれ、 $f(x)$  の最小値  $x = 0$  が分布を支配することが見て取れる。

以上の洞察より、 $f(x)$  を  $x = x^*$  近傍で近似して計算することができると考えられる。テイラー展開により

$$f(x) \simeq \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2 + O((x - x^*)^3) \quad (9.23)$$

と書けるので、積分  $I$  は近似的に

$$I \simeq \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \quad (9.24)$$

<sup>117</sup>フレネル積分といった場合には、積分範囲が  $-\infty$  (あるいは  $0$ ) から  $\infty$  ではなく、 $0$  から有限の値  $y$  までとしたもの ( $\int_0^y dx \sin(x^2)$  および  $\int_0^y dx \cos(x^2)$ ) を指す場合もある。一般の  $y$  に対しては、この積分は初等関数の範囲で解けない。

<sup>118</sup>今の我々の目的においては、 $f$  は三階連続微分可能であるとする。

と評価できる。さらに指数関数の部分は  $x \simeq x^*$  以外の場所ではほとんどゼロとなり積分に寄与しないので、 $g(x)$  を  $g(x^*)$  に置き換えても積分の値は変わらないと考えられる。これらの近似は、 $x \simeq x^*$  以外の場所からの積分  $I$  への寄与は無視できるので、 $x \simeq x^*$  ではない領域では元の積分の被積分関数を全然違う関数に取り換えてしまっても構わない（どのみち寄与ゼロなので）、という発想に基づいている。 $g(x)$  を  $g(x^*)$  に置き換えると、これはガウス積分となるので計算できる。

$$I \simeq \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} = g(x^*) \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x^*)}} \quad (9.25)$$

ここでの近似は、厳密に正当化することができる（詳細は 9.6 節の補論参照）。

**定理 9.6** (ラプラスの方法 (Laplace's method)).  $f(x)$  はただ一カ所  $x = x^*$  で最大値を持ち、 $x = x^*$  近傍で三階連続微分可能な関数だとする。 $g(x)$  は  $x = x^*$  近傍で連続微分可能な任意の関数とする。このとき、左辺が十分大きな  $N$  で収束するとき、以下が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} = g(x^*) e^{-Nf(x^*)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x^*)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)\right) \quad (9.26)$$

[9-3].  $N$  が大きい場合の  $I = \int_0^{\infty} dx e^{-N \cdot x^x}$  を、 $I \simeq C e^{aN} / \sqrt{N}$  の形で近似的に評価せよ。補正項は特に考慮しなくてよい。

これを複素数の場合に拡張したのは「鞍点法」である<sup>119</sup>。鞍点法では、ある複素経路  $C$  に沿った複素積分

$$I = \int_C dz g(z) e^{-Nf(z)} \quad (9.27)$$

を考える。複素数の場合も基本的にはラプラスの方法と同じで、 $f(z)$  の実部が最小化される点  $z^*$  の周りを考えればよい。

ただし、 $z^*$  近傍で  $f(z)$  の虚部が変化すると、複素積分はうまく実行できなくなる。これは、

$$I = \int_C dz g(x) e^{-N\text{Re}f(z)} e^{-iN\text{Im}f(z)} \quad (9.28)$$

であり、 $N$  が大きいときには、第一項が素早く減衰すると同時に、第二項  $e^{-iN\text{Im}f(z)}$  が素早く正負の間を振動してしまい、全体の積分の近似評価がうまく出来なくなってしまうためである。そのため、実部を最小化する点において、虚部が変化しない状況であってほしい。

幸いなことに、コーシーの積分定理により、極をまたがないのであれば積分経路  $C$  の途中を変更しても複素積分の結果は変化しない。そのため、以下のように積分経路  $C$  を変更する。なお以下では  $f(z) = u(z) + iv(z)$  と実部と虚部を分解し、 $z = x + iy$  としている。

1. 実部が停留点となる点、つまり  $u'(z) = 0$  となる点  $z^{**}$  を通過する。
2.  $u(z^{**})$  は経路  $C$  上における  $u(z)$  の最小値である。
3.  $z^{**}$  近傍の経路は、最も急速に  $u(z)$  が大きくなる向き、つまり  $\nabla u = \begin{pmatrix} \partial_x u \\ \partial_y u \end{pmatrix}$  に沿った向きである。

コーシー・リーマンの関係式より、解析関数  $f(z) = u(z) + iv(z)$  について  $\partial_x u = \partial_y v$ 、 $\partial_y u = -\partial_x v$  である。そのため、 $\partial_x^2 u + \partial_y^2 u = 0$  が成り立ち<sup>120</sup>、 $u'(z) = 0$  ( $\partial_x u = \partial_y u = 0$ ) が成り立つ停留点は鞍点であ

<sup>119</sup> 「鞍点近似」や「最急降下法 (method of steepest descent)」などとも呼ばれる。「鞍点法」の名前の由来は、コーシー・リーマンの関係式により、ある経路に沿って極小をとる点は、それと直交する向きの経路では極大となっており、全体としては鞍点になることによる。「最急降下法」は、積分経路がコーシーの積分定理によって変更できるので、最も急な減衰となる向きに積分経路を取り直すことから付いた名前である。

なお、実数のみの場合には極小点は特に鞍点ではないが、ラプラスの方法を「鞍点法」と呼ぶ場合もある。

<sup>120</sup> なので  $u$  はラプラシアンがゼロの調和関数である。

る。また、 $\nabla u \cdot \nabla v = \partial_x u \partial_x v + \partial_y u \partial_y v = 0$  が成り立つので、 $\nabla u$  に沿った向きの変化で虚部  $v$  は変化しない。なので、虚部の振動の問題を回避するには、最も急激に実部が変化する（= 近似精度がよくなる）向きに経路を選べばよいということが分かる。

なので、元の経路  $C$  を、鞍点を  $\nabla u$  の向きに通過するような経路  $C'$  に自然に<sup>121</sup> 変形して、その上での複素積分に対してラプラスの方法を用いることで、元々計算したかった複素積分が計算できる。

#### 9.4 ガンマ関数とスターリングの公式

この節では、階乗を一般化したものであるガンマ関数<sup>122</sup> を導入する。

**定義 9.2** (ガンマ関数). ガンマ関数は以下で定義される。

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t} \quad (9.29)$$

**定理 9.7.**  $z$  が自然数  $n$  のとき、

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (9.30)$$

が成り立つ。

**証明.**  $n$  に関する帰納法を用いて示す。

$n = 1$  のとき、

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} = 1 = 0! \quad (9.31)$$

より成り立つ。

$n = k$  で式 (9.30) が成り立つと仮定する。このとき部分積分を用いて

$$\Gamma(k+1) = \int_0^{\infty} dt t^k e^{-t} = [-t^k e^{-t}]_{t=0}^{\infty} + \int_0^{\infty} dt k t^{k-1} e^{-t} = 0 + k \Gamma(k) = k! \quad (9.32)$$

となり、 $n = k+1$  でも式 (9.30) は成立する。よって示された。  $\square$

ガンマ関数に対してラプラスの方法を適用することにより、 $n$  が大きい場合の階乗  $n!$  の近似公式であるスターリングの公式が得られる。まず階乗を

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dt t^n e^{-t} = \int_0^{\infty} dt e^{n \ln t - t} = n e^{n \ln n} \int_0^{\infty} du e^{-n(u - \ln u)} \quad (9.33)$$

と変形する。ただし最後の等号では  $u = \frac{t}{n}$  と変数変換した。 $f(u) = u - \ln u$  は  $u^* = 1$  で最小値 1 をとる。 $u = 1$  での  $f(u)$  の二階微分は  $f''(1) = 1$  なので、右辺の積分はラプラスの方法を用いることで

$$\int_0^{\infty} du e^{-n(u - \ln u)} = e^{-n} \sqrt{\frac{2\pi}{n}} \left( 1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \right) \quad (9.34)$$

<sup>121</sup> 「自然に」は厳密な言い方ではないが、大きく捻じ曲げたような経路を考えると、「鞍点の値  $u(z^{**})$  が経路上の実部の最小値である」という条件 2 が成り立たなくなってしまう。

<sup>122</sup> 階乗の一般化関数  $F(z)$  そのものは色々考えられることが出来るが、「正の実軸上で  $\ln F(z)$  が下に凸」「 $F(0) = 1$ 」を満たすような複素正則関数への階乗の一般化はガンマ関数のみであることが証明されている（ボーア・モレルupp (Bohr-Mollerup) の定理)。

なお余談だが、「ボーア・モレルupp の定理」のボーアは、原子物理学者ニールス・ボーアの弟ハラルト・ボーア。彼は数学者にしてオリンピック種目サッカーのデンマーク代表（右サイドバック）として銀メダル（1908 年大会）を獲得している。余談の余談だが、ニールス・ボーアもサッカーがうまく、キーパーとしてデンマーク代表の補欠にまでなっていたが、残念ながら召集はされず、メダルはとれなかった。

と近似できる<sup>123</sup>。以上により、階乗の近似式が得られる。

定理 9.8 (スターリングの公式 (Stirling's formula)).  $n$  の階乗は以下の近似式を満たす<sup>124</sup>。

$$n! = \sqrt{2\pi n} e^{n \ln n - n} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right) \quad (9.35)$$

スターリングの公式は、統計力学のエントロピーの計算などにおいて頻用される。例えば、 $N$  個の中から  $M = O(N)$  個を選ぶ場合の数<sup>125</sup> の対数は、 $O(N)$  の項までで

$$\begin{aligned} \ln \binom{N}{M} &= \ln \frac{N!}{M!(N-M)!} = N \ln N - N - (M \ln M - M + (N-M) \ln(N-M) - (N-M)) \\ &= M \ln \frac{N}{M} + (N-M) \ln \frac{N}{N-M} \end{aligned} \quad (9.36)$$

と評価できる。

### 9.5 ハバード・ストラトノビッチ変換

ラプラスの方法が直ちに使えない形の計算であっても、変形することでラプラスの方法が使えるように出来ることがある。その代表的な手法の一つである「ハバード・ストラトノビッチ変換」を見よう。ハバード・ストラトノビッチ変換は、指数の肩にある二次の項（そのままでは扱いづらい）に対し、ダミー変数を増やす代わりに項を一次にする技法である。我々の興味ある物理系の大半は相互作用する系だが、そうした相互作用する系に対する解析で、ハバード・ストラトノビッチ変換はよく用いられる。

抽象的な説明をするより具体例を見た方が分かりやすいと思うので、具体例で説明することにしよう。 $N$  個の  $\pm 1$  の状態をとるスピン  $S_1, \dots, S_N$  からなる系を考えよう。また、 $N$  個の  $p$  次元ベクトル  $\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N$  がある分布に従ってランダムに生成される<sup>126</sup>。この古典スピン系のハミルトニアンを

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j \quad (9.37)$$

$$J_{ij} = \mathbf{X}^i \cdot \mathbf{X}^j \quad (9.38)$$

ととる<sup>127</sup>。つまり、スピン間の相互作用  $J_{ij}$  が与えられたベクトル  $\mathbf{X}^i$  と  $\mathbf{X}^j$  の内積で与えられる全結合スピン系だということである。もし  $\mathbf{X}^i$  たちがすべて同じベクトルならば、これは全結合イジング模型である。一般には  $\mathbf{X}^i$  たちは  $i$  ごとに異なる値をとっている。

この相互作用の形は「ヘブ則 (Hebb rule)」と呼ばれる。また、この形のハミルトニアンを持つ系は「ホップフィールド模型 (Hopfield model)」と呼ばれる。ヘブ則は、スピンを脳のニューロンに対応させた際のパターン記憶のモデル化<sup>128</sup> として知られており、ホップフィールド模型はニューロンにおける記憶の埋め込みの統計力学のシンプルなモデルとして議論されている。

我々は次の問題を考えたい。

<sup>123</sup> ランダウの  $O$  を用いたこの式は厳密に正しい式である。ただし多くの場合にはランダウの  $O$  は付けずに  $\int_0^\infty du e^{-n(u-\ln u)} \simeq e^{-n} \sqrt{\frac{2\pi}{n}}$  と書く。これは近似式である。

<sup>124</sup> この誤差評価  $\left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)\right)$  は緩い誤差評価で、実際には  $\left(1 + O\left(\frac{1}{n}\right)\right)$  の近似精度があることが分かっている。

<sup>125</sup> 日本の学校では、場合の数は  ${}_N C_M$  のように書く記法を教えるが、海外だと  $\binom{N}{M}$  と書くことが多い。

<sup>126</sup> あるいは  $\mathbf{X}^i$  たちはパラメータとしてそれぞれ与えられているとしてもよい。本節後半の解析はこのような見方に立っている。

<sup>127</sup> 全体を 2 で割っているのは、同じ辺が  $ij$  と  $ji$  で二度出現するからである。

<sup>128</sup> ニューロンの記憶のモデルとして見る場合には、スピン  $i$  が上向き (下向き) であることを「 $i$  番目のニューロンが発火していた (していない)」とみなす。 $k$  番目のニューロンの発火パターンにおいて  $i$  番目のニューロンが発火していたことを  $X_i^k = 1$ 、発火していないことを  $X_i^k = -1$  と記述する。そうすると、記憶するパターン数  $p$  が小さい場合には、記憶された各パターンはこのハミルトニアンの固定点 (エネルギー極小点) になることが知られている。

問題：ハミルトニアンが式 (9.37)、相互作用  $J_{ij}$  が式 (9.38) で与えられる系を考える。 $\mathbf{X}$  の各ベクトル成分が確率  $1/2$  ずつで  $\pm 1$  をとるとする<sup>129</sup>。この設定の下で、 $N \rightarrow \infty$  の熱力学極限におけるホップフィールドモデルの分配関数

$$Z = \sum_{\mathbf{S}} e^{-\beta H} \quad (9.39)$$

を計算せよ。ただし  $\sum_{\mathbf{S}}$  は  $\sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1}$  の略記で、すべてのスピン配位に対する和を表している。

分配関数は本当は  $\mathbf{X}^i$  たちに依存した確率変数だが、中心極限定理によりほとんどすべての  $\mathbf{X}^i$  たちの出現に対し同一の分配関数になることが示せるので、以下ではこの「典型的な分配関数」を求める。分配関数が求まれば、ホップフィールドモデルの統計力学的な性質はそこから求めることができる。

この問題の最後の計算は煩雑になるのでその部分はこの講義ではフォローしないが、分配関数が必要ならば計算できるような形にまで変形できることを以下で示す<sup>130</sup>。

分配関数は

$$Z = \sum_{\mathbf{S}} \exp \left[ \frac{\beta}{2N} \sum_{k=1}^p \left( \sum_i X_k^i S_i \right)^2 \right] \quad (9.40)$$

と書き直せる。ここでラプラス近似を使うため、ハバード・ストラトノビッチ変換を行う。

**定理 9.9** (ハバード・ストラトノビッチ変換<sup>131</sup> (Hubbard-Stratonovich transformation)).  $S$  の二次項の指数関数は、新たなダミー変数  $m$  を導入し、以下のように書き直せる。

$$\exp \left[ \frac{a}{2N} S^2 \right] = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp \left[ -\frac{Na}{2} m^2 + amS \right] \quad (9.41)$$

式 (9.41) が成り立つこと自体は、9.1 節で見たようにガウス積分の簡単な計算で分かるが、この変換によって指数の肩には  $S$  の一次の項しか現れていない点が注目すべき部分である。一次であれば項ごとに分解して計算を進めることが容易な場合が多い。実際、今回のホップフィールドモデルの場合もそうになっている。

今回の場合、 $p$  個の  $\sum_i X_k^i S_i$  をそれぞれ式 (9.41) 中の  $S$  とみなし、それぞれに対応して  $p$  個のダミー変数  $m_1, \dots, m_p$  を導入する。すると分配関数は

$$\begin{aligned} Z &= \left( \frac{N\beta}{2\pi} \right)^{p/2} \sum_{\mathbf{S}} \int d\mathbf{m} \exp \left[ -\frac{N\beta}{2} \sum_{k=1}^p m_k^2 + \beta \sum_{k=1}^p m_k \sum_i X_k^i S_i \right] \\ &= \left( \frac{N\beta}{2\pi} \right)^{p/2} \int d\mathbf{m} \exp \left[ -\frac{N\beta}{2} \sum_{k=1}^p m_k^2 + \sum_i \ln \left[ 2 \cosh \left( \beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (9.42)$$

と計算できる。特に重要な点は、一行目の形になることによってスピン配位  $\mathbf{S}$  に対する和が取れてしまった点である。これは  $S_i$  の項が指数の肩において一次になったので、スピン配位の和と積分を入れ替えて

$$\sum_{\mathbf{S}} \exp \left[ \beta \sum_{k=1}^p m_k \sum_i X_k^i S_i \right] = \prod_{k=1}^p \left( \sum_{S_i=\pm 1} \exp \left[ \beta m_k \sum_i X_k^i S_i \right] \right) = \prod_{k=1}^p \left( 2 \cosh \left[ \beta m_k \sum_i X_k^i \right] \right) \quad (9.43)$$

と計算出来たことによる。

<sup>129</sup> このような確率変数を「ラデマツハ確率変数 (Rademacher random variable)」という。

<sup>130</sup> 今回示すのは最も簡単な場合である。(i) ベクトルの大きさ  $p$  (記憶する情報の種類に相当) が  $O(N)$  の値をとる場合、(ii)  $p = O(1)$  で  $N$  が有限の場合の有限サイズ効果の補正の評価、などはそれほどやさしくない。この辺りの物理的な議論は西森秀稔『スピングラスと情報統計力学』岩波書店、数学的に厳密な解析は A. Bovier, *Statistical Mechanics of Disordered Systems: A Mathematical Perspective*, Cambridge university press などの教科書を見ていただきたい。

<sup>131</sup> 「ストラトノビッチ・ハバード変換」と呼ばれることもある。

そうすると式 (9.42) の指数の肩はラプラス近似が適用できる形になっている。実際、

$$f(\mathbf{m}) = \frac{\beta}{2} \sum_{k=1}^p m_k^2 - \frac{1}{N} \sum_i \ln \left[ 2 \cosh \left( \beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i \right) \right] \quad (9.44)$$

と置けば、この積分は

$$Z = \left( \frac{N\beta}{2\pi} \right)^{p/2} \int d\mathbf{m} e^{-Nf(\mathbf{m})} \quad (9.45)$$

と、ラプラス近似そのものの形で書けている。ただし  $\mathbf{m} := (m_1 \cdots m_p)^\top$  とベクトル表示した。  $p$  本ある  $m_1, \dots, m_p$  の極値に対する方程式は、  $f(\mathbf{m})$  をそれぞれ  $m_1, \dots, m_p$  で微分してゼロと置くことで得られる。その結果は、各  $k = 1, \dots, p$  に対する

$$m_k^* = \frac{1}{N} \sum_i X_k^i \tanh \left( \beta \sum_{k'=1}^p m_{k'}^* X_{k'}^i \right) \quad (9.46)$$

という極値方程式である。  $\mathbf{X}_i := (X_1^i \cdots X_p^i)^\top$  たちの経験分布（実際に得られた  $\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^N$  たちがなす分布）を  $p(\mathbf{X})$  と書くことにしよう。  $\mathbf{X}$  たちが独立同分布  $P(\mathbf{X})$  から確率的に生成されている場合、  $N \rightarrow \infty$  においては、経験分布  $p(\mathbf{X})$  はほとんど確実に  $P(\mathbf{X})$  に一致する。確率分布  $p(\mathbf{X})$  に基づく期待値を  $\mathbb{E}F(\mathbf{X}) := \sum_{\mathbf{X}} p(\mathbf{X}) F(\mathbf{X})$  と書くことにすると、式 (9.44) は

$$f(\mathbf{m}) = \frac{\beta}{2} |\mathbf{m}|^2 - \mathbb{E} \ln [2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \mathbf{X})] \quad (9.47)$$

と簡潔に書き直せる<sup>132</sup>。ここまでの議論は、  $X_k^i$  たちがどのような値をとっているか、どういう分布をしているかには一切よらない一般的な議論である。

さて、  $\mathbf{X}_k^i$  が  $\pm 1$  を確率  $1/2$  ずつでとるという性質より

$$\mathbb{E}[(\mathbf{m} \cdot \mathbf{X})^2] = |\mathbf{m}|^2 \quad (9.48)$$

が成り立つ<sup>133</sup>。そのため、

$$\phi(x) := \frac{\beta}{2} x^2 - \ln[2 \cosh(\beta x)] \quad (9.49)$$

という関数を用いて

$$f(\mathbf{m}) = \mathbb{E}[\phi(\mathbf{m} \cdot \mathbf{X})] \quad (9.50)$$

と書ける。

$\phi(x)$  の最小値を与える  $x$  を  $x^*$  と書こう。これは

$$0 = \phi'(x) = \beta x - \beta \tanh \beta x \quad (9.51)$$

の解でもある<sup>134</sup>。一般の  $\beta$  に対してこの方程式を解いて解析的に  $x^*$  を求めることはできないが、解の個数や性質はグラフを図示することで導ける。特に十分低温（  $\beta$  が十分大きい）ならば、  $x^*$  は正負同じ絶対値で二つ現れる。

もし、  $2^p$  通りある  $\mathbf{X}$  すべてに対し、  $\mathbf{m} \cdot \mathbf{X} = x^*$  となるような  $\mathbf{m} = \mathbf{m}^*$  が存在したならば、その  $\mathbf{m}^*$  は明らかに  $f(\mathbf{m})$  の最小値を与える。幸いなことに、そのような  $\mathbf{m}^*$  は存在する。それは「  $p$  個の成分のうち、1 か所だけ  $\pm x^*$ 、他はすべてゼロ」というものである。全部で  $2p$  本あるこのようなベクトルたちが、  $f(\mathbf{m})$  の最小点である。また、これ以外に最小値を与える点が存在しないことも容易に確認できる。そのため、  $Z$  を求めるにはこれら  $2p$  個の点の周りでラプラス近似を行ってすべて足しあげればよい。

<sup>132</sup> とりうるすべての  $\mathbf{X}'$  について、  $p(\mathbf{X}') = (\mathbf{X}' \text{ の出現回数})/N$  なので、  $\frac{1}{N} \sum_i \ln [2 \cosh(\beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i)] = \mathbb{E} \ln [2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \mathbf{X})]$  である。  $2 \cosh(\beta \sum_{k=1}^p m_k X_k^i)$  は  $\mathbf{X}_i$  ( $1 \leq i \leq N$ ) の関数である点に注意する。

<sup>133</sup> より一般に、  $\mathbb{E}[X_i^2] = 1$ 、  $\mathbb{E}[X_i X_j] = 0$  が任意の  $i, j$  で成り立つなら、以下の結果はそのまま成り立つ。

<sup>134</sup> この形の方程式は、全結合イジング模型を解いた際にも出会ったはずである。

## 9.6 <補論>：ラプラスの方法の証明の概略

この節では、以下のラプラス近似 (9.26) を誤差項込みで導出する概略を示す<sup>135</sup>。まず導きたいラプラス近似 (9.26) の式を以下に再掲する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} = g(x^*) e^{-Nf(x^*)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x^*)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)\right) \quad (9.26)$$

ラプラスの方法の仮定が本編ではやや曖昧だったので、ここで明確にしておこう。

- ある  $N_0$  が存在し、 $N \geq N_0$  ならば  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |g(x)| e^{-Nf(x)}$  は有限の値に収束する。
- 任意の  $d > 0$  に対し、 $\inf_{|x-x^*|>d} f(x) > f(x^*)$  が成り立つ。
- $f(x)$  は  $x^*$  近傍で三階連続微分可能。
- $g(x)$  は  $x^*$  近傍で連続微分可能。

ラプラスの方法の導出では、以下の手順で近似していく。ただし以下では  $d$  は十分小さく、また  $N$  は ( $d$  を決めたとうえで) 十分大きくとるものとする

1.  $\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) e^{-Nf(x)} \simeq \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf(x)}$  (誤差は指数的に小さい)
2.  $\int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf(x)} \simeq e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2}$  (誤差は  $O(1/\sqrt{N})$ )
3.  $e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \simeq e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2}$  (誤差は  $O(1/\sqrt{N})$ )
4.  $e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \simeq e^{-Nf(x^*)} \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x^*) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2}$  (誤差は指数的に小さい)

以下順に証明の概略を示す。ただし 4 は単にガウス積分の積分範囲を有限領域に限定するだけで、この誤差評価は明らかなので省略する。

ステップ 1 :  $f_d := \inf_{|x-x^*|>d} f(x)$  とする。すると 1 の近似誤差は

$$\left| \int_{|x-x^*|>d} dx g(x) e^{-Nf(x)} \right| \leq \int_{|x-x^*|>d} dx |g(x)| e^{-Nf(x)} \leq \left( \int_{|x-x^*|>d} dx |g(x)| e^{-N_0 f(x)} \right) e^{-(N-N_0)f_d} \quad (9.52)$$

と上から評価できる。ここで最右辺は  $f_d > f(x^*)$  より、 $e^{-Nf(x^*)}$  よりも指数的に素早くゼロに収束する。

ステップ 2 :  $x^* - d \leq x \leq x^* + d$  の区間において、 $f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2}f''(x^*)(x-x^*)^2 + r(x)(x-x^*)^3$  と表す。このとき

$$\begin{aligned} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-Nf(x)} &= e^{-Nf(x^*)} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx g(x) e^{-\frac{N}{2}f''(x^*)(x-x^*)^2} e^{-Nr(x)(x-x^*)^3} \\ &= e^{-Nf(x^*)} \int_{-\sqrt{Nd}}^{\sqrt{Nd}} ds g(x) e^{-\frac{1}{2}f''(x^*)s^2} e^{-\frac{1}{\sqrt{N}}r(x)s^3} \end{aligned} \quad (9.53)$$

と書き直せる。ただし最後の等号では  $s := \sqrt{N}(x-x^*)$  と変数変換した。積分のなかの  $g(x)$  と  $r(x)$  も本当は  $N$  依存性を持つが、これはゆっくりとしか変動しないので変化の寄与は無視できる (厳密に押さえることも出来る)。なので  $N$  依存性は実質的に最後の指数関数の肩にのみ現れているが、ここからの寄与は (積分を実行した下で)  $e^{-\frac{1}{\sqrt{N}}r(x)s^3} = 1 + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$  と評価できる<sup>136</sup>。

<sup>135</sup> 以下の内容は、若木宏文「ラプラス近似とその応用」数理解析研究所講究録 2019, 2133: 66-74 に基づく。

<sup>136</sup>  $s$  は  $\sqrt{N}$  程度まで大きくなるので、ナイーブに指数関数をテイラー展開しただけではこの評価は得られない。だが、 $s$  が大きい領域ではかかっている  $e^{-\frac{1}{2}f''(x^*)s^2}$  が指数的に小さくなるので、その点まで考慮して手前のガウス積分と組み合わせて評価することでこの結果が得られる。

ステップ 3 :  $a := \sup_{|x-x^*|<d} |g'(x)|$  とする。すると 3 の近似誤差は

$$\begin{aligned} \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx (g(x) - g(x^*)) e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} &\leq \int_{x^*-d}^{x^*+d} dx a |x-x^*| e^{-Nf''(x^*)(x-x^*)^2/2} \\ &= \frac{2a}{Nf''(x^*)} (1 - e^{-Nf''(x^*)d^2/2}) \end{aligned} \quad (9.54)$$

と評価できる。 $1/\sqrt{N}$  をくくりだすと、 $O(1/\sqrt{N})$  でゼロに収束することが分かる。



## 10 確率過程

### 10.1 確率過程の定義

「状態が時間とともにどのように変化するか」が、確率的に決まるようなプロセスを「確率過程 (stochastic process)」という<sup>137</sup>。特に確率過程が「次の状態の発生確率が、今の状態が何であるかにより依存しており、それより過去の状態には依存しない」という性質を持つとき、この性質を「マルコフ性 (Markov property)」という。時間が離散的で、マルコフ的な確率過程を「マルコフ連鎖 (Markov chain)」という。

マルコフ過程においては、例えばとりうる状態が A~C の三状態で、今の状態が A のときに「次のステップでも A に留まる確率が 1/2」「A から B に変わる確率が 1/3」「A から C に変わる確率が 1/6」のように定められている。物理的な対象の例としては、複数の安定な状態をとる生体内のたんぱく質（この場合、確率的な状態変化は熱ゆらぎによって生じる）がある。抽象的な例だと、ランダムウォークはこの例に当たる。

マルコフ性から、一つ先のステップの確率分布は、今の確率分布だけで定まる。 $n$  ステップ目における状態  $i$  の確率分布を  $p_i^n$  と書くことにすると、A,B,C の三状態系ならば、次のステップの確率分布は

$$\begin{pmatrix} p_A^{n+1} \\ p_B^{n+1} \\ p_C^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{AA} & R_{AB} & R_{AC} \\ R_{BA} & R_{BB} & R_{BC} \\ R_{CA} & R_{CB} & R_{CC} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_A^n \\ p_B^n \\ p_C^n \end{pmatrix} \quad (10.1)$$

という形で、書くことが出来る。ここで、行列  $R$  は 7.2 節 (定義 7.3) で導入した確率行列であり、それぞれの状態変化の確率を定めたものである。例えば  $R_{BA}$  ならば、「今の状態が A の場合に、次のステップで状態が B になる確率」を表している。ひとつ前の段落で書いた具体例ならば、 $R_{BA} = 1/3$  である。

$R$  は確率行列でないといけないのは、以下の理由による。確率の和は 1 にならないといけないので

$$\sum_i p_i^n = 1 \quad (10.2)$$

は任意のステップ数  $n$  で満たされないといけない。これを成り立たせるためには、行列  $R$  もまた

$$\sum_i R_{ij} = 1 \quad (10.3)$$

が任意の  $j$  で満たされないといけない。これは「もし今状態  $j$  にいるとして『次のステップでどの状態に動くか』の確率を、すべての行き先の状態について足したら 1 になる」という事実を表している。そしてもちろん遷移確率は非負でないといけないので  $R_{ij} \geq 0$  が成り立つ。よって  $R$  は確率行列である。

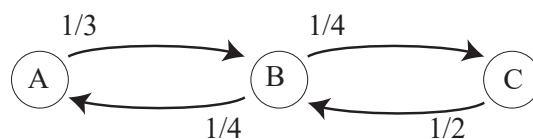


図 20: 考えている三状態系の遷移確率。

確率過程の例として、図 20 のような三状態の確率過程を考えてみよう。矢印の根元に書かれている数字が、その遷移が起きる確率である。この確率過程の時間発展方程式は

$$\begin{pmatrix} p_A^{n+1} \\ p_B^{n+1} \\ p_C^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/4 & 0 \\ 1/3 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1/4 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_A^n \\ p_B^n \\ p_C^n \end{pmatrix} \quad (10.4)$$

である。 $R_{AC} = R_{CA} = 0$  は、この確率過程では A から C に 1 ステップで変化することは出来ず、必ず B を経由しないと A から C へは移り変わらないという事実を表している (図 20 参照)。

<sup>137</sup> 高度な数学的知識が不要で読める確率過程の教科書としては、R. デュレット『確率過程の基礎』丸善出版、などがある。ウェブで読めるテキストとしては逆瀬川浩孝「確率過程とその応用」(<http://www.f.waseda.jp/sakas/stochastics/stochastics.pdf>)などがある。

## 10.2 定常分布と収束定理

確率過程では、一般に1ステップ進むことによって確率分布は変化する。しかし、ある特別な確率分布は、1ステップ進んでも分布が元のままである。このような分布を「定常分布」という。

**定義 10.1** (定常分布 (stationary distribution)). 確率行列  $R$  で記述される確率過程における「定常分布」 $p^{ss}$  とは、以下を満たす確率分布である。

$$p^{ss} = Rp^{ss} \quad (10.5)$$

我々は以下で、「自然な」確率行列  $R$  においては、定常分布が一意的に存在し、さらにどのような確率分布から確率過程を初めても、十分時間が経つと必ず確率分布が定常分布に収束することを示す。確率行列に対して課す条件を述べるために、いくつかの性質を導入しよう。以下、すべての行列が非負実数である行列を「非負行列」と呼ぶ。確率行列はもちろん非負行列である。

**定義 10.2** (連結性).  $K \times K$  の非負行列  $A$  について、任意の  $i, j \leq K$  ( $i \neq j$ ) に対し、自然数の列  $a_1, a_2, \dots, a_n$  で、 $a_1 = i, a_n = j$  かつ任意の  $1 \leq l \leq n-1$  において  $R_{a_{l+1}a_l} > 0$  を満たすようなものが存在するとき、この行列  $R$  は「連結性<sup>138</sup>」を満たすという。

連結性は、任意の二状態  $j, k$  に対し、 $j$  と  $k$  を結ぶ非ゼロの行列成分の経路が存在することを述べている。例えば

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.6)$$

は連結性を満たしている。一方

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.7)$$

は、状態 2, 3, 4 はどれも状態 1 に行くことができないので、この行列  $B$  は連結性を満たさない。また、

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.8)$$

も連結性を満たさない。

**定理 10.1.** 確率行列  $R$  が連結性を満たすとする。このとき、 $R$  の定常分布がただ一つ存在し、定常分布のすべての成分は非ゼロである。

<sup>138</sup> 「連結性」のことは「既約性 (irreducible)」とも呼ばれる。

この定理は初等的に証明することも出来る<sup>139</sup>が、ここでは以下の強力な定理に訴えることで証明を省略する。 $R$  のペロン根  $\lambda_{PF}$  が最大固有値 1 であり<sup>140</sup>、対応する固有ベクトルが定常分布である。

**定理 10.2** (ペロン・フロベニウスの定理 (Perron-Frobenius theorem)).  $A$  は実行列で、連結性を満たし、非対角成分はすべて非負 ( $i \neq j$  なら  $A_{ij} \geq 0$ ) であるとする<sup>141</sup>。このとき、「ペロン根 (Perron root)」と呼ばれる  $A$  の固有値  $\lambda_{PF}$  が存在し、以下を満たす。

1.  $\lambda_{PF}$  は実数であり、対応する固有ベクトルはすべてのベクトル成分が正の実数にとれる。
2.  $\lambda_{PF}$  は縮退していない。
3. 他の任意の固有値  $\lambda$  について、 $\operatorname{Re}\lambda < \lambda_{PF}$ 。特に  $A$  の全成分が正のとき、 $|\lambda| < \lambda_{PF}$ 。
4.  $\lambda_{PF}$  以外の固有値に対応する固有ベクトルで、すべてのベクトル成分が正の実数となるものは存在しない。

次に、確率分布が長時間後に定常分布に収束することを示そう。そのために「強い連結性」を導入する

**定義 10.3** (強い連結性 (strong connectivity)<sup>142</sup>)。非負行列  $R$  が強い連結性を満たすとは、正整数  $m$  が存在し  $R^m$  ( $R$  の  $m$  乗) の行列要素が全て正となることをいう。

強い連結性を満たすならば連結性を満たすことは容易に確認できる。連結性を満たすが強い連結性を満たさない行列の例としては

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.12)$$

がある。この行列を確率行列とする確率過程は、状態 1 と 2 の間を分布が振動する挙動を示す。強い連結性は、このような「振動し続けて減衰しない」振る舞いを排除する。

<sup>139</sup>  $R$  のサイズ  $K$  に対する帰納法で証明する。  $K = k$  で仮定が成り立つとする。連結性を満たす  $(k+1) \times (k+1)$  の確率行列  $R$  に対し、 $R$  を用いて  $k \times k$  の確率行列  $R'$  を

$$R'_{i,j} := R_{i,j} + \frac{R_{i,k+1}R_{k+1,j}}{\sum_{l=1}^k R_{l,k+1}}. \quad (10.9)$$

と構成する。 $R'$  が確率行列であり連結性を満たすことは容易に確認できる。

仮定により  $k \times k$  確率行列  $R'$  は、 $R'\mathbf{p}' = \mathbf{p}'$  を満たすすべての成分が非ゼロの確率ベクトル  $\mathbf{p}'$  (定常分布) が存在する。まず存在を示す。この  $\mathbf{p}'$  を用いて、 $\mathbf{p}$  を

$$p_i = \begin{cases} p'_i & : i \leq k, \\ \frac{1}{\sum_{l=1}^k R_{l,k+1}} \sum_{j=1}^k R_{k+1,j} p'_j & : i = k+1. \end{cases} \quad (10.10)$$

と定義すると、これは確かに  $R$  の全成分正の固有値 1 の (確率ベクトルとは限らない) 固有ベクトルであることが代入することで確認できる。

次に一意性を示す。定常分布が  $\mathbf{p}^a$  と  $\mathbf{p}^b$  の 2 つ存在したとする。 $\mathbf{p}^a$  を  $1 \leq i \leq k$  に制限したもの (つまり  $(p_1^a, p_2^a, \dots, p_k^a)^t$  というベクトル) を  $\mathbf{p}^{a'}$  と書くと、上記の  $R'$  は  $\mathbf{p}^{a'}$  を定常分布に持つ。この事実は

$$\sum_{j=1}^k R'_{i,j} p_j^a = \sum_{j=1}^k R_{i,j} p_j^a + \sum_{j=1}^k \frac{R_{i,k+1}R_{k+1,j} p_j^a}{\sum_{l=1}^k R_{l,k+1}} = (p_i^a - R_{i,k+1} p_{k+1}^a) + \frac{R_{i,k+1}(p_{k+1}^a - R_{k+1,k+1} p_{k+1}^a)}{1 - R_{k+1,k+1}} = p_i^a \quad (10.11)$$

という計算から確認できる。同様に  $\mathbf{p}^b$  も  $R'$  の定常分布である。しかし  $R'$  は定常分布をただ一つしか持たないので、 $\mathbf{p}^{a'} = c\mathbf{p}^{b'}$  ( $c$  は定数) である。これにより  $\mathbf{p}^a = c\mathbf{p}^b$  が示せる。

<sup>140</sup> 固有値 1 を持つことは、横ベクトル  $(1, \dots, 1)$  が固有値 1 の左固有ベクトルであることから確認できる。別の実固有値  $\lambda'$  が 1 を上回るとして矛盾を導く。以下では、 $|\mathbf{v}|$  で、ベクトル  $\mathbf{v}$  のノルムではなく、 $(|v_1|, \dots, |v_n|)^T$  という、各ベクトル成分の絶対値をとったベクトルを表すことにする。 $\lambda'$  に対応する固有ベクトル  $\mathbf{v}'$  について、 $|\lambda'|^n |\mathbf{v}'| = |\lambda'^n \mathbf{v}'| = |A^n \mathbf{v}'| \leq A^n |\mathbf{v}'|$  となり、 $|\mathbf{v}'|$  を確率ベクトルになるようにとると、これは確率の規格化条件に矛盾。よって 1 を上回る固有値は存在しない。

<sup>141</sup> 対角成分は負でも構わない。

<sup>142</sup> この性質は「非周期性 (aperiodic)」などとも呼ばれる。

**定理 10.3** (収束定理 (Convergence theorem)).  $K \times K$  の確率行列  $R$  が強い連結性を満たすとする。このとき、任意の初期分布  $\mathbf{p}^0$  に対し、 $n$  ステップ後の確率分布  $\mathbf{p}^n := R^n \mathbf{p}^0$  は無限ステップ後に定常分布  $\mathbf{p}^{\text{ss}}$  に収束する。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{p}^n = \mathbf{p}^{\text{ss}}. \quad (10.13)$$

**証明.** 部分ベクトル空間  $V_0 \subseteq \mathbb{R}^K$  として  $V_0 := \{\mathbf{v} \mid \sum_i v_i = 0\}$  を考える。もし  $\mathbf{v} \in V_0$  ならば、 $\sum_i (R\mathbf{v})_i = \sum_{i,j} R_{ij} v_j = \sum_j v_j = 0$  より  $R\mathbf{v} \in V_0$  が成り立つ。すなわち線形変換  $R$  は  $V_0$  を不変に保つ。

任意の初期分布  $\mathbf{p}^0$  は適当な  $\mathbf{v}^0 \in V_0$  を用いて  $\mathbf{p}^0 = \mathbf{p}^{\text{ss}} + \mathbf{v}^0$  と書くことが出来るので、収束定理を示すには任意の  $\mathbf{v} \in V_0$  に対し、 $R$  を無限回作用させると消えてしまう ( $\lim_{n \rightarrow \infty} R^n \mathbf{v} = \mathbf{0}$ ) ことを示せばよい。強い連結性より、 $R^m$  の全行列成分が正となるような  $m$  が存在する。 $\mu := \min_{i,j} (R^m)_{ij}$  を  $R^m$  の最小値としよう<sup>143</sup>。全行列成分が  $\mu$  である行列  $M$  ( $M_{ij} = \mu$ ) を用いて、行列  $S$  を

$$S := R^m - M. \quad (10.14)$$

と定義する。構成により、行列  $S$  の全成分は非負であり、また任意の  $j$  について  $\sum_i S_{ij} = 1 - K\mu < 1$  が成り立つ。さらに、任意の  $V_0$  の元  $\mathbf{v} \in V_0$  に対しては、 $M\mathbf{v} = \mathbf{0}$  より、 $\mathbf{v}$  への  $S$  の作用と  $R^m$  の作用は同一である。

$$S\mathbf{v} = R^m \mathbf{v} \quad (10.15)$$

これらの事実により、任意の  $\mathbf{v} \in V_0$  に対して  $R^m$  を作用させると、以下のように1-ノルムが真に減少することが言える。

$$|R^m \mathbf{v}|_1 = |S\mathbf{v}|_1 \leq \sum_{i,j} S_{ij} |v_j| = (1 - K\mu) |\mathbf{v}|_1. \quad (10.16)$$

これにより、求めたかった結果

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |(R^m)^n \mathbf{v}^0|_1 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} (1 - K\mu)^n |\mathbf{v}^0|_1 = 0, \quad (10.17)$$

を得る<sup>144</sup>。 □

ペロン・フロベニウスの定理を仮定すると、収束定理は以下のように理解することも出来る。必要ならば  $R$  を  $R^m$  に置き換えることにより、 $R$  のすべての行列成分が正として一般性を失わない。ペロン根  $\lambda_{\text{PF}} = \lambda_0 = 1$  に対応する固有ベクトルを  $\mathbf{x}_0$ 、その他の固有値と (一般化) 固有ベクトルを  $\lambda_i, \mathbf{x}_i$  とする。初期分布を  $\mathbf{v}^0 = \sum_i c_i \mathbf{x}_i$  と展開すると、固有ベクトルだけで空間が張れているのならば

$$\mathbf{v}^n = R^n \mathbf{v}^0 = \sum_i c_i R^n \mathbf{x}_i = \sum_i c_i \lambda_i^n \mathbf{x}_i \quad (10.18)$$

となるが、 $|\lambda_i| < 1$  ( $i \geq 1$ ) なので、 $i \geq 1$  においては  $c_i \lambda_i^n \mathbf{x}_i$  は  $n \rightarrow \infty$  極限でゼロになる。よって定常分布  $\mathbf{x}_0$  だけが残る。一般化固有ベクトルの場合はもう少し煩雑だが同様の議論で示せる<sup>145</sup>。

[10-1]. 式 (10.4) で時間発展が与えられる確率過程を考える。初期分布を  $p_A^0 = a$ 、 $p_B^0 = b$ 、 $p_C^0 = c$  とする。ただし  $a + b + c = 1$  である。このとき、 $n$  を無限に大きくした状況、つまり十分時間がたった後の状況における確率分布  $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{p}^n$  を求めよ。

### 10.3 <補論> : ペロン・フロベニウスの理論

ここではペロン・フロベニウスの定理の証明を与えよう。行列についての定理だが、この定理はこれまで見たような (エルミートや対角化可能などの) 条件ではなく「行列成分の非負性」という一風変わった条件

<sup>143</sup> 確率行列の規格化条件により、 $\mu < 1/K$  が成り立つ。

<sup>144</sup> ノルムの独立性 (定義 5.1) より、ノルムがゼロとなるベクトルはゼロベクトル  $\mathbf{0}$  のみである。

<sup>145</sup> ジョルダンブロックは対角行列  $D = \lambda I$  とべき零行列  $Z$  を用いて  $D + Z$  と書ける。この  $N$  乗は  $(D + Z)^N$  だが、 $Z$  は行列サイズ  $K$  以上のべき乗でゼロになるので、結局ゼロでない寄与を持つ項においては、少なくとも  $N - K$  回は  $D = \lambda I$  がかかっている。なので ( $Z, D$  の選び方の場合の数まで考慮すると) おおよそ  $N^K \lambda^N$  程度の大きさになり、 $|\lambda| < 1$  ならば  $N \rightarrow \infty$  においてはこれはゼロに収束する。

の下で成り立つ定理である。証明の仕方もこれまでの定理とはずいぶん異なる手法を用いる<sup>146</sup>。  
まず定理を再掲する。

**定理 10.2** (ペロン・フロベニウスの定理 (Perron-Frobenius theorem)).  $A$  は実行列で、連結性を満たし、非対角成分はすべて非負 ( $i \neq j$  なら  $A_{ij} \geq 0$ ) であるとする<sup>147</sup>。このとき、「ペロン根 (Perron root)」と呼ばれる  $A$  の固有値  $\lambda_{PF}$  が存在し、以下を満たす。

1.  $\lambda_{PF}$  は実数であり、対応する固有ベクトルはすべてのベクトル成分が正の実数にとれる。
2.  $\lambda_{PF}$  は縮退していない。
3. 他の任意の固有値  $\lambda$  について、 $\operatorname{Re}\lambda < \lambda_{PF}$ 。特に  $A$  の全成分が正のとき、 $|\lambda| < \lambda_{PF}$ 。
4.  $\lambda_{PF}$  以外の固有値に対応する固有ベクトルで、すべてのベクトル成分が正の実数となるものは存在しない。

証明する際に重要となる性質は、連結性を満たし非対角成分がすべて非負な実行列  $A$  について、適切な  $c > 0$  と  $n$  を用いて定義される行列

$$\tilde{A} := (I + cA)^n \quad (10.19)$$

は、すべての行列成分が正とできるということである。また  $A$  と  $\tilde{A}$  は同じ固有ベクトルを持ち、対応する固有値は  $\lambda$  と  $(1+c\lambda)^n$  の関係で結ばれる。この対応関係により、「正行列 (すべての行列成分が正の行列)」というより取り扱いやすい行列を解析することで、非対角成分が非負の行列  $A$  の性質が導ける。

**命題 1 の証明**. 集合  $S(A)$  を

$$Ax \geq mx \quad (10.20)$$

を満たす非負ベクトル  $x \geq 0$  が存在するような  $m$  の集合とする。  $S(A)$  の最大値を  $M_A$  とする<sup>148</sup>。我々は、 $M_A$  が求めたい実固有値  $\lambda_{PF}$  であることを示す。 $M_A$  が実固有値ならそれがペロン根  $\lambda_{PF}$  であることは明らかなので、以下では  $M_A$  が固有値であることを示す。

以下  $M_{\tilde{A}}$  が  $\tilde{A}$  の実固有値であることを背理法で示す。 $M_{\tilde{A}}$  が  $\tilde{A}$  の固有値でないとすると、非負ベクトル  $x \geq 0$  で

$$\tilde{A}x \geq M_{\tilde{A}}x \quad (10.21)$$

であり、少なくとも一つのベクトル成分  $i$  で

$$(\tilde{A}x)_i > M_{\tilde{A}}x_i \quad (10.22)$$

が成り立つものが存在する。しかしそうすると、 $\varepsilon > 0$  を用いた  $x' := x + \varepsilon e_i$  ( $e_i$  は  $i$  方向の単位ベクトル) というベクトルを考えると、 $i$  以外の成分  $j (\neq i)$  について

$$(\tilde{A}x')_j > (\tilde{A}x)_j \geq M_{\tilde{A}}x_j = M_{\tilde{A}}x'_j \quad (10.23)$$

が成り立ち、また  $i$  成分についても  $\varepsilon$  を十分小さくとれば

$$(\tilde{A}x')_i = (\tilde{A}x)_i + \varepsilon(\tilde{A}e_i)_i > M_{\tilde{A}}(x_i + \varepsilon) = M_{\tilde{A}}x'_i \quad (10.24)$$

が成り立つように出来る<sup>149</sup>。よって、すべてのベクトル成分について  $\tilde{A}x'$  の方が  $M_{\tilde{A}}x'$  よりも大きいので、

<sup>146</sup>ここでの証明は、ラックス『線形代数』、田崎晴明『数学 物理を学び楽しむために』(オンライン公開)などに基づく。山本哲郎『行列解析の基礎』には、ここで示したのとは異なる方針の証明が出ている。

<sup>147</sup>対角成分は負でも構わない。

<sup>148</sup>本当は最大値が存在するかは自明でないで、きちんと示す必要がある。最大値が存在することは以下のように示せる。

ノルムが 1 に規格化された  $n$  次元球の球面  $B$  を考える。 $B$  はコンパクトである。 $A$  の固有ベクトルたちは、適当にノルムを調整することで  $B$  の元にとれる。各  $v \in B$  について、 $c(v) := \arg \max_a [Av \geq av]$  を定義する。 $v(v)$  は  $B$  上連続関数である。コンパクト空間上の連続関数は最大値を持つ。これは  $M_A$  である。

<sup>149</sup> $(\tilde{A}e_i)_i \geq M_{\tilde{A}}$  のときは任意の  $\varepsilon$  が条件を満たすので、 $(\tilde{A}e_i)_i < M_{\tilde{A}}$  の場合を考えれば十分である。このときは、 $\varepsilon < ((\tilde{A}x)_i - M_{\tilde{A}}x_i) / (M_{\tilde{A}} - (\tilde{A}e_i)_i)$  と置けばよい。

$M_{\tilde{A}}$  をそれよりもわずかに大きい  $M'_{\tilde{A}} > M_{\tilde{A}}$  に置き換えても

$$\tilde{A}\mathbf{x}' \geq M'_{\tilde{A}}\mathbf{x}' \quad (10.25)$$

が成り立つ。しかしこれは  $M'_{\tilde{A}} \in S(\tilde{A})$  を意味し、 $M_{\tilde{A}}$  が  $S(\tilde{A})$  の最大値であることに矛盾。よって仮定が誤りで、ある  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$  の下で

$$\tilde{A}\mathbf{x} = M_{\tilde{A}}\mathbf{x} \quad (10.26)$$

が成り立つ。つまり  $\tilde{\lambda}_{\text{PF}} = M_{\tilde{A}}$  は  $\tilde{A}$  の実固有値である。

$M_{\tilde{A}}$  の固有ベクトル  $\mathbf{x}$  のすべての成分が正（ゼロ成分を持たない）ことは、式 (10.26) 右辺のすべてのベクトル成分が正であることから直ちに従う。

最後に  $\tilde{A}$  の性質を  $A$  の性質と結び付けよう。

$M_A$  の定義より  $A\mathbf{x}^A \geq M_A\mathbf{x}^A$  となる  $\mathbf{x}^A$  が存在するが、これを用いて  $\tilde{A}\mathbf{x}^A = (I + cA)^n\mathbf{x}^A \geq (1 + cM_A)^n\mathbf{x}^A$  が導ける。よって  $(1 + cM_A)^n \leq M_{\tilde{A}}$  である。

一方、連続区間の実数  $c$  に対し  $\mathbf{x}$  は  $\tilde{A} = (I + cA)^n$  の固有ベクトルなので、 $\mathbf{x}$  は  $A$  の固有ベクトルでもある<sup>150</sup>。特に  $A$  における固有値は  $\frac{1}{c}\sqrt[n]{M_{\tilde{A}}} - 1$  であり、 $A\mathbf{x} \geq (\frac{1}{c}\sqrt[n]{M_{\tilde{A}}} - 1)\mathbf{x}$  を満たす。よって  $M_A \geq \frac{1}{c}\sqrt[n]{M_{\tilde{A}}} - 1$ 、すなわち  $(1 + cM_A)^n \geq M_{\tilde{A}}$  である。

以上より、 $(1 + cM_A)^n = M_{\tilde{A}}$  が言え、 $A$  も共通の全成分が正の固有ベクトル  $\mathbf{x}$  を持つ。よって命題 1 が示された。□

**命題 2 の証明。** まず複数の固有ベクトルを持たないことを示し、その後一般化固有ベクトルも持たないことを示す。1 の証明の場合と同様に、正行列  $\tilde{A}$  について示せば十分である。

主張に反し、線形独立な固有ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  を固有値  $M_{\tilde{A}}$  が持つと仮定する。つまり  $\tilde{A}\mathbf{x} = M_{\tilde{A}}\mathbf{x}$ 、 $\tilde{A}\mathbf{y} = M_{\tilde{A}}\mathbf{y}$  が成り立つとする。このとき、 $\mathbf{z} = \mathbf{x} + a\mathbf{y}$  もまた  $\tilde{A}$  の固有値  $M_{\tilde{A}}$  の固有ベクトルである。だが、適切に係数  $a$  を選ぶと、 $\mathbf{z}$  のいくつかのベクトル成分は 0、残りの有限個のベクトル成分は正にすることができる。しかしこれは、 $M_{\tilde{A}}$  の固有ベクトルで  $\geq \mathbf{0}$  を満たすものはゼロ成分を持たないという、既に証明した 1 の事実と矛盾する。よって仮定が誤りであり、線形独立な固有ベクトルは存在しない。

次に一般化固有ベクトルを持たないことを示す（以下、2.3 節に記した一般化固有ベクトルの性質は前提とする）。 $A$  が一般化固有ベクトルを持てば  $\tilde{A}$  も一般化固有ベクトルを持つので、 $\tilde{A}$  が一般化固有ベクトルを持たないことを示せば十分である。

主張に反し、 $\tilde{A}$  の固有値  $M_{\tilde{A}}$  は固有ベクトル  $\mathbf{x}$  とともに二階の一般化固有ベクトル  $\mathbf{y}$  を持つとする。 $\mathbf{y}$  が二階の一般化固有ベクトルであるということは

$$\tilde{A}\mathbf{y} = M_{\tilde{A}}\mathbf{y} + t\mathbf{x} \quad (10.27)$$

が成り立つということである。必要ならば  $-\mathbf{y}$  を  $\mathbf{y}$  と置き直すことにより、 $t > 0$  として一般性を失わない。さらに必要ならば  $\mathbf{y} + k\mathbf{x}$  を  $\mathbf{y}$  と置き直す<sup>151</sup> ことにより、 $\mathbf{y} > \mathbf{0}$  として一般性を失わない。しかし式 (10.27) は、 $t\mathbf{x} > \varepsilon\mathbf{y}$  を満たす  $\varepsilon > 0$ （このような  $\varepsilon$  は必ず存在する）について、 $(M_{\tilde{A}} + \varepsilon) \in S(\tilde{A})$  であることを示しており、これは  $M_{\tilde{A}}$  の最大性に矛盾する。よって仮定が誤りで、 $\tilde{A}$  は一般化固有ベクトルを持たない。□

**命題 3 の証明。** まず正行列  $\tilde{A}$  の場合を扱う。 $\tilde{A}$  の  $M_{\tilde{A}}$  以外の固有値  $\lambda$  と、対応する固有ベクトル  $\mathbf{v}$  を考える<sup>152</sup>。固有値方程式  $\tilde{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$  について、各成分の絶対値をとる。すると  $i$  成分目の関係式として

$$|\lambda||v_i| = |\lambda v_i| = \left| \sum_j \tilde{A}_{ij}v_j \right| \leq \sum_j \tilde{A}_{ij}|v_j| \quad (10.28)$$

<sup>150</sup> 特定の  $c$  だけであれば、 $A$  の固有ベクトルではないベクトルが  $(I + cA)^n$  の固有ベクトルとなる可能性もあるが、連続的な  $c$  で固有ベクトルとなるのならば、それは  $A$  の固有ベクトルである。

<sup>151</sup> ある階数の一般化固有ベクトルに、それより低階の一般化固有ベクトルを加えても、元の階数の一般化固有ベクトルのままである。また、この置き換えにより  $t$  の値は変化しない。

<sup>152</sup> これらは一般に複素である。

が得られる。よって  $\mathbf{v}' := \begin{pmatrix} |v_1| \\ \vdots \\ |v_n| \end{pmatrix}$  と置くと、上式は  $\tilde{A}\mathbf{v}' \geq |\lambda|\mathbf{v}'$  と書ける。これは  $|\lambda| \in S(\tilde{A})$  を意味して

おり、よって  $M_{\tilde{A}} \geq |\lambda|$  が得られる。この不等式の等号が成り立たないことを示そう。主張に反し  $M_{\tilde{A}} = |\lambda|$  と仮定すると、 $\mathbf{v}'$  は  $\tilde{A}$  の固有ベクトルとなる必要があるので、式 (10.28) の不等式が全て等号達成する必要がある。これが実現するのは、 $v_i$  たちの偏角が全て同じ場合であるが、このとき  $\mathbf{v}$  は  $\mathbf{x}$  の  $e^{i\theta}$  倍であり、 $\lambda = M_{\tilde{A}}$  となる。これは  $\lambda$  は  $M_{\tilde{A}}$  と異なる固有値を選んだという設定に反する。よって仮定が誤りであり、等号は成り立たず、 $M_{\tilde{A}} > |\lambda|$  である。

次に非対角成分が非負の行列  $A$  の場合を扱う。 $A$  の  $M_A$  以外の固有値  $\eta$  と、対応する固有ベクトル  $\mathbf{u}$  を考える。正行列の場合の結果により、

$$|1 + c\eta| < 1 + cM_A \quad (10.29)$$

である<sup>153</sup>。一方、左辺は

$$|1 + c\eta| > \operatorname{Re}[1 + c\eta] = 1 + c\operatorname{Re}\eta \quad (10.30)$$

と評価できる。よって欲しかった不等式  $M_A > \operatorname{Re}\eta$  を得る。□

**命題 4 の証明.**  $\tilde{A}$  を転置した  $\tilde{A}^\top$  もまたペロン・フロベニウスの定理の仮定をすべて満たしていることに注意する。 $\tilde{A}^\top$  の固有ベクトルは  $\tilde{A}$  の左固有ベクトルである。そのため、 $\tilde{A}$  の固有値  $M_{\tilde{A}}$  の左固有ベクトル  $\mathbf{w}$  は、すべてのベクトル成分が正である。

$\tilde{A}$  が、固有値  $\lambda$  の固有ベクトル  $\mathbf{v}$  を持つとする。すると、 $\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}$  は、異なる固有値に属する左右の固有ベクトル同士の積なので、定理 2.1 により、この値はゼロとならないといけない。しかし、 $\mathbf{w}$  はすべての成分が正なので、 $\mathbf{v}$  もすべての成分が正だとすると、 $\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}$  は正の値となり、ゼロにならず矛盾。よって、すべてのベクトル成分が正であるような固有ベクトルは  $\mathbf{x}$  以外には存在しない。□

---

<sup>153</sup> $|a^n| = |a|^n$  なので、 $n$  乗は外した。

## 11 母関数の方法

### 11.1 モーメントとキュムラント

確率変数  $X$  に対する、モーメントとキュムラントを導入しよう。ただし以下で、山カッコは  $X$  についての平均を表す ( $\langle F(X) \rangle := \int dX P(X) F(X)$ 。ただし  $P(X)$  は  $X$  の確率分布)。

**定義 11.1** (モーメント (Moment)).  $X$  の  $n$  次モーメント  $M_n$  を以下で定義する。

$$M_n := \langle X^n \rangle \quad (11.1)$$

**定義 11.2** (キュムラント (Cumulant)).  $X$  の  $n$  次キュムラント  $C_n$  を以下の手続きで定義する。補助変数  $s$  を持つ量  $\ln \langle e^{sX} \rangle$  を考え、これを  $s$  についてテイラー展開する。

$$\ln \langle e^{sX} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n}{n!} s^n. \quad (11.2)$$

右辺の  $C_n$  を  $X$  の  $n$  次キュムラントと定義する。

キュムラントの定義はいささか込み入っており、なぜこのような量を定義したいのか、今の時点ではよく分からないかもしれないが、これが便利なのは後に明らかになる。ひとまず係数比較をすることで、1 次のキュムラントは平均と一致、2 次のキュムラントは分散と一致することが確認できる。また、(平均がゼロとは限らない) 一般のガウス分布において、3 次以上のキュムラントはすべてゼロである。

[11-1]. (平均がゼロとは限らない) ガウス分布の 3 次以上のキュムラントがゼロであることを示せ。

モーメントとキュムラントの結びつきをいくつか列挙する<sup>154</sup>。

$$C_1 = M_1, \quad (11.3)$$

$$C_2 = M_2 - M_1^2, \quad (11.4)$$

$$C_3 = M_3 - 3M_1M_2 + 2M_1^3, \quad (11.5)$$

$$C_4 = M_4 - 4M_3M_1 - 3M_2^2 + 12M_2M_1^2 - 6M_1^4, \quad (11.6)$$

⋮

### 11.2 母関数

**定義 11.3** (母関数 (generating function)). 数列  $\{a_n\}_{n=1}$  に対し、この数列の「母関数」あるいは「生成関数」とは、以下のような関数を指す<sup>155</sup>。

$$f(t) := \sum_n a_n t^n, \quad g(t) := \sum_n \frac{a_n}{n!} t^n \quad (11.7)$$

<sup>154</sup>分布の高次の特徴量もいくつか定義されている。平均から見た分布の非対称度を「歪度 (skewness)」といい、平均  $M_1$  と分散  $C_2$  を用いて  $\langle (X - M_1)^3 \rangle / C_2^{3/2} = C_3 / C_2^{3/2}$  で定義される。ガウス分布と比較した分布の鋭さの度合いを「尖度 (kurtosis)」といい、 $\langle (X - M_1)^4 \rangle / C_2^2 - 3 = C_4 / C_2^2 - 3$  または  $\langle (X - M_1)^4 \rangle / C_2^2 = C_4 / C_2^2$  で定義される (前者はガウス分布の尖度をゼロと規格化する定義の流儀)。



どちらを用いるかは場合によるが、両者にはそんなに大きな違いはない。母関数を用いると、 $m$  番目の数列の値は

$$a_m = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^m}{dt^m} f(t) \right|_{t=0} = \left. \frac{d^m}{dt^m} g(t) \right|_{t=0} \quad (11.8)$$

と簡単に求められる。

母関数は数列  $a_n$  の情報をすべて持っているので、数列を求める代わりに母関数を求めてもよい。関数は微積分を実行したり代入して係数比較したりなど、離散的な数列よりも処理しやすいことも多い。この講義で扱うような確率計算以外にも、場合の数をカウントする組合せ論などでも幅広い応用がなされている<sup>156</sup>。

特に指数型母関数で、 $a_n$  としてキュムラント  $C_n$  を選んだものは「キュムラント母関数」あるいは「キュムラント生成関数」と呼ばれる。キュムラントの定義と比較することにより

$$g(t) = \ln \langle e^{Xt} \rangle \quad (11.12)$$

が成り立つ<sup>157</sup>。我々の関心が、熱力学極限をとるマクロ系の物理量や、長時間極限をとった確率過程における時間積算量など、 $X$  がパラメータ  $N$  に対して比例して大きくなる量の  $N \rightarrow \infty$  の挙動である場合は多い。このときには、 $x := X/N$  に対する以下の「スケールされたキュムラント母関数」を議論することも多い。

**定義 11.4** (スケールされたキュムラント母関数 (scaled cumulant generating function)).  $x = X/N$  の「スケールされたキュムラント母関数」は以下で定義される。

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{kX} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{kNx} \rangle \quad (11.13)$$

$X$  の分散は  $N$  に比例して増加し、 $x$  の分散は  $1/N$  の速さでゼロに収束する。非自明な分散の挙動を見たいならば、 $X$  の分散なら  $N$  で割る、 $x$  の分散なら  $N$  を掛ける必要がある。スケールされたキュムラント母関数の二階微分で得られる量は、ちょうど上記の処理を行って  $O(1)$  にした分散であり、特別な処理なく  $x$  の分布の非自明な要素を拾い出せる。

### 11.3 計数場の方法

確率過程で定義される量のキュムラント母関数を計算する手法である「計数場 (counting field) の方法」を見よう。例えば、ある確率過程における「状態  $\beta$  から状態  $\alpha$  への経験カレント (「 $\beta \rightarrow \alpha$  のジャンプの回数」 - 「 $\alpha \rightarrow \beta$  のジャンプの回数」) を確率変数  $X$  とし、我々は長時間 ( $N \rightarrow \infty$ ) の下での  $X$  のスケールされたキュムラント ( $N$  で割った分散など) を知りたいとしよう。この場合には、確率過程を与える確率行列  $R$  と補助変数  $k$  を用いて、以下のように「生成行列 (generator matrix)」 $W$  を定義すると、キュ

<sup>155</sup>呼び分けたいときは、 $f(t)$  を「通常型母関数」、 $g(t)$  を「指数型母関数」という。また、ほかのタイプの母関数が定義される場合もある。

<sup>156</sup>具体例を一つ挙げよう。自然数  $n$  を「互いに異なる自然数たちの和で表す方法の場合の数  $a_n$ 」と「正の奇数の和で表す方法の場合の数  $b_n$ 」は一致することが知られている (オイラーの分割恒等式)。これをオイラーは母関数の方法で証明した。前者の母関数は

$$f_a(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^n = \prod_{m=1}^{\infty} (1 + x^m) \quad (11.9)$$

である。一方、後者の母関数は

$$f_b(x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} b_n x^n = \prod_{m=1}^{\infty} \left( \sum_{k=0}^{\infty} x^{k(2m-1)} \right) = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{1 - x^{2m-1}} \quad (11.10)$$

である。両関数が一致することを言えばいいが、これは

$$f_a(x) = \prod_{m=1}^{\infty} (1 + x^m) = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1 - x^{2m}}{1 - x^m} = \frac{\prod_{m=1}^{\infty} (1 - x^{2m})}{\prod_{m'=1}^{\infty} (1 - x^{m'})} = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{1 - x^{2m-1}} = f_b(x) \quad (11.11)$$

と示せる。他の組合せ論における母関数の利用例は、例えばヴァン・リント、ウィルソン『組合せ論上』(丸善出版)などで見れる。

<sup>157</sup>指数の肩に虚数  $i$  を付けた  $\ln \langle e^{iXt} \rangle$  をキュムラント母関数と呼ぶこともある。対数の中身  $\langle e^{iXt} \rangle$  は「特性関数 (characteristic function)」と呼ばれるもので、これは確率密度関数のフーリエ変換なので確率論ではよく用いられる。

ムラントがうまく計算できる。

$$W_{ij} = \begin{cases} R_{ij}e^k & i = \alpha \text{ かつ } j = \beta, \\ R_{ij}e^{-k} & i = \beta \text{ かつ } j = \alpha, \\ R_{ij} & \text{その他} \end{cases} \quad (11.14)$$

ここで  $k$  は「計数場 (counting field)」と呼ばれ、 $\beta\alpha$  間のジャンプの回数を数える役割を果たす。我々が測りたい物理量に依存して、 $W$  の形は適切に定められる。

この確率過程における  $n$  ステップ目の状態を  $w^n$ 、全  $N$  ステップにまたがる軌道を  $\Gamma = w^0 \rightarrow w^1 \rightarrow w^2 \rightarrow \dots \rightarrow w^N$  と書くことにする。この軌道が観測される確率を  $P(\Gamma)$  とすると、 $P(\Gamma)$  は

$$P(\Gamma) = R_{w^N w^{N-1}} R_{w^{N-1} w^{N-2}} \cdots R_{w^2 w^1} R_{w^1 w^0} p_{w^0}^0. \quad (11.15)$$

で与えられる。 $n_{j \rightarrow i}(\Gamma)$  を軌道  $\Gamma$  中の状態  $j$  から  $i$  へのジャンプの総数とすると、我々の関心の対象である  $\beta\alpha$  間の経験カレント  $J$  は  $J(\Gamma) = n_{\beta \rightarrow \alpha}(\Gamma) - n_{\alpha \rightarrow \beta}(\Gamma)$  と書ける。式 (11.15) 右辺の  $R$  を  $W$  に置き換えた量を考えると、これは構成より

$$W_{w^N w^{N-1}} W_{w^{N-1} w^{N-2}} \cdots W_{w^2 w^1} W_{w^1 w^0} p_{w^0}^0 = e^{kJ(\Gamma)} P(\Gamma), \quad (11.16)$$

を満たす。そのため横ベクトル  $\mathbf{1} := (1 \ 1 \ \dots \ 1)$  を用いることで、キュムラント母関数の対数の中身 ( $e^{kJ}$ ) を以下のように計算することができる。

$$\langle e^{kJ} \rangle = \sum_{\Gamma} e^{qJ(\Gamma)} P(\Gamma) = \mathbf{1} W^N \mathbf{p}^0. \quad (11.17)$$

さて、ペロン・フロベニウスの定理により、 $W$  の最大実固有値  $\lambda_0$  は他の固有値の絶対値よりも真に大きい ( $\lambda_0 > |\lambda_i| \geq \dots$ )。よって、行列のべき乗の計算 (式 (2.38)) を思い出すことで、スケールされたキュムラント母関数は

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{kJ} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln (\mathbf{1} W^N \mathbf{p}^0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \sum_{i=0} a_i \lambda_i^N = \ln \lambda_0, \quad (11.18)$$

と  $W$  の最大固有値だけで書ける<sup>158</sup>。ただしここで  $a_i$  は  $W$  と  $\mathbf{p}^0$  には依存するが  $N$  にはよらない係数である<sup>159</sup>。以上より、スケールされた  $X$  の  $n$  次キュムラントは

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} C_n = \left. \frac{\partial^n}{\partial k^n} \ln \lambda_0 \right|_{k=0} \quad (11.19)$$

と計算することができる。

具体的問題の一つを考えてみよう。図 21 のような、山と谷を繰り返す周期ポテンシャル中のランダムウォークする粒子を考える。隣り合う山と谷の間の距離を 1 とする。粒子は右向きの外力を受けており、そのため平均すると左から右へと進む。山の上に粒子がいるときに、右及び左に進んで粒子が谷に落ちる確率を  $a$  と  $b$ 、谷底に粒子がいるときに、右及び左に進んで粒子が山を登る確率を  $c$  と  $d$  とする (図 21)。すると、この系は実質的に (山及び谷の) 二状態の確率過程とみなすことができる。以下、山にいる確率を  $p_1$ 、谷にいる確率を  $p_2$  と書く。すると対応する確率行列は

$$R = \begin{pmatrix} 1 - a - b & c + d \\ a + b & 1 - c - d \end{pmatrix} \quad (11.20)$$

<sup>158</sup>  $W$  が対角化できず一般化固有ベクトルを持つ場合が気になるかもしれないが、これは問題ない。なぜなら、ジョルダン標準形にすれば「対角行列+べき零行列」の形に出来るが、べき零行列は行列サイズ以上のべきがかかると消えてしまうので、ジョルダン標準形の無限べきは実質的に対角成分で支配されるからである。脚注 145 の議論も参照。

<sup>159</sup>  $W = A^{-1} \text{diag}(\lambda_0, \lambda_1, \dots) A$  と対角化 (あるいはジョルダン標準化) がされるとすると、 $a_i = (\mathbf{1} A^{-1})_i (A \mathbf{p}^0)_i$  である。

である。ただし、 $a$ と $b$ 、 $c$ と $d$ 、どちらで遷移したかに応じて右に進んだか左に進んだかが変わる点に注意しておく。

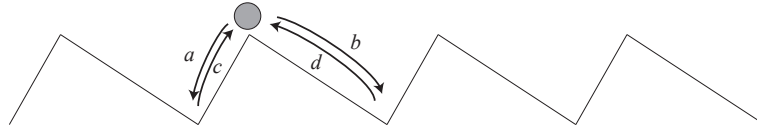


図 21: 山と谷を繰り返す周期ポテンシャル中のランダムウォーク。

**問題:**  $N$  ステップ後の、初期位置から見た右への移動距離を  $L$  とする。平均速度は  $V = L/N$  である。 $N \rightarrow \infty$  における、速度  $V$  の平均とスケールされた分散を求めよ。

平均速度  $\langle V \rangle$  は、定常分布が求まれば  $\langle V \rangle = (b-a)p_1^{\text{ss}} + (c-d)p_2^{\text{ss}}$  と直接的に求められる（そして定常分布は  $p_1^{\text{ss}} = (c+d)/(a+b+c+d)$ 、 $p_2^{\text{ss}} = (a+b)/(a+b+c+d)$  と簡単に解ける）。一方、スケールされた分散を求めるのは一筋縄ではいかない。分散を求めるには、スケールされたキュムラント母関数を用いるのが最も簡便である。

移動距離は、 $a, c$  に沿って動くと  $+1$ 、 $b, d$  に沿って動くと  $-1$  なので、生成行列  $W$  は

$$W = \begin{pmatrix} 1-a-b & ce^k + de^{-k} \\ ae^{-k} + be^k & 1-c-d \end{pmatrix} \quad (11.21)$$

である。対応する固有値は

$$\lambda_{\pm} = 1 - \frac{a+b+c+d}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(ae^{-k} + be^k)(ce^k + de^{-k})} \quad (11.22)$$

である。よってスケールされたキュムラント母関数は

$$q(k) = \ln \lambda_+ = \ln \left( 1 - \frac{a+b+c+d}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(ae^{-k} + be^k)(ce^k + de^{-k})} \right) \quad (11.23)$$

と求まる。分散までの計算ならば、 $k$  の 2 次までの展開で十分である。 $k$  の 2 次まででこのルートの中身は

$$\begin{aligned} & \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4(ae^{-k} + be^k)(ce^k + de^{-k})} \\ & \simeq \sqrt{(a+b-c-d)^2 + 4 \left( (a+b) \left( 1 + \frac{k^2}{2} \right) + (b-a)k \right) \left( (c+d) \left( 1 + \frac{k^2}{2} \right) + (c-d)k \right)} \\ & = \sqrt{(a+b+c+d)^2 + 8(bc-ad)k + 4(bc+ad)k^2} \\ & \simeq (a+b+c+d) \left( 1 + \frac{4(bc-ad)k + 2(bc+ad)k^2}{(a+b+c+d)^2} - 16 \left( \frac{(bc-ad)k}{(a+b+c+d)^2} \right)^2 \right) \end{aligned} \quad (11.24)$$

と計算できる。よって  $V$  の平均とスケールされた分散はそれぞれ

$$\langle V \rangle = \left. \frac{dq(k)}{dk} \right|_{k=0} = \frac{2(bc-ad)}{a+b+c+d} \quad (11.25)$$

$$N \langle V^2 \rangle = \left. \frac{d^2q(k)}{dk^2} \right|_{k=0} = \frac{2(bc+ad)}{a+b+c+d} - \frac{16(bc-ad)^2}{(a+b+c+d)^3} - \frac{4(bc-ad)^2}{(a+b+c+d)^2} \quad (11.26)$$

と求められる。

**[11-2].** 同じランダムウォークの系で、ステップ終了時に山の上にいるステップ数を  $N_+$  とする。山の上に粒子がいるステップ数の割合  $n := N_+/N$  に対するスケールされたキュムラント母関数を求めよ。

## 11.4 ルジャンドル変換

後の準備として、ある関数から別の関数を構成する手続きである「ルジャンドル変換」を見よう<sup>160 161</sup>。

**定義 11.5** (ルジャンドル変換 (Legendre transformation)). 関数  $f(x)$  に対するルジャンドル変換は、

$$g(a) := \sup_x [ax - f(x)] \quad (11.27)$$

で定義される<sup>162</sup>。

特に  $f(x)$  が下に狭義凸で微分可能な関数の場合、

$$g(a) = ax^* - f(x^*), \quad \text{ただし } x^* \text{ は } f'(x^*) = a \text{ の解} \quad (11.28)$$

とも書ける。

ルジャンドルの意味は図 22 を見るとわかりやすい。  $ax - f(x)$  は、  $y = ax$  と  $y = f(x)$  との間の  $y$  方向の距離を表している。  $f(x)$  が下に凸な場合、これが最大化されるのは  $f(x)$  の傾きがちょうど  $a$  になる点である<sup>163</sup>。

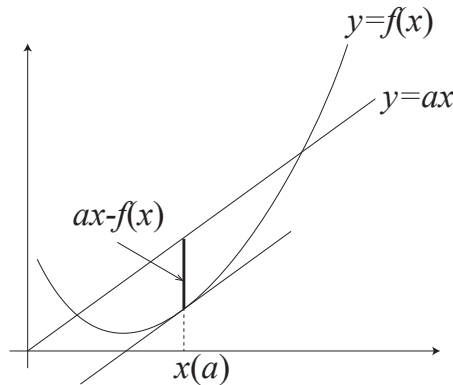


図 22: ルジャンドル変換のイメージ図。  $y = ax$  と  $y = f(x)$  の間の距離 (太線部) の最大値が  $f(x)$  のルジャンドル変換  $g(a)$  である。

元の関数  $f(x)$  が下に凸でない場合、ルジャンドル変換して得られる関数  $g(a)$  は、  $f(x)$  の凸包をとった関数  $\bar{f}(x)$  に対するルジャンドル変換の結果と一致する (図 23)。要するに、  $f(x)$  の情報のうち凸包の内側に関するものは、ルジャンドル変換で失われてしまう。一方、元の  $f(x)$  が下に凸な関数の場合、ルジャンドル変換して得られた関数  $g(a)$  に再びルジャンドル変換を施すと、再び同じ関数  $f(x)$  が得られる。

**定理 11.1.**  $f(x)$  を下に凸な関数とする。このとき、  $f(x)$  のルジャンドル変換  $g(a)$  を再度ルジャンドル変換すると、  $f(x)$  が得られる。

$$f(x) = \sup_a [ax - g(a)] \quad (11.29)$$

<sup>160</sup>物理学者向けのルジャンドル変換の解説のある教科書としては、アーノルド『古典力学の数学的方法』岩波書店、田崎晴明『熱力学』『統計力学 II』培風館、清水明『熱力学の基礎』東京大学出版会などがある。

<sup>161</sup>ルジャンドル変換については、5.3 節のヤングの不等式のところで少し (口頭で) 解説した。

<sup>162</sup>文献や分野によっては  $-1$  倍したものでルジャンドル変換を定義することもある。特に熱力学・統計力学では逆符号のルジャンドル変換が用いられることが多い。

<sup>163</sup>厳密には、左右の微分を  $f'_\pm$  で書いたとき、  $f'_-(x) \leq x \leq f'_+(x)$  となるような  $x$  のことである。ただし  $x$  は複数ある可能性がある。

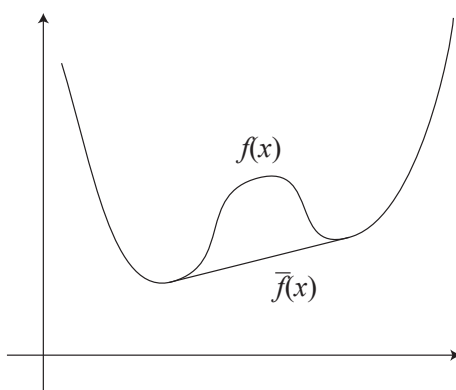


図 23: 非凸な関数  $f(x)$  に対するルジャンドル変換を考えた場合、 $f(x)$  の凸包  $\bar{f}(x)$  のルジャンドル変換と一致するので、凸法の内部の情報は失われる。

証明. 解析的に示すことも出来る<sup>164</sup> が、ここでは直観的に分かりやすい図形的な証明を与える。定数項と原点を適宜動かすことで、 $f(0) = 0$ 、 $f'(0) = 0$  として一般性を失わない<sup>165</sup>。

このとき、 $y = f'(x)$  のグラフを考える (図 24)。ただし微分できない点については、右微分と左微分の間の値を取りうるものとする。 $f$  の凸性より、 $f'$  は単調増大である。 $f(0) = 0$  なので、図 24 の薄い灰色の部分の面積が  $f(x)$  である。

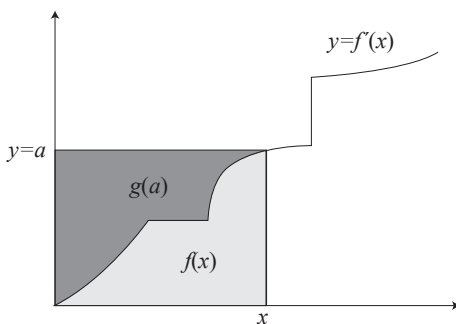


図 24:  $y = f'(x)$  のグラフにおいて、薄いグレーの面積が  $f(x)$  に、濃いグレーの面積が  $g(a)$  に対応する。

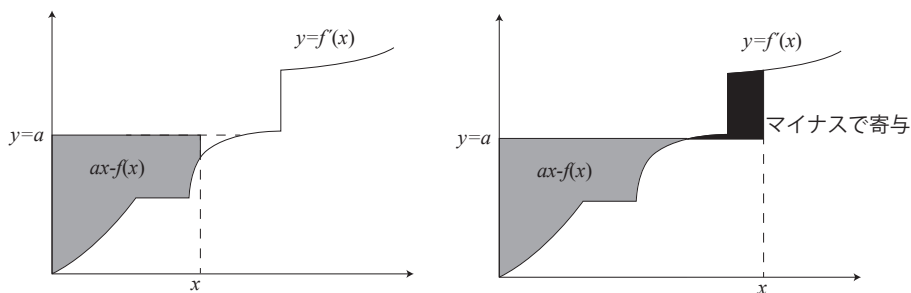


図 25:  $ax - f(x)$  が最大化される  $x$  の探し方。  $y = a$  と  $y = f'(x)$  がちょうど交差するような  $x$  をとるときが最大となる。黒の面積はマイナスで  $ax - f(x)$  に寄与する点に注意。

ルジャンドル変換で考える量  $ax - f(x)$  は、図 25 のように  $y = a$  の線を引いた際の、長方形の部分から  $y = f'(x)$  の部分を取り去った領域の面積 (濃いグレー) である。これが最大化されるのは、 $y = a$  と  $y = f'(x)$  が交差するような  $x$  を選んだ場合で、このとき  $g(a)$  は図 24 の濃いグレーの部分の面積に対応する。

<sup>164</sup> 解析的な証明を知りたい人は、例えば田崎晴明『熱力学』培風館などを見てほしい。

<sup>165</sup>  $f'(x) = 0$  となる点が存在しない場合は、左微分が 0 より小さく、右微分が 0 より大きい点が  $x = 0$  になるように選ぶものとする。

さてそうすると、 $x$  軸と  $y$  軸を入れ替えると、きれいに  $f(x)$  と  $g(a)(=g(y))$  の役割が入れ替わることが分かる。これは、 $g(a)$  をルジャンドル変換すれば  $f(x)$  に戻ることを意味している。□

[11-3].  $f(x) = -\ln x$  ( $0 < x$ ) をルジャンドル変換せよ。

### 11.5 大偏差性質

物理や数学、情報科学においては、何らかのパラメータ  $N$  (システムサイズや時間、サンプル数などが  $N$  に選ばれることが多い) が発散する極限において、 $N$  でスケールする量  $X$ 、あるいは値が  $O(1)$  になるように  $N$  で割ってスケールした量  $x := X/N$ 、の振る舞いを調べることが多い。例えば  $X$  が独立同分布からサンプルした量の経験平均である場合、 $x$  は  $N \rightarrow \infty$  の極限で分布の平均値に収束する。これが「大数の法則 (law of large numbers)」である。また、その分散は  $1/N$  の速さでゼロに収束する。これが「中心極限定理 (central limit theorem)」である。これに対し「大偏差理論 (large deviation theory)」は、より中心から離れたところまで含めて、分布の振る舞いを見ようとする<sup>166</sup>。

パラメータが  $N$  のときの  $x$  の分布を  $P_N(x)$  と書く。我々は特に、この分布が

$$P_N(x) \doteq e^{-NI(x)}, \quad (11.30)$$

という形をしている状況を考える。ただしここで上に点のついた等号「 $\doteq$ 」は、両辺に  $-\frac{1}{N} \ln$  を作用させて  $N \rightarrow \infty$  極限をとった際に、両辺が同じ値に収束することを意味している。 $x$  の分布  $P_N$  が式 (11.30) の形で書けるときの、この分布は「大偏差原理」を満たすという。

**定義 11.6** (大偏差原理 (large deviation principle)). 確率分布  $P_N(x)$  について、「レート関数 (rate function)」または「大偏差関数 (large deviation function)」と呼ばれる関数  $I(x)$  が存在し

$$\lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} \ln P_N(x) = I(x) \quad (11.31)$$

を任意の  $x$  で満たすとき、この分布は大偏差原理を満たす (あるいは「大偏差性質 (large deviation property)」を持つ) という<sup>167</sup>

レート関数とキュムラント母関数は、ルジャンドル変換を通じて結びつく。

**定理 11.2** (ガートナー・エリスの定理 (Gärtner-Ellis theorem)). 式 (11.13) で定義される、確率変数密度  $x$  に対するスケールされたキュムラント母関数  $q(k)$  が存在し、それが実数  $k \in \mathbb{R}$  全域で微分可能とする。このとき、 $x$  は大偏差原理を満たし、そのレート関数は以下のルジャンドル変換で与えられる。

$$I(x) = \sup_k [kx - q(k)]. \quad (11.33)$$

式 (11.33) に対する逆ルジャンドル変換を考えることにより、

$$q(k) = \sup_b [kb - I(b)]. \quad (11.34)$$

も得られる。

<sup>166</sup> この節の内容は、大偏差理論の物理学者向けのレビュー論文 H. Touchette, *The large deviation approach to statistical mechanics*, Phys. Rep. 478, 1 (2009) を参考にしている。

<sup>167</sup> 大偏差原理の数学的に厳密な定義は以下の通り。 $S$  を実数の部分集合とし、 $\bar{S}$  及び  $S^\circ$  を  $S$  の閉包及び内部とする。確率変数  $x$  が集合  $S$  に含まれる値をとる確率を  $P(S)$  と書く。このとき、分布  $P_N(x)$  は大偏差原理を満たすとは、関数  $I(x)$  が存在し、任意のボレル加法族の可測集合  $S$  について、

$$-\inf_{b \in S^\circ} I(x) \leq \liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln P_N(S) \leq \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln P_N(S) \leq -\inf_{b \in \bar{S}} I(x) \quad (11.32)$$

が成り立つことをいう。

以下では、 $x$ は大偏差原理を満たすことは仮定して、ガートナー・エリスの定理の後半部分の直観的な導出を与える<sup>168</sup>。 $x$ の分布が大偏差型で $P(x) \doteq e^{-NI(x)}$ と書けているとすると、(スケールさせていない)キウムラント母関数 $\ln \langle e^{Nkx} \rangle$ は

$$\ln \langle e^{Nkx} \rangle = \ln \int e^{Nkx} P(x) dx = \ln \int e^{N(kx-I(x))} dx + o(N) \quad (11.35)$$

と変形できる。ここで、我々は最終的に $N \rightarrow \infty$ の極限をとるので、右辺に対してラプラス近似を用いて

$$\ln \int e^{N(kx-I(x))} dx \simeq \ln(C \cdot e^{N(kx^*-I(x^*))}). \quad (11.36)$$

と評価できる。ここで $x^*$ は $kx - I(x)$ の最大点で、 $C$ は $x^*$ における $e^{N(kx-I(x))}$ の分布の幅である。一般に $C = O(N^{-1/2})$ である。よって

$$\ln \langle e^{Nkx} \rangle = \ln(C e^{N \sup_x [kx-I(x)]}) + o(N), \quad (11.37)$$

が得られるので、ここから欲しかった式(11.34)が導ける。

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{Nkx} \rangle = \sup_x [kx - I(x)] \quad (11.38)$$

一つの応用として、偏ったサイコロを振る問題を考えてみよう。

**問題**:  $1, 2, \dots, m$ の目が確率 $p_1, \dots, p_m$ で出るサイコロを $N$ 回振り、出目の経験分布 $q_1, \dots, q_m$ を測る。サイコロを多数回振れば、ほとんど確実に出目の経験分布 $\mathbf{q}$ は各目の出現確率 $\mathbf{p}$ に一致し、経験分布が出現確率と異なる確率は、 $N$ の指数関数 $e^{-aN}$ で減衰する。この指数減衰の速度 $a$ を求めよ。

$a$ はレート関数 $I(\mathbf{q})$ そのものなので、レート関数が求まればよい。直接計算でも求められるが、今回はガートナー・エリスの定理を利用することにしよう。補助変数は数ではなく $m$ 次元ベクトル $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_m)^\top$ にとる。確率変数である経験分布 $\mathbf{r}$ のスケールされたキウムラント母関数は

$$\eta(\mathbf{k}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{N\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rangle \quad (11.39)$$

である<sup>169</sup>。この右辺は( $N \rightarrow \infty$ 極限をとらなくても)

$$\frac{1}{N} \ln \langle e^{N\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{N} \ln \left( \sum_{i=1}^m p_i e^{k_i} \right)^N = \ln \sum_i p_i e^{k_i} \quad (11.40)$$

と計算できる<sup>170</sup>。ここでガートナー・エリスの定理より

$$I(\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{k}} [\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \eta(\mathbf{k})] \quad (11.41)$$

が成り立つ。右辺の $\sup$ を求めるには、各 $k_i$ で微分すればよい。右辺を $k_i$ で微分して0と置いて得られる極値方程式は

$$q_i - \frac{p_i e^{k_i}}{\sum_j p_j e^{k_j}} = 0 \quad (11.42)$$

なので、これを解いて

$$k_i = \ln \frac{q_i}{p_i} \quad (11.43)$$

<sup>168</sup>数学的に厳密な定理の内容と証明を知りたい人は、Dembo and Zeitouni, *Large Deviations Techniques and Applications (Stochastic Modelling and Applied Probability)*, Springerなどの教科書を見ていただきたい。

<sup>169</sup>経験分布 $\mathbf{q}$ との混同を避けるため、キウムラント母関数を $\eta$ と置いた。

<sup>170</sup>ある一つの目における $N\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ は、「その目において $i$ をとった回数 $\times k_i$ 」の $i$ についての和である。

が得られる。これを代入すると、

$$I(\mathbf{q}) = \sup_{\mathbf{k}} [\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \eta(\mathbf{k})] = \sum_i q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \quad (11.44)$$

となる。この右辺は「相対エントロピー (relative entropy)」あるいは「カルバック・ライブラー情報量 (Kullback-Leibler divergence)」と呼ばれる量で、 $D(\mathbf{q}||\mathbf{p})$  と書く。

**定理 11.3** (サノフの定理 (Sanov's theorem)).  $1, \dots, m$  の目が確率  $p_1, \dots, p_m$  が出るサイコロを  $N$  回振った際の、出目の経験分布  $q_1, \dots, q_m$  のレート関数  $I(\mathbf{q})$  は、 $\mathbf{q}$  の  $\mathbf{p}$  に対する相対エントロピーに一致する。

$$I(\mathbf{q}) = D(\mathbf{q}||\mathbf{p}) \quad (11.45)$$

ちなみに大偏差性質やスケールされたキュムラント母関数は、実は平衡統計力学で既に見たことのあるものである。マクロな系の統計力学を考え、 $\langle \cdot \rangle$  は (エネルギーが異なるものも含む) 全状態が等しい確率で出現するような確率分布としよう。系のサイズを  $N$  とし、系の状態のエネルギー密度  $e$  に対して

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle e^{Nke} \rangle \quad (11.46)$$

というスケールされたキュムラント母関数を考えると、これは

$$q(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} (\ln Z_N(k) - \ln \Omega_N) \quad (11.47)$$

となり、( $k$  によらない) 全状態数  $\Omega_N$  の寄与を除くと、分配関数  $Z_N$  そのもので書ける。ここで  $k$  は逆温度を  $-1$  倍したもの ( $k = -\beta$ ) の役割を果たしている。つまり、自由エネルギー密度に逆温度を掛けたもの  $\beta f$  はキュムラント母関数と見ることができる。

エネルギー密度  $e$  での状態数  $W(e) = e^{Ns(e)}$  を用いると、全状態が等確率で出現する分布の下でのエネルギー密度  $e$  の出現確率は

$$P(e) = \frac{W(e)}{\Omega_N} = e^{Ns(e) - \ln \Omega_N} \quad (11.48)$$

と書ける。これは、エネルギー分布  $P(e) \doteq e^{-NI(e)}$  のレート関数が  $I(e) = s(e) - \frac{1}{N} \ln \Omega_N$  と書けることを意味している。さて、熱力学により、エントロピー密度  $s(e)$  の  $e$  によるルジャンドル変換は  $\beta f(\beta)$  である<sup>171</sup>。この事実は、キュムラント母関数  $q(k)$  とレート関数  $I(e)$  がルジャンドル変換で結びつくということであり、これはガートナー・エリスの定理そのものである。つまり、ガートナー・エリスの定理の特殊な場合は、熱統計力学の熱力学関数のルジャンドル変換として既に学んでいたということである。

<sup>171</sup> エントロピー  $S(U)$  の  $U$  についてのルジャンドル変換が  $\beta F(\beta)$  になることに対応している。熱力学でよく見るルジャンドル変換は、 $U(S)$  の  $S$  についてのルジャンドル変換が  $F(T)$  になる、というものであり、本質は両者同じだが見た目が少し違う点に注意。



## 12 確率の集中不等式

この章では、平均や分散といった量を用いて「平均から大きく外れる確率」を評価する様々な不等式を導く。特にここで得られる不等式は「平均に近い値が高い確率で出現する」ことを示すときによく用いられる。これら不等式は「集中不等式 (concentration inequality)」とも呼ばれる<sup>172</sup>。

### 12.1 マルコフ不等式とチェビシェフ不等式

まずは、基本的だが有用なモーメント・キュムラントについての不等式を導こう。以下、 $P[\sim]$  で、命題  $\sim$  が発生する確率を表すことにする。

**定理 12.1** (マルコフの不等式 (Markov inequality)).  $X$  を非負の値をとる確率変数とする。このとき、以下が成り立つ。

$$P[X \geq s] \leq \frac{\langle X \rangle}{s} \quad (12.1)$$

この式は、 $s > \langle X \rangle$  のときに有意な式である。特に  $s \gg \langle X \rangle$  である場合には、 $s$  以上の値を  $X$  がとる確率は非常に小さいことが言える。

**証明.**  $\chi[\sim]$  を、命題  $\sim$  が成り立つときに 1、成り立たないときに 0 をとる指示関数 (indicator function) とする。これを用いると、

$$P[X \geq s] = \int_0^\infty dX \chi[X \geq s] P(X) \leq \int_0^\infty dX \frac{X}{s} P(X) = \frac{\langle X \rangle}{s} \quad (12.2)$$

と導ける。ただし真ん中の不等式は  $\chi[X \geq s] \leq \frac{X}{s}$  が任意の  $X$  で成り立つことを用いた (図 26)。 □

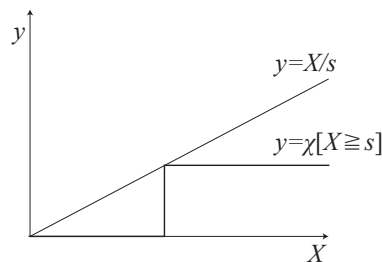


図 26: マルコフの不等式の証明の途中で用いた不等式のイメージ図。  $\chi[X \geq s] \leq \frac{X}{s}$  が任意の  $X$  で成り立つ。

マルコフの不等式は、確率変数が非負の時に、平均を用いて外れ値をとる確率を評価する不等式であった。これに対し、次に紹介するチェビシェフの不等式は、一般の確率変数が外れ値をとる確率を、分散を用いて評価する。

**定理 12.2** (チェビシェフの不等式 (Chebyshev's inequality)).  $\text{Var}[X]$  で確率変数  $X$  の分散を表す。このとき

$$P[|X - \langle X \rangle| \geq s] \leq \frac{\text{Var}[X]}{s^2} \quad (12.3)$$

チェビシェフの不等式は、分散が小さいならば、確率変数  $X$  が平均から大きく離れた値をとる確率が小さいことを主張している。

<sup>172</sup> この章の内容は、R. Vershynin, “High-Dimensional Probability”, Cambridge university press や M. J. Wainwright, “High-Dimensional Statistics”, Cambridge university press などに基づく。

証明. マルコフの不等式において、 $(X - \langle X \rangle)^2$  を  $X$  と、 $s^2$  を  $s$  と置くことにより

$$P[|X - \langle X \rangle| \geq s] = P[(X - \langle X \rangle)^2 \geq s^2] \leq \frac{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle}{s^2} = \frac{\text{Var}[X]}{s^2} \quad (12.4)$$

と示せる。□

## 12.2 モーメント法と閾値定理

マルコフの不等式やチェビシェフの不等式を利用することで、「モーメント法 (moment method)」という強力な手法が得られる<sup>173</sup>。モーメント法は、非負整数をとる確率変数  $X$  について、 $X$  がゼロをとる確率を評価する際に用いられる。以下具体例を用いて説明しよう。

$n$  個の頂点 (vertex/node) の「エルデシュ・レニーランダムグラフ (Erdos-Renyi random graph)」を考える (図 27)。これは、与えられた  $n$  個の頂点に対し、 $n(n-1)/2$  個の頂点ペアについて、与えられた確率  $p$  で二つの頂点を辺 (edge) で結び、確率  $1-p$  で辺を置かない、という手続きで確率的に生成されるグラフである。我々は特に、 $p$  を  $n$  のべき  $p = n^a$  で変化させる場合の  $n \rightarrow \infty$  極限の振る舞いに興味がある。

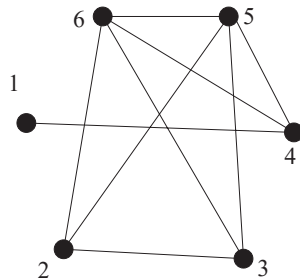


図 27:  $n = 6$  の場合のエルデシュ・レニーランダムグラフの一例。このグラフでは 2356 が 4-クリークをなしている。

問題: ランダムグラフ中に「どの頂点間にも辺がある 4 つ組 (これを「4-クリーク<sup>174</sup> (4-clique) という)」が含まれるか否かを考える。 $n \rightarrow \infty$  のランダムグラフにおいて、 $a < -\frac{2}{3}$  ならば確率 1 で 4-クリークは存在せず、 $a > -\frac{2}{3}$  ならば確率 1 で 4-クリークは存在することを示せ。

つまり、4-クリークがあるかないかの境目はちょうど  $p = n^{-2/3}$  のオーダー<sup>175</sup> であり、それより少しでも大きければほとんど確実に 4-クリークは存在せず、逆にそれより少しでも大きければほとんど確実に 4-クリークは存在するということである。クリークの有無を議論するうえで厄介なのは、可能な頂点の 4 つ組は  $n^4$  のオーダーあるが、その多くが互いに (辺を共有しているために) 相関し合っている<sup>176</sup> ため、単純な数え上げでは評価が難しいという点である。モーメント法は、このような問題の閾値を評価するのに有用な道具である。

$X$  として「そのランダムグラフに含まれる 4-クリークの数」をとる。 $X$  は非負整数をとる確率変数である。頂点の 4 つ組は全部で  $\binom{n}{4} = \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{24}$  通りあるが、これらを  $v$  でラベルする<sup>177</sup>。4 つ組  $v$  に 4-クリークがあるか否かを示す確率変数  $X_v$  を導入する。明らかに  $X = \sum_v X_v$  である。まず  $p = n^a$  ( $a < -2/3$ ) の状況を考えよう。この際の  $X$  の期待値の漸近挙動は

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle X \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \binom{n}{4} p^6 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{24} p^6 = 0 \quad (12.5)$$

<sup>173</sup> 今回の事例は、閾値の値は直観的にも分かるような問題であった。より複雑な組合せ最適化問題については、閾値自体がそう簡単に分からないものも多く、そうした場合にも閾値を上下から評価する際にモーメント法はよく用いられる。代表的な結果として Dimitris Achlioptas, Assaf Naor, and Yuval Peres, *Rigorous location of phase transitions in hard optimization problems*. Nature volume 435, pages 759–764 (2005)

<sup>174</sup> 指定の頂点同士をすべて結んだものを「クリーク」という。

<sup>175</sup> 係数及びサブリーディングオーダーは存在しうる。

<sup>176</sup> 例えば、頂点 1234 と頂点 1256 を考えると、もし 12 間に辺がないのならば、1234 にも 1256 にも 4-クリークは存在しない。そのため、「1234 に 4-クリークがある確率」と「1256 に 4-クリークがある確率」は独立ではなく互いに相関している。

<sup>177</sup>  $n = 6$  の場合だと、 $v$  は全部で 15 通りの値をとる。

である。よって、マルコフの不等式で  $s = 1$  と選ぶと、 $n \rightarrow \infty$  において

$$P[X \geq 1] \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \langle X \rangle = 0 \quad (12.6)$$

が得られる。よって、 $X$  が 1 以上となる確率はゼロ、つまり 4-クリーク数  $X$  は確率 1 でゼロである。言い換えると、4-クリークは確率 1 で存在しないということである。この計算法は「一次モーメント法 (first moment method)」という。

次に  $p = n^a$  ( $a > -2/3$ ) の状況を考えよう。これを議論するために以下の「二次モーメント法」を用いる。

**定理 12.3** (二次モーメント法 (second moment method)), 任意の確率変数  $X$  について以下が成り立つ。

$$P[X = 0] \leq \frac{\text{Var}[X]}{\langle X \rangle^2} \quad (12.7)$$

**証明.** 見やすくするために  $\mu := \langle X \rangle$  と置く。チェビシェフの不等式を用いることで、以下のように欲しい式を得る。

$$P[X = 0] \leq P[|X - \mu| \geq \mu] \leq \frac{\text{Var}[X]}{\mu^2} = \frac{\text{Var}[X]}{\langle X \rangle^2} \quad (12.8)$$

□

今回の問題においては  $\langle X \rangle = O(n^4 p^6)$  と知っているので、 $p = n^a$  ( $a > -2/3$ ) において  $\text{Var}[X]$  が  $O(n^8 p^{12})$  を下回ることを言えばよい。そうすれば、 $\text{Var}[X]/\langle X \rangle^2 \rightarrow 0$  より  $P[X = 0]$  がゼロに収束する、つまり  $X$  は確率 1 で 1 以上であることが言える。すなわち、確率 1 で 4-クリークは存在すると言える。そのため以下では  $\text{Var}[X]$  を評価する。

まず各  $X_v$  の分散・共分散を用いて

$$\text{Var}[X] = \sum_v (\langle X_v^2 \rangle - \langle X_v \rangle^2) + \sum_{v \neq w} (\langle X_v X_w \rangle - \langle X_v \rangle \langle X_w \rangle) = \sum_v \text{Var}[X_v] + \sum_{v \neq w} \text{Cov}[X_v, X_w] \quad (12.9)$$

が得られる。ただし  $\text{Cov}[XY] = \langle (X - \langle X \rangle)(Y - \langle Y \rangle) \rangle = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle$  は  $X$  と  $Y$  の共分散<sup>178</sup> である。 $\text{Cov}[X_v, X_w]$  を評価するため、 $v$  と  $w$  で重複している頂点の数で場合分けする。重複している頂点が 0 個または 1 個の場合には、 $X_v$  と  $X_w$  は独立であり共分散はゼロである。重複する頂点が 2 個の場合には、1 つの辺が共有されており、今は  $\langle X_v \rangle \geq 0$  なので、この場合の共分散は  $\text{Cov}[X_v, X_w] \leq \langle X_v X_w \rangle = p^{11}$  と上から押さえられる。同様に重複する頂点が 3 個の場合には、3 つの辺が共有されており、同様にしてこの場合の共分散は  $\text{Cov}[X_v, X_w] \leq \langle X_v X_w \rangle = p^9$  と上から押さえられる。よって、

$$\begin{aligned} \text{Var}[X] &= \sum_v \text{Var}[X_v] + \sum_{v \neq w} \text{Cov}[X_v, X_w] \\ &\leq \binom{n}{4} p^6 (1 - p^6) + \binom{n}{6} \frac{6!}{2^3} p^{11} + \binom{n}{5} \frac{5!}{3!} p^9 \\ &= O(n^4 p^6 + n^6 p^{11} + n^5 p^9) \end{aligned} \quad (12.10)$$

であり<sup>179</sup>、これは  $p = n^a$  ( $a > -2/3$ ) のときには真に  $O(n^8 p^{12})$  より小さい。よって、 $p = n^a$  ( $a > -2/3$ ) のときには、 $X = 0$  の確率はゼロ、すなわち 4-クリークはほとんど確実に存在する。

<sup>178</sup> 共分散の定義は定義 9.1 で述べているので、忘れた人は参照してほしい。

<sup>179</sup> ここで  $\binom{a}{b}$  は  $aC_b = a!/b!(a-b)!$  と同じで、 $a$  個から  $b$  個を選ぶ組合せを表す。 $C$  を用いる方法は日本ではよく用いられるが、海外ではあまり用いられない。

### 12.3 チェルノフ限界

ここまで見たチェビシエフの不等式などは、平均して  $O(1)$  となるようなまれな過程の回数を扱う「ポアソン過程<sup>180</sup> (Poisson process)」に対しては、あまりよいバウンドを与えてくれない。この場合には、モーメント母関数を用いた「チェルノフ限界」がよいバウンドを与える。

**定理 12.4** (チェルノフ限界 (Chernoff bound)).  $X_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) は互いに独立な確率変数で、その和を  $S = \sum_{i=1}^N X_i$  とする。このとき、任意の  $a$  と  $t > 0$  について<sup>181</sup>以下が成り立つ。

$$P[S \geq a] \leq e^{-at} \prod_i \langle e^{tX_i} \rangle \quad (12.11)$$

$$P[S \leq a] \leq e^{at} \prod_i \langle e^{-tX_i} \rangle \quad (12.12)$$

$t$  は任意なので、右辺を最小化するように  $t$  をとると不等式が最もタイトになる。

**証明.** 式 (12.11) のみ証明する。

マルコフの不等式を用いると

$$P[S \geq a] = P[e^{tS} \geq e^{ta}] \leq \frac{\langle e^{tS} \rangle}{e^{ta}} = e^{-at} \prod_i \langle e^{tX_i} \rangle \quad (12.13)$$

と求めたい不等式を得る。ただし最後の等式では  $X_i$  たちが独立であることを用いた。  $\square$

[12-1]. 式 (12.12) を導出せよ。

特に  $X_i$  が確率  $p_i$  で 1、確率  $1 - p_i$  で 0 を取る場合には、

$$\langle e^{tX_i} \rangle = p_i e^t + (1 - p_i) \leq e^{(e^t - 1)p_i} \quad (12.14)$$

が成り立つので、 $a > \langle S \rangle$  の条件の下、 $t = \ln \frac{a}{\langle S \rangle}$  と選ぶことで

$$P[S \geq a] \leq \left( \frac{a}{\langle S \rangle} \right)^{-a} \prod_i e^{(a/\langle S \rangle - 1)p_i} = e^{-\langle S \rangle} \left( \frac{e \langle S \rangle}{a} \right)^a \quad (12.15)$$

という評価式が得られる。

[12-2]. チェルノフ限界の設定で、 $X_i$  が確率  $p_i$  で 1、確率  $1 - p_i$  で 0 を取る場合を考える。 $\mu := \langle S \rangle$  と書く。このとき、ある定数  $c$  が存在し、任意の  $0 < \delta \leq 1$  について

$$P[|S - \mu| \geq \delta \mu] \leq 2e^{-c\mu\delta^2} \quad (12.16)$$

が成り立つことを示せ。

再びエルデシュ・レニーランダムグラフの具体的問題で考えてみよう。確率  $p$  で辺を結ぶ場合、平均次数 (頂点から出ている辺の数) は  $d := (n - 1)p$  である。我々は特に  $\lim_{n \rightarrow \infty} d / \ln n = \infty$  となるようなグラフ、すなわち平均次数が  $\ln n$  のオーダーより大きい密な (dense) グラフ<sup>182</sup> を考える。

エルデシュ・レニーランダムグラフで、頂点  $i$  の次数を  $d_i$  とする。 $d_i$  は確率変数である。

<sup>180</sup> 確率変数  $S = \sum_{i=1}^N X_i$  の評価。ただし  $X_i$  は確率  $p = \frac{a}{N}$  で 1、 $1 - p$  で 0

<sup>181</sup> ただし式 (12.11) の場合、 $a \leq \langle S \rangle$  と選ぶと右辺が 1 以上となって無意味な不等式になるので、実質的に意味があるのは  $a > \langle S \rangle$  の場合である。式 (12.12) の場合は逆に  $a < \langle S \rangle$  と選ぶ必要がある。

<sup>182</sup> 対義語は「疎な (sparse) グラフ」である。無限頂点数のランダムグラフの場合、平均次数が有限ならば疎なグラフである。ただし平均次数が発散しているならば密なグラフというかは状況次第であり、平均次数が  $n$  のオーダーならば密なグラフという場合が多いが、(ここで挙げたような)  $\ln n$  オーダーより少し上のグラフまで「密なグラフ」に含めるかは状況による。

**問題**：精度  $\varepsilon > 0$  を任意に選んで固定する。 $n$  が十分大きいならば、ほとんど確実に、得られたグラフでは（一つの例外もなく）すべての頂点が  $(1 - \varepsilon)d \leq d_i \leq (1 + \varepsilon)d$  を満たすことを示せ。

**証明**。まず式 (12.16) より、

$$P[|d_i - d| \geq \varepsilon d] \leq 2e^{-c\varepsilon^2 d} \quad (12.17)$$

が成り立つ。ここで次のユニオンバウンドを用いる<sup>183</sup>。

**定理 12.5** (ユニオンバウンド (union bound))。  $A_1, \dots, A_m$  を、互いに独立とは限らない事象とする。このとき、以下が成り立つ。

$$P\left[\bigcup_i A_i\right] \leq \sum_i P[A_i] \quad (12.18)$$

ユニオンバウンドの証明は、ベン図を書いてみれば直ちにわかる。証明を見ると当たり前の関係式にも見えるが、独立でない事象を取り扱う際にはよく用いられる不等式である。

事象  $A_i$  として「頂点  $i$  の次数が  $|d_i - d| > \varepsilon d$ 」を選ぶ。 $\bigcup_i A_i$  は「少なくとも一つの頂点  $i$  ( $1 \leq i \leq n$ ) で、頂点の次数が  $|d_i - d| > \varepsilon d$  となる」という事象なので、これは我々が知りたい「(一つの例外もなく) すべての頂点の次数は  $|d_i - d| \leq \varepsilon d$ 」という事象の補集合である。そのため、 $P[\bigcup_i A_i]$  が  $n \rightarrow \infty$  の極限でゼロに収束することを示せばいい。ユニオンバウンドを用いると

$$P\left[\bigcup_i A_i\right] \leq \sum_i P[A_i] = \sum_i P[|d_i - d| \geq \varepsilon d] \leq 2ne^{-c\varepsilon^2 d} = 2e^{(-c\varepsilon^2 d / \ln n + 1) \ln n} \quad (12.19)$$

である。右辺は  $\lim_{n \rightarrow \infty} d / \ln n = \infty$  より  $n \rightarrow \infty$  でゼロに収束する。よって示された。  $\square$

#### 12.4 サブガウス分布とヘフディング限界

平均  $a$ 、分散  $b^2$  のガウス分布に従う確率変数  $X$  は

$$\langle e^{t(X-a)} \rangle = e^{t^2 b^2 / 2} \quad (12.20)$$

を任意の  $t$  で満たす。この事実を踏まえ、「サブガウス分布」を以下のように定義する。

**定義 12.1** (サブガウス分布 (sub-Gaussian))。平均  $\mu$  の確率変数  $X$  がサブガウス分布<sup>184</sup>に従うとは、ある正の実数  $c$  が存在し

$$\langle e^{t(X-\mu)} \rangle \leq e^{t^2 c^2 / 2} \quad (12.21)$$

が任意の実数  $t$  で満たされることをいう。

サブガウス分布は、分布のテールが何らかのガウス分布で押さえられているということを意味している。つまり、分布のテールの減衰速度は、 $e^{-kx^2}$  の形 ( $k$  は適当な係数)、もしくはそれよりも速くないといけない。

多くのよく知られた確率変数はサブガウス分布に従う。例えば、 $\pm 1$  を半々でとるラデマツハ変数は  $c = 1$  のサブガウス分布に従う。この事実は

$$\langle e^{tX} \rangle = \frac{e^t + e^{-t}}{2} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^{2i}}{(2i)!} \leq \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(t^2)^i}{2^i (i)!} = e^{t^2 / 2} \quad (12.22)$$

<sup>183</sup> 「一様限界」、あるいは「ブールの不等式 (Boole's inequality)」ともいう。

<sup>184</sup> 「劣ガウス分布」ともいう。

と直接確認できる。

より一般に、 $X$  が  $X = 0$  で対称な確率分布  $P(X) = f(X)$  に従う場合、 $X$  は重み  $f(x)$  による  $\pm x$  のラデマッハ確率変数の古典混合とみなせるので、

$$\langle e^{tX} \rangle = \int_0^\infty dx f(x) \frac{e^{xt} + e^{-xt}}{2} \leq \int_0^\infty dx f(x) e^{t^2 x^2 / 2} \quad (12.23)$$

と計算できる。そのため、 $\int_0^\infty dx f(x) e^{t^2 x^2 / 2}$  が収束するならばこれはサブガウス分布に従う。

また、確率変数  $X$  に上限  $u$  と下限  $v$  がある場合には、 $X$  は  $c = u - v$  のサブガウス分布に従う。これは以下のように示せる。まずジェンセンの不等式より  $e^{-\langle X' \rangle} \leq \langle e^{-X'} \rangle$  なので、これを用いると

$$\langle e^{t(X - \langle X' \rangle_{X'})} \rangle_X \leq \langle e^{t(X - X')} \rangle_{X, X'} \quad (12.24)$$

が得られる。ただしカッコの下付き添え字は、その変数について平均をとっていることを表している。最後の  $\langle \cdot \rangle_{X, X'}$  は、二つの確率変数  $X, X'$  が ( $X$  の従う) 独立同分布からサンプルされている状況での平均を表す。すると  $X - X'$  は対称な分布であり、 $|X - X'| \leq u - v$  なので、式 (12.23) を用いると

$$\langle e^{t(X - X')} \rangle_{X, X'} \leq e^{t^2 (u - v)^2 / 2} \quad (12.25)$$

と上から押さえられ、 $X$  は  $c = u - v$  のサブガウス分布に従うとわかる。より精密な議論を用いると、実は  $X$  は  $c = (u - v)/2$  のサブガウス分布に従うことも示せる。

**[12-3]**.  $X$  をサブガウス分布に従う確率変数とする。このとき、任意の  $p \geq 1$  について、 $p$  によらない定数  $C$  が存在し

$$\langle X^p \rangle^{1/p} \leq C \sqrt{p} \quad (12.26)$$

が成り立つことを示せ。

サブガウス分布に対する有用なバウンドである「ヘフディング限界」を導こう。ヘフディング限界（やその発展版）は、情報科学、特に機械学習<sup>185</sup> などでは頻繁に用いられる不等式である。

**定理 12.6** (ヘフディング限界 (Hoeffding bound)).  $X_i$  をパラメータ  $c_i$  のサブガウス分布に従う確率変数、 $S = \sum_i X_i$  とし、 $\mu$  を  $S$  の平均とする。このとき任意の  $s \geq 0$  について以下が成り立つ。

$$P[S - \mu \geq s] \leq \exp\left(-\frac{s^2}{2 \sum_i c_i^2}\right) \quad (12.27)$$

**証明.**  $X_i$  の平均を  $\mu_i$  とする。明らかに  $\sum_i \mu_i = \mu$  である。チェルノフ限界 (12.11) において、 $a = \mu + s$  と置くと

$$P[S - \mu \geq s] \leq e^{-(\mu+s)t} \prod_i \langle e^{tX_i} \rangle \leq e^{-(\mu+s)t} \prod_i e^{t\mu_i + t^2 c_i^2 / 2} = \exp\left(-st + \frac{t^2}{2} \sum_i c_i^2\right) \quad (12.28)$$

を得る。右辺の指数の肩は  $t = s / \sum_i c_i^2$  のときに最大化され、このとき

$$\exp\left(-st + \frac{t^2}{2} \sum_i c_i^2\right) = \exp\left(-\frac{s^2}{2 \sum_i c_i^2}\right) \quad (12.29)$$

である。 □

<sup>185</sup> 学習理論では、得られた有限個のデータで学習を行い、それで次の未知のデータに対してもよいパフォーマンスを実現しようとする (汎化)。なので、何らかのペナルティ (例えば誤差) を最小化するようなパラメータを学習で得ようとした場合、「手元の有限個のデータ (これは確率変数) で作られた誤差関数」と「真の分布による誤差関数」との間にずれがあることを考える必要が出てくる。この「得られた有限個のデータによって作られる誤差関数の期待値」と「真の分布による誤差関数の期待値」の差について、ヘフディング限界を用いることで、「ほとんどすべてのデータの出現の仕方に対し、~が成り立つ」のような評価が得られる。

### 13 高次元空間の性質

この章では、高次元空間において見られる、直観に反する性質をいくつか見よう<sup>186</sup>。高次元空間は、マクロ系や多数のサンプルに対する統計処理の状態空間などで現れる。例えば1次元空間中に粒子が  $N$  個いる系を考えると、この状態空間は  $\mathbb{R}^N$  中の超立方体である。また、 $N$  個の二準位系が集まった量子系の状態空間は  $\mathbb{C}^{2^N}$  中の超球である。こうした系の  $N$  が十分大きい場合の振る舞いは、2次元や3次元といった我々になじみのある低次元の場合のイメージとは大きく異なる場合がある。

#### 13.1 高次元における反直観的な振る舞い

ここではいくつかの具体例を見ていく。

**例1：高次元球のサンプリング：**数値実験で、半径1の  $n$  次元超球 ( $\mathbb{R}^n$  の空間中の、原点からの距離が1以下の空間) から一様サンプリングを行いたい。このとき、超球の一様サンプルをきちんと構成するのが面倒くさそう<sup>187</sup> だと考えて、代わりに「 $[-1, 1]^n$  の超立方体からランダムサンプリングを行い、超球の外に出ってしまった場合は捨てる」という形でサンプリングをしたとする。このサンプリングは現実的な数値実験としてうまく行くだろうか。

2次元や3次元ならば、正方形や立方体の中にランダムに点を打ったら少なくない確率で円や球の中に点が打たれる (図 28)。しかし半径1の  $n$  次元超球の体積は、ガンマ関数を用いて

$$B_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2 + 1)} \quad (13.1)$$

と書けるので、スターリングの公式 (式 (9.35)) を用いると、一辺2の超立方体の体積との比率は

$$\frac{B_n}{2^n} \simeq \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \left(\frac{\pi e}{2n}\right)^{n/2} \quad (13.2)$$

であり、これは  $n$  が大きいと指数的にゼロに向かう。つまり、超立方体中にランダムに点を打つと、極めて高い確率で超球の外に点が打たれてしまい、超球のサンプリングにならない。

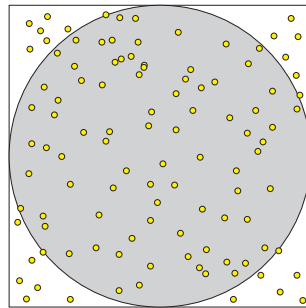


図 28: 2次元の場合に、 $[-1, 1]^2$  の正方形内にランダムに点を打ち、半径1の円内に入るか否かを見た様子。低次元の場合には大半の点が円内に入るが、高次元だとこうはならない。

ちなみに、高次元球を一様サンプリングすると、ほとんどの点は球面のすぐそばになる。この事実は、 $n$  次元空間中の半径  $R$  の超球と、半径  $(1-a)R$  ( $a > 0$ ) の超球の体積の比は

$$\frac{(1-a)^n R^n}{R^n} = e^{n \ln(1-a)} \quad (13.3)$$

なので、 $\ln(1-a) < 0$  であることを思い出せば、この量は  $n$  が大きくなると指数的に素早くゼロに収束することが分かる。つまり、半径  $R$  の超球のほとんどの点は、半径  $(1-a)R$  よりも外側にある、つまり極めて超球の表面の近くにあるということである。

**例2：球体の包囲：** $[-2, 2]^n$  の超立方体を考え、この中に各座標が  $\pm 1$  である  $2^n$  個の格子点が中心となる

<sup>186</sup> この章の内容は、J. マトウシエク『離散幾何学講義』丸善出版 12-14 章に基づく。

<sup>187</sup> 極座標を用いれば一様サンプルは出来るが、ヤコビアンをきちんと考える必要がある。

ように半径1の超球を $2^n$ 個置く。そして原点を中心とする超球として、 $2^n$ 個の頂点に置かれた超球にちょうど内側から接するようなもの考える(図29)。

この超球は、超立方体の中に入っている小さな超球に思えるかもしれない。しかし、この超球の半径を計算すると $\sqrt{n}-1$ なので、実は10次元の時点ですでに超立方体を突き破って外に飛び出している。超球の半径は次元を上げればいくらでも大きくなる。

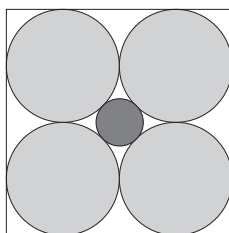


図 29:  $[-2, 2]^2$  の正方形の中に、 $(1, 1), (-1, 1), (1, -1), (-1, -1)$  の4点を中心とする半径1の円(薄い灰色)を置き、その円に内側から接するように原点を中心とした円(濃い灰色)を置く。2次元の場合には濃い灰色の円は非常に小さいが、10次元だと濃い灰色の円(超球)は外側の正方形(超立方体)を突き破る。

[13-1].  $n$ 次元空間中に、各ベクトル成分が平均0、分散1のガウス分布に従う点 $\mathbf{x}$ を多数ランダムサンプリングしてプロットする。このプロットはどのようなものになるか。

### 13.2 測度集中

特に反直観的であろう現象として、高次元球面における「測度集中 (measure concentration)」を取り上げよう。その最も興味深い結果の一つは、「高次元の超球面上の関数は、ほとんどの場所でほぼ定数関数になる」というレヴィの補題である。一見すると極めておかしい結果に思えるだろうが、これは証明可能な定理である。

**定義 13.1** ( $C$ -リプシッツ). ある関数  $f(\mathbf{x})$  が  $C$ -リプシッツ (C-Lipschitz) であるとは、任意の元  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  について

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y})| \leq C|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \quad (13.4)$$

が成り立つことをいう。

大雑把にいうと、どの場所で見ても傾きが  $C$  を超えることがないということである。リプシッツ性は関数が急激に変化しないことを要請したいときによく用いられる<sup>188</sup>。

以下、 $n$ 次元超球の表面 ( $n-1$ 次元球面<sup>189</sup>) を  $S^{n-1}$  と書く。また、超球面上の集合  $A$  が超球面に占める割合を  $P[A] = |A| / |S^{n-1}|$  と書く。

**定理 13.1** (レヴィの補題 (Levy's lemma)).  $f$  を  $n-1$ 次元超球面  $S^{n-1}$  から実数  $\mathbb{R}$  への  $a$ -リプシッツな関数とする。超球面上の  $f$  の中央値<sup>190</sup> (median) を  $\text{med}[f]$  とする。このとき、任意の  $t > 0$  について、以下が成り立つ。

$$P[|f(\mathbf{x}) - \text{med}[f]| > t] \leq 4e^{-t^2 n / 2a^2} \quad (13.5)$$

すなわち、超球面上のほとんどすべての点で、 $f$  は中央値に非常に近い値をとっているということである。これが「ほとんど定数関数」の意味である。最終的な結果は前章の集中不等式(ほとんど確実に特定の値をとる)に近く、実際集中不等式を「~の性質を満たす任意の分布はほとんど特定の値をとる」のように

<sup>188</sup> 例えば微分方程式の解の存在と一意性を示す際に、リプシッツ連続であることが仮定に置かれる(ピカールの逐次近似法)。

<sup>189</sup> 「 $n$ 次元球面」という場合、その球面が存在する空間次元ではなく、球面自身の次元でいう(空間次元より1低い次元になる)点に注意。例えば我々のいる3次元空間中の球の表面は「2次元球面」である。

<sup>190</sup>  $\int d\mathbf{x} \chi[f(\mathbf{x}) \leq f^*] / \int d\mathbf{x} = \frac{1}{2}$  となる  $f^*$  を「中央値」と呼び、 $\text{med}[f]$  と書く。



言い換えれば、これは測度集中そのものである。ただし課されている条件が少し異なる（分散などの制限か、リプシッツ性か）ので、ここでは別の章で扱っている。

レヴィの補題の証明の鍵となるのは、球面における測度集中である。

**定理 13.2** (球面の速度集中 (measure concentration for the sphere)).  $A$  を  $S^{n-1}$  の部分集合で、超球面の面積の半分以上を占めるもの ( $P[A] \geq \frac{1}{2}$ ) とする。また、 $A$  からの距離が  $\varepsilon (> 0)$  以下である領域を  $A_\varepsilon$  とする。このとき、以下が成り立つ。

$$1 - P[A_\varepsilon] \leq 2e^{-\varepsilon^2 n/2} \quad (13.6)$$

$\varepsilon > 0$  は十分小さくとることができるが、その場合でも次元  $n$  を大きくすれば右辺は指数的に 0 に収束する。つまり、面積を半分にする領域  $A$  から距離  $\varepsilon$  だけ膨らませると、超球面はほぼすべて覆ってしまうということである。あるいは、面積が半分の場合の  $A$  を考え、その境界を  $\partial A$  とすると、境界線  $\partial A$  からの距離が  $\varepsilon$  以内の領域が超球面のほぼ全てであるということである。

係数を少し弱めた場合の一般的な証明は補論に譲り、ここでは簡単な場合として、 $A$  がちょうど半球、 $\partial A$  が赤道である場合になぜこの結果が成り立つのかを説明する。面積を固定した場合に境界の長さを最小化する図形は円（超球）なので、 $A$  を半球（境界  $\partial A$  は  $n-1$  次元超球）とすれば  $\partial A$  からの距離が  $\varepsilon$  以内の領域は小さくなると考えられる。なので  $A$  を半球にする設定は、 $A$  からの距離が  $\varepsilon$  以上の領域  $A_\varepsilon^c$  の面積が大きくなるような状況設定としてもっともらしい<sup>191</sup>。

$A$  が半球の場合の状況を横から見ると図 30 左のようになる（茶色の領域が  $A$ ）。 $A_\varepsilon$  ではない領域  $A_\varepsilon^c$  は、図 30 の薄いグレーの領域である。ここで、 $A_\varepsilon^c$  の面積は、図 30 右のように考えることにより、半径  $1 - \varepsilon^2/2$  の超半球面（濃いグレー）で上から押さえられる<sup>192</sup>。よって、 $\varepsilon$  が小さければ

$$1 - P[A_\varepsilon] = \frac{|A_\varepsilon^c|}{|S^{n-1}|} \leq \frac{1}{2}(1 - \varepsilon^2/2)^{n-1} \leq \frac{1}{2}e^{-(n-1)\varepsilon^2/2} \quad (13.7)$$

と押さえられる。これは細かい係数を除けば求めたかった式と同じ形をしている。

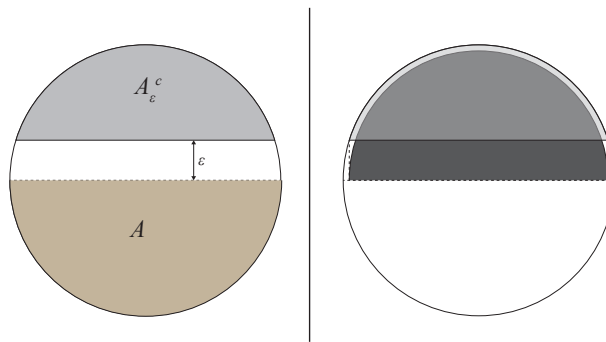


図 30: 領域  $A$  (左図茶色) が半球の場合の領域  $A_\varepsilon^c$  (左図薄いグレー) および、半径  $1 - \varepsilon^2/2$  の超半球面 (右図濃いグレー)。同じ場所の傾きは濃いグレーの方が大きいため、面積も濃いグレーの方が大きい。

**[13-2].**  $A$  を  $S^{n-1}$  の部分集合で、超球面の面積の半分以上を占めるもの ( $0 < P[A] \leq \frac{1}{2}$ ) とする。 $d > 0$  として、 $2e^{-d^2 n/2} < P[A]$  を満たすものを選ぶ。このとき、 $\varepsilon \geq d$  において以下の関係が成り立つことを示せ。

$$1 - P[A_\varepsilon] \leq 2e^{-(\varepsilon-d)^2 n/2} \quad (13.8)$$

球面の測度集中を用いれば、レヴィの補題も簡単に示せる。

<sup>191</sup>これは「等周不等式 (isoperimetric inequality)」と呼ばれるものであり、証明することもできる。

<sup>192</sup> $z$  軸と直交する面を、便宜的に  $xy$  面と呼ぶ。 $A_\varepsilon^c$  と半径  $1 - \varepsilon^2/2$  の超半球面とで、同じ  $xy$  座標の点の傾きを比較すると、どの点においても半径  $1 - \varepsilon^2/2$  の超半球面の方が傾きが大きい。曲面の面積の公式を思い出せば、これは半径  $1 - \varepsilon^2/2$  の超半球面の方が面積が大きいことを意味している。

定理 13.1 の証明. 領域  $A$  として  $A := \{\mathbf{x} | f(\mathbf{x}) \leq \text{med}[f]\}$  をとる. median の定義より,  $A$  の面積は超球面全体の面積のちょうど半分である.  $f$  は  $a$ -リプシッツなので, 領域  $A_\varepsilon$  における  $f$  の値は  $\text{med}[f] + a\varepsilon$  以下である. よって,  $a\varepsilon = t$  と置くと

$$P[f(\mathbf{x}) > \text{med}[f] + t] \leq 1 - P[A_{t/a}] \leq 2e^{-t^2 n / 2a^2} \quad (13.9)$$

が得られる.

同様にして

$$P[f(\mathbf{x}) < \text{med}[f] - t] \leq 2e^{-t^2 n / 2a^2} \quad (13.10)$$

も得られる. 両者を足すことで欲しかったレヴィの補題を得る.  $\square$

レヴィの補題は, 平衡統計力学における「典型性」を示すのに用いられる<sup>193</sup>. マクロな系においては, とりうる状態 (例えばあるエネルギーシェル内の状態) のほとんどすべてが, マクロには (マクロな物理量を見ている範囲では) 区別できないことを証明出来る. これが典型性と呼ばれる性質である.

マクロ系の量子状態を一様にサンプルする際には, 超球が自然に表れる.  $n$  次元ヒルベルト空間の量子純粋状態は, その正規直交基底を  $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$  として

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n c_j |e_j\rangle \quad (13.11)$$

と書ける. ただし  $c_j = a_j + ib_j$  は複素数で, 規格化条件  $\sum_j |c_j|^2 = \sum_j |a_j|^2 + |b_j|^2 = 1$  を満たす. よって  $n$  次元ヒルベルト空間中の量子純粋状態は,  $2n$  次元の実空間中の  $2n - 1$  次元超球面  $S^{2n-1}$  に対応付けられる. 以下「量子純粋状態をランダムに選んだ」と述べた場合, この超球面上から均一に<sup>194</sup> サンプルする状況を考えることにする.

**定理 13.3** (量子純粋状態の典型性 (typicality)). 正規直交基底  $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$  を持つ  $n$  次元ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  を考える. この空間中の量子状態における物理量  $O$  のミクロカノニカル平均を  $\langle O \rangle := \frac{1}{n} \sum_j \langle e_i | O | e_i \rangle$  で定義する<sup>195</sup>. ランダムに選ばれた量子純粋状態が, ミクロカノニカル平均の値から  $\varepsilon$  以上ずれる確率は

$$P[|\langle \psi | O | \psi \rangle - \langle O \rangle| > \varepsilon] \leq 4e^{-n\varepsilon^2 / 4\|O\|^2} \quad (13.12)$$

と上から押さえられる. ただし  $\|O\|$  は演算子ノルム (定義 5.3) である.

**証明.**  $O$  の  $|\psi\rangle$  での期待値を,  $f(|\psi\rangle) := \langle \psi | O | \psi \rangle$  とベクトルから実数への関数として表す. しばらく  $|\psi\rangle$  を  $n$  次元複素ベクトルと見て議論を進める. すると任意の  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$  について

$$\begin{aligned} |f(|\psi\rangle) - f(|\phi\rangle)| &= |\langle \psi | O | \psi \rangle - \langle \phi | O | \phi \rangle| \\ &= \frac{1}{2} |(\langle \psi | - \langle \phi |) O (|\psi\rangle + |\phi\rangle) + (\langle \psi | + \langle \phi |) O (|\psi\rangle - |\phi\rangle)| \\ &\leq \frac{1}{2} \{ |(\langle \psi | - \langle \phi |) O (|\psi\rangle + |\phi\rangle)| + |(\langle \psi | + \langle \phi |) O (|\psi\rangle - |\phi\rangle)| \} \\ &\leq \|O\| (|\psi\rangle - |\phi\rangle) (|\psi\rangle + |\phi\rangle)| \\ &\leq 2\|O\| (|\psi\rangle - |\phi\rangle)| \end{aligned} \quad (13.13)$$

<sup>193</sup> 以下で述べるレヴィの補題を用いた結果は, Sandu Popescu, Anthony J. Short, and Andreas Winter, *Entanglement and the foundations of statistical mechanics*. Nature Physics volume 2, pages 754–758 (2006) に基づく. 平衡統計力学を典型性で特徴づける議論は古くからあり, 例えばボルツマンの論文 (L. Boltzmann, *Ueber die mechanischen Analogien des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik*. Journal für die reine und angewandte Mathematik **100**, 201 (1887)) や古い教科書 (R. C. Tolman, *The principles of statistical mechanics*. Oxford Clarendon Press (1938), A. I. Khinchin, *Mathematical foundations of statistical mechanics*. Dover (1949)) にも見られる. 統計力学の基礎付けを巡る議論の歴史は, 稲葉肇『統計力学の形成』名古屋大学出版会に詳しい.

<sup>194</sup> より正確には, 超球面上の「ハール測度 (Haar measure)」, すなわち任意の球面の回転操作に対して不変になるような測度でサンプルすることにする.

<sup>195</sup> 混合状態を用いて書けば, これはミクロカノニカル状態  $\rho^{\text{MC}} := \frac{1}{n} \sum_j |e_j\rangle \langle e_j|$  に対する  $O$  期待値  $\text{Tr}[O\rho^{\text{MC}}]$  のことである.

という不等式が得られる。ただし4行目では演算子ノルムの性質  $|\mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|$  を用いた。また5行目では三角不等式  $||\psi| + |\phi|| \leq \|\psi\| + \|\phi\| = 2$  を用いた。

$||(\psi) - |\phi||$  は、 $|\psi\rangle$  を  $2n$  次元実ベクトルとして見てもベクトルノルムの大きさは変わらない。そのため上の不等式は、2次元実ベクトルを引数に持つ関数  $f$  が  $2\|O\|$ -リプシッツであることを意味している。よってレヴィの補題を適用することで、求めたい不等式を得る。□

### 13.3 <補論>：係数を弱めた超球面の測度集中の証明

ここでは、指数の係数を  $\frac{1}{2}$  から  $\frac{1}{4}$  に弱めた不等式

$$1 - P[A_\varepsilon] \leq 2e^{-\varepsilon^2 n/4} \quad (13.14)$$

を証明する。

この証明では、体積についての算術幾何平均不等式を用いる。Vol( $X$ ) で  $X$  の体積とする。二つの集合  $X, Y$  の平均を  $\frac{X+Y}{2} := \{\mathbf{x} = \frac{\mathbf{y}+\mathbf{z}}{2} | \mathbf{y} \in X, \mathbf{z} \in Y\}$  で定義すると

$$\text{Vol}\left(\frac{X+Y}{2}\right) \geq \sqrt{\text{Vol}(X)\text{Vol}(Y)} \quad (13.15)$$

が成り立つことが示せる。以下ではこれは事実として認める<sup>196</sup>。

超球面上の領域  $A$  と原点の内分で書ける点の集合  $C(A) := \{\mathbf{x} = k\mathbf{y} | \mathbf{y} \in A, 0 \leq k \leq 1\}$  を導入する。 $A$  の  $\varepsilon$  近傍  $A_\varepsilon$  の補集合を  $A_\varepsilon^c := S^{n-1} \setminus A_\varepsilon$  と書く。このとき、任意の  $\mathbf{x} \in C(A)$ 、 $\mathbf{y} \in C(A_\varepsilon^c)$  に対し、

$$\left| \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2} \right| \leq 1 - \frac{\varepsilon^2}{8} \quad (13.16)$$

が成り立つ<sup>197</sup> (図 31)。これにより  $\frac{C(A)+C(A_\varepsilon^c)}{2}$  は半径  $1 - \frac{\varepsilon^2}{8}$  の超球 (図 31 茶色領域) に含まれることが分かる。

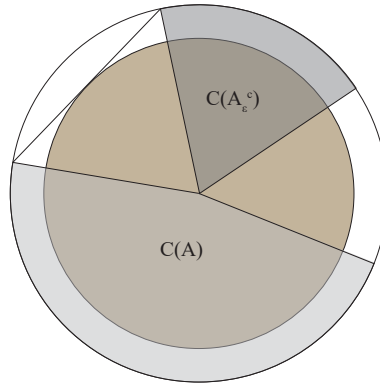


図 31:  $C(A)$  と  $C(A_\varepsilon^c)$  の内分点で書ける領域は、半径  $1 - \frac{\varepsilon^2}{8}$  の超球 (茶色) に含まれる。

$\mu(X)$  で、集合  $X$  が半径 1 の超球に占める体積の割合  $\mu(X) := \text{Vol}(X)/\text{Vol}(B^n)$  を表すことにする。すると  $P(A) = \mu(C(A))$  が成り立つので、式 (13.15) を用いると

$$\left(1 - \frac{\varepsilon^2}{8}\right)^n \geq \mu\left(\frac{C(A) + C(A_\varepsilon^c)}{2}\right) \geq \sqrt{\mu(C(A))\mu(C(A_\varepsilon^c))} = \sqrt{P[A]P[A_\varepsilon^c]} \geq \sqrt{\frac{1}{2} \cdot P[A_\varepsilon^c]} \quad (13.17)$$

<sup>196</sup> これを一般化したブルン・ミンコフスキーの定理の証明は、J. マトウシエク『離散幾何学講義』丸善出版の第 12 章に出ている。大雑把な証明のアイデアは、まず二つが直交座標系に沿った直方体 (各辺が  $x_1, \dots, x_n$  及び  $y_1, \dots, y_n$ ) の場合には、示すべき不等式は  $\prod_{i=1}^n ((x_i + y_i)/2) \geq \prod_{i=1}^n \sqrt{x_i y_i}$  となり、これは通常の相加相乗平均不等式そのものである。あとは直方体同士をくっつけてもやはり不等式が成り立つことを帰納的に示していけばよい。

<sup>197</sup>  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  がそれぞれ  $A, A_\varepsilon^c$  上にある場合を調べれば十分であり、その場合は両点はともに原点からの距離が 1 かつ両点間の距離が  $\varepsilon$  以上ということから、この不等式は容易に示せる。

となるので、

$$1 - P[A_\varepsilon] = P[A_\varepsilon^c] \leq 2 \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{8}\right)^{2n} \leq 2e^{-\varepsilon^2 n/4} \quad (13.18)$$

を得る。

## 14 <補論>：確率論的方法

この章では、初めて見る人にとっては恐らく予想もしないような証明手法である「確率論的方法 (probabilistic method)」を、いくつかの具体例で見えていく。これは確率要素の全くない純粋な存在命題の証明において、確率を導入することで命題の証明を行うというものである。

確率論的方法で着目する事実は「ゼロでない確率で生じるものは存在する」というものである。例えば「ある条件を満たすグラフは存在するか」という問題を考えているとする。このとき、何らかの確率分布に従ってグラフを確率的に生成したとき、その条件を満たすグラフが得られる確率が真にゼロより大きいと言えたでしょう。この事実から、その条件を満たすグラフは当然少なくとも一つは存在しないといけないことが分かる。これが確率論的方法による証明である。

「存在することを示すのが難しいのに、それが非ゼロの確率で生じることが言えることがありうるだろうか」と疑問に思うかもしれない。しかし、確率論的方法の長所は、その存在を構成的 (constructive) に示す必要がないという点である。具体的にその存在を構成する形の存在証明の場合には、どのように構成するのか、一つずつ細かく指定しないと行けないので、このアプローチは非常に難しい場合も多い。これに対し、具体的な指定をするのは大変だが、どういう風にすればおおよそ条件を満たすものになるのかが分かっている状況では、確率論的なアプローチが機能しうる。特に「ランダム」に近い場合には示したい性質が高い確率で満たされるが、整然としたきれいなグラフではその性質が満たされないという場合には、確率論的手法が強力な武器となりうる。

### 14.1 確率的な手法の具体例

確率論的方法がどういう手法なのかは、抽象的な説明を並べるよりも、具体例を見た方が理解しやすいだろう。そこでまず、凸性の章で見たカラテオドリの定理 (定理 6.1) の近似版を考えることにしよう。カラテオドリの定理は、 $n$  次元空間中の凸集合の内部の点は、 $n+1$  個の端点の内分点で表せるという定理であった。また、少し考えることで、この凸集合が有限個の頂点を結んで作られる立体の場合、 $n+1$  個の端点を用いないと表せない点がほとんどすべてであることも分かる<sup>198</sup>。しかし、カラテオドリの定理を近似的なものに緩めれば、必要な点の数は劇的に少なくて済むようになる。

**問題：**ある凸集合が半径 1 の  $n$  次元球の中にある。このとき、この凸集合に含まれる任意の点  $\mathbf{x}$  について、その (2-ノルムの意味での)  $\frac{1}{\sqrt{k}}$  近似は、 $k$  個の端点の均等混合で実現可能である。すなわち、適切な  $k$  個の端点<sup>199</sup>  $\mathbf{z}_{i_1}, \dots, \mathbf{z}_{i_k}$  が存在し、

$$\left\| \mathbf{x} - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \mathbf{z}_{i_j} \right\|_2 \leq \frac{1}{\sqrt{k}} \quad (14.1)$$

が成り立つ。このことを示せ<sup>200</sup>。

**証明.** 任意の  $\mathbf{x}$  に対し、カラテオドリの定理より、 $n+1$  個の端点が存在し、 $\mathbf{x}$  はその内分で書ける。以下、添え字を振り直して、この  $n+1$  個の端点を  $\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_{n+1}$  とし、 $\mathbf{x}$  を与える内分の方法を  $\mathbf{x} = \sum_i \lambda_i \mathbf{z}_i$  とする。

ここで、確率  $\lambda_i$  で  $\mathbf{z}_i$  をとるような確率変数  $\mathbf{Z}$  を考える。構成より明らかに  $\langle \mathbf{Z} \rangle = \mathbf{x}$  である。この確率変数を  $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_k$  と  $k$  個生成し、その経験平均  $\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{Z}_i$  を考える。大数の法則により、 $k$  を大きくする極限でこの量は  $\mathbf{x}$  に確率 1 で収束する。この振る舞いをきちんと評価することで、証明したい式 (14.1) を示す。

経験平均の  $\mathbf{x}$  からの 2-ノルムの誤差の平均は

$$\left\langle \left\| \mathbf{x} - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{Z}_i \right\|_2^2 \right\rangle = \frac{1}{k^2} \left\langle \left\| \sum_{i=1}^k (\mathbf{Z}_i - \langle \mathbf{Z} \rangle) \right\|_2^2 \right\rangle = \frac{1}{k^2} \sum_{i=1}^k \langle \|\mathbf{Z}_i - \langle \mathbf{Z} \rangle\|_2^2 \rangle \leq \frac{1}{k} \langle \|\mathbf{Z}\|_2^2 \rangle \leq \frac{1}{k} \quad (14.2)$$

と評価できる。ここで、一つ目の等式では  $\mathbf{x} = \langle \mathbf{Z} \rangle$  を用いた。二つ目の等式では、独立な確率変数の和の分散は、各確率変数の分散の和に等しいことを用いた。最初の不等式は分散 (2 次キュムラント) よりも 2 次モーメントの方が大きいことを、最後の不等式は  $\mathbf{Z}$  が半径 1 の球内にあることを用いた。

<sup>198</sup>  $n$  個の端点の内分点で表せる空間は  $n$  次元空間までであり、これが  $n+1$  次元空間に占める体積はゼロである。

<sup>199</sup> ただし同じ端点を重複して用いることは許す。

<sup>200</sup> 以下の証明は、R. Vershynin, *High-Dimensional Probability*, Cambridge University Press の序章に基づく。

$\left| x - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Z_i \right|_2^2$  の平均が  $\frac{1}{k}$  を下回っているのだから、少なくとも一つの  $Z_1, \dots, Z_k$  の選び方において、 $\left| x - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Z_i \right|_2^2$  の値自体が  $\frac{1}{k}$  を下回る。よって示された。  $\square$

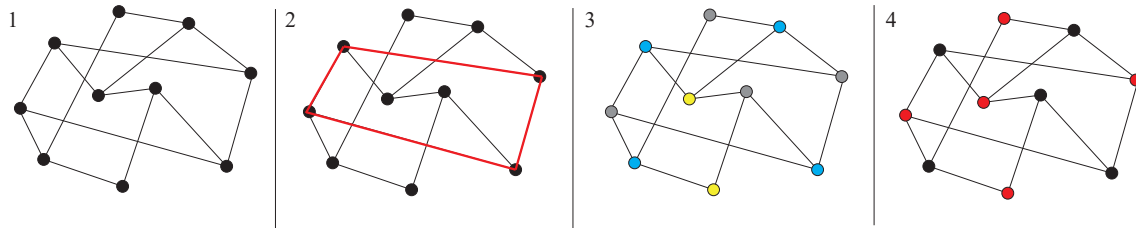


図 32: 1: グラフの例。2: グラフの内周。今回の場合、3-サイクルはなく、4-サイクル（赤線）は存在するので、このグラフの内周は 4 である。3: グラフの彩色。今回の場合、2-彩色は出来ず、図のように 3-彩色は可能なので、彩色数は 3 である。4: グラフの独立数。今回の場合、最大独立数は 5（赤色の頂点の集合）である。

別の具体例として、ある条件を満たすグラフの存在を示す問題を考えよう。頂点から辺を辿って自分自身に戻ってくる路を「サイクル (cycle)」と呼び、あるグラフの最短のサイクルの長さ<sup>201</sup> を「内周 (girth)」と呼ぶ。グラフ  $G$  の内周を  $g(G)$  と書くことにする。例えば図 32.1 のグラフでは、3-サイクル（三角形）はなく、4-サイクルは赤線のもの（図 32.2）が存在するので、このグラフの内周は 4 である。

また、辺で隣接する頂点同士は異なる色になるように頂点に色を塗る際に、必要となる色の種類の最小を「彩色数 (chromatic number)」と呼ぶ。グラフ  $G$  の彩色数を  $\chi(G)$  と書くことにする。例えば図 32.1 のグラフでは、2-彩色は不可能（5-サイクルがあるので）だが、3-彩色は図 32.3 のように可能なので、このグラフの彩色数は 3 である。

さらに、互いに隣接しない頂点からなる集合を「独立集合 (independent set)」と呼び、最大の独立集合の大きさを「最大独立数 (max independent number)」と呼ぶ。グラフ  $G$  の最大独立数を  $a(G)$  と書くことにする。例えば図 32.1 のグラフでは、図 32.4 で示されている赤い 5 頂点の集合が最大独立集合であり、そのため最大独立数は 5 である。グラフ彩色を行った際、ある一色が塗る頂点の集合は必ず独立集合となるので、頂点数は彩色数と最大独立数の積で上から押さえられる ( $|V| \leq \chi(G)a(G)$ ) ことが分かる。

彩色数が大きなグラフの例としては  $k$ -クリーク ( $k$ -完全グラフ: どの  $k$  個の頂点も、その他の  $k-1$  個の頂点と辺で結ばれているグラフ) が挙げられる。 $k$ -クリークの彩色数は  $k$  である。すなわち、このグラフを彩色するには全頂点を異なる色に塗る必要がある。クリークは 3-サイクルを含むので、クリークの内周は常に 3 である。

一方、内周が大きなグラフとしては、木 (tree: サイクルを一切含まないグラフ) が挙げられる（この場合は内周は無限大とする）。この場合、木グラフの彩色数は 2 である。つまり 2 色あれば塗り分けが可能である。

このように見ると、彩色数が大きいグラフは内周が小さく、内周が大きいグラフは彩色数が小さそうに見えるかもしれない。しかし、実はそうではないことが証明出来る。

**問題:** 任意の  $k$  について、彩色数が  $k$  より大きく、内周も  $k$  より大きいグラフが存在することを示せ<sup>202</sup>。

これは確率論的方法によって解かれる代表的な問題である<sup>203</sup>。証明は以下のように行う。まず適切な  $p$  のエルデシュ・レニーランダムグラフは、ほとんど確実に彩色数が非常に大きく、また短いサイクルも非常に少ないことが示せる。そこで、短いサイクルに含まれる頂点の一つずつ除去すると、短いサイクルは一切なく、また彩色数も大きなままであることが示せる。これが求めたいグラフである。

**証明.** 十分大きい頂点数  $n$ 、パラメータ  $p$  ( $n^{\epsilon-1} \geq p \geq (6k \ln n)/n$ ) のエルデシュ・レニーランダムグラフを考える。

<sup>201</sup>すべての辺の長さを 1 としている。なので、「長さ」は「通過した辺の数」とも言い換えられる。  
<sup>202</sup>以下の証明は、R. ディースティル『グラフ理論』丸善出版 第 11 章に基づく。  
<sup>203</sup>ただし、後にグラフを具体的に構成することにも成功している。L. Lovász, *On chromatic number of finite set-systems*, Acta Mathematica Academiae Scientiarum Hungarica volume 19, pages 59–67 (1968) ただしこの証明では、グラフのサイズがアッカーマン関数的に増大するので、例えば  $k=5$  のような大きさであってもそのグラフを具体的に書き下すのは極めて大変である。

まずこのグラフの彩色数を評価するため、我々はこのグラフの最大独立数の評価を行う。最大独立数が  $r$  以上であるためには、ある  $r$  個の頂点の組があり、その組の中にはただ一つも辺が引かれていない必要がある。ある固定した  $r$  個の組に対して辺が一つも引かれぬ確率は  $(1-p)^{r(r-1)/2}$ 、 $n$  個の頂点から  $r$  個の組を選ぶ場合の数は  $\binom{n}{r}$  なので、最大独立数が  $r$  以上である確率は

$$P[a \geq r] \leq \binom{n}{r} (1-p)^{r(r-1)/2} \leq \left(n(1-p)^{(r-1)/2}\right)^r \leq \left(ne^{-p(r-1)/2}\right)^r \quad (14.3)$$

と上から押さえられる。特に  $r \geq n/2k$  と選ぶと、 $pr \geq 3 \ln n$  なので、上の不等式の右辺は

$$\left(ne^{-p(r-1)/2}\right)^r \leq \left(n \cdot n^{-3/2} e^{p/2}\right)^r \leq \left(\frac{e}{n}\right)^{r/2} \quad (14.4)$$

と評価できる。ただし最後の不等式では  $p \leq 1$  を用いた。よって  $n \rightarrow \infty$  でこの右辺は ( $n^{-n}$  の速さで) 0 に収束する。すなわち、最大独立数は  $n$  が大きければほとんど確実に  $\frac{n}{2k}$  以下である。

一方、長さ  $l$  以下のサイクルの個数を  $X$  とすると、記号  $(n)_i := n(n-1)(n-2)\cdots(n-i+1)$  を用いて、 $X$  の期待値は

$$\langle X \rangle = \sum_{i=3}^l \frac{(n)_i}{2i} p^i \leq \frac{1}{2} \sum_{i=3}^l n^i p^i \leq \frac{l-2}{2} n^l p^l \quad (14.5)$$

と上から押さえられる。ただし  $(n)_i/2i$  は頂点数  $n$  のもとでの可能な長さ  $i$  のサイクルの総数である<sup>204</sup>。最後の不等式では  $np \geq 1$  が成り立つことを用いている。マルコフの不等式 (定理 12.1) を用いると、

$$P\left[X \geq \frac{n}{2}\right] \leq \frac{\langle X \rangle}{n/2} \leq (l-2)n^{l-1}p^l \leq (l-2)n^{\varepsilon l-1} \quad (14.6)$$

であり、右辺は  $n \rightarrow \infty$  極限でゼロになる<sup>205</sup>。すなわち、有限の長さ  $l$  以下のサイクルの数はほとんど確実に  $\frac{n}{2}$  個以下である。特に以降  $l = k$  と選ぶ。

以上の議論より、最大独立数  $\frac{n}{2k}$  以下、かつ長さ  $k$  以下のサイクルの数が  $\frac{n}{2}$  個以下のグラフは存在する。このグラフを  $G$  とする。このグラフから、長さ  $k$  以下のサイクル  $\frac{n}{2}$  個について、そのサイクルに含まれる頂点の中から1つを選んで取り除く (その頂点とつながっている辺もすべて取り除く)。このようにして作られるグラフを  $G'$  とする。 $G'$  は、 $n$  頂点のグラフ  $G$  から頂点  $\frac{n}{2}$  個を取り除いて作られているので、頂点数は  $\frac{n}{2}$  個である。 $G'$  は構成より、長さ  $k$  以下のサイクルを持たない。また、最大独立数は頂点を取り除いても増えない<sup>206</sup> ので、 $a(G') \leq a(G) \leq \frac{n}{2k}$  である。よって  $G'$  の彩色数は

$$\chi(G') \geq \frac{n/2}{a(G')} \geq k \quad (14.7)$$

である。よって  $G'$  は内周と彩色数がともに  $k$  以上である。 □

## 14.2 ロバースの局所補題の利用

前の章で見た確率論的手法は「(たとえわずかであっても) 有限の確率で発生する事象は存在する」という論法ではあったが、実際には「非常に高い確率で発生する事象」を用いたものだった。これに対し本節では、元々のイメージに近い、「非常に小さいが非ゼロの確率で発生する事象」を利用したタイプの存在証明を見ていく<sup>207</sup>。

着想となるのは次の事実である。 $m$  個の独立した事象  $\{A_i\}_{i=1}^m$  がそれぞれ確率  $0 < p_i < 1$  で発生する場合、どの事象も生じない確率は  $\prod_{i=1}^m (1-p_i)$  で、これは  $m$  が大きければ一般には指数的に小さいが、それでも有限である。そしてもちろん「どの事象も生じない」という状況は存在する。この議論には各事象が独立である必要があったが、完全に独立ではなくても「独立に近い」ならば同様の議論が成り立つ。それを支

<sup>204</sup>  $2i$  で割っているのは、出発点の選び方が  $i$  通り、サイクルをどの向きに回るのかの選び方が 2 通りあるためである。

<sup>205</sup>  $\varepsilon$  は  $0 < \varepsilon < \frac{1}{k}$  を満たすようにとる必要がある。

<sup>206</sup>  $G'$  の独立集合は、そのまま  $G$  の独立集合でもあるため。

<sup>207</sup> この節の内容は N. Alon and J. H. Spencer, *The probabilistic method*, Wiley の第 5 章に基づく。

えるのが以下の「ロバースの局所補題」である。この証明は次の節の補論で与える。

**定理 14.1** (ロバースの局所補題 (Lovász local lemma)).  $m$  個の事象  $\{A_i\}_{i=1}^m$  を考える。事象  $A_i$  と独立ではない事象の集合を  $\Gamma(A_i)$  と書くことにする。ここで、各事象ごとに数の割り当て  $0 \leq x_i < 1$  が存在し、任意の  $i$  について

$$P[A_i] \leq x_i \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \quad (14.8)$$

を満たすように出来るとする。このとき、事象  $A_i$  の否定を  $\bar{A}_i$  とすると、

$$P \left[ \bigcap_{i=1}^m \bar{A}_i \right] \geq \prod_{i=1}^m (1 - x_i) \quad (14.9)$$

が成り立つ。特にどの事象も生じない確率は真にゼロより大きい<sup>208</sup>。

多くの応用では、各事象  $A_i$  はいくつかの変数に依存して真偽が定まる命題である。この場合、 $A_i$  と独立でない事象とは、 $A_i$  と用いる変数を共有している事象のことである。

この補題がどのように役立つのかはこのままでは分かりにくいので、例題を見ることにしよう。

**問題** :  $m$  個の点と、これらが (互いに重なり合いを持ちうる) 多数の点の集合がある。どの集合も少なくとも  $k$  個の点を含み、またどの集合についても、その集合と共通要素を持つ集合の数は高々  $d$  個であるとする。このとき、 $e(d+1) \leq 2^{k-1}$  が成り立つなら、これら  $m$  個の点を 2 色に塗り分けて、どの集合も単色にならないように出来ることを示せ<sup>209</sup>。

**証明**.  $m$  個の点を赤または青に確率  $\frac{1}{2}$  ずつで塗ることにする。事象  $A_i$  として、 $i$  番目の集合の点の色が単色 (すべて赤、またはすべて青) という事象を選ぶ。明らかに、任意の  $i$  で  $P[A_i] \leq 1/2^{k-1}$  が成り立つ。そのため、すべての  $i$  において  $x_i = \frac{1}{d+1}$  と選べば

$$x_i \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \geq \frac{1}{d+1} \left(1 - \frac{1}{d+1}\right)^d \geq \frac{1}{(d+1)e} \geq \frac{1}{2^{k-1}} \geq P[A_i] \quad (14.10)$$

となり<sup>210</sup>、ロバースの局所補題の仮定が満たされる。よって、ロバースの局所補題により、事象  $A_i$  がどの  $i$  でも生じない、すなわちどの集合も単色にならない事象は有限の確率で発生するので、そのような塗り方は存在する。□

### 14.3 ロバースの局所補題の証明

この節ではロバースの局所補題の証明を行う。

まず、以下の補題を集合  $S$  のサイズ  $s = |S|$  についての数学的帰納法で示す。

**補題** : ロバースの局所補題の仮定が成り立つとする。任意の集合  $S \subset \{1, 2, \dots, n\}$  と  $i \notin S$  について、以下が成り立つ

$$P \left[ A_i \mid \bigcap_{j \in S} \bar{A}_j \right] \leq x_i \quad (14.11)$$

<sup>208</sup> ロバースの局所補題の証明は非構成的である。すなわち、「どの事象も生じないような具体的な構成方法」(例えば例題における「どの集合も単色にならない塗り方」)は、証明を追っても全く明らかにならない。

これに対し、ロバースの局所補題で存在が保証されている「どの事象も生じないような塗り方」を効率的に見つける「モーザー・タードスのアルゴリズム (Moser-Tardos algorithm)」というものが知られている。このアルゴリズムのルールは極めて単純であり、望ましくない事象が生じているのなら、その事象に関わる全変数をランダムに取り替える、という手続きを、すべての事象が生じなくなるまで繰り返す、というものである。(アルゴリズムの実装はとても単純であるが、このアルゴリズムが停止するまでにかかる時間が短いことを証明するのは易しくない)。

<sup>209</sup> この問題は「ハイパーグラフの 2 彩色問題」を言い換えたものである。

<sup>210</sup> 二番目の不等式は、逆数を考えると  $(1 + \frac{1}{d})^d \leq e$  を示せばよく、これは  $1 + \frac{1}{d} \leq e^{1/d}$  より直ちに示せる。



$s = 0$  の場合は自明なので、以下  $s = k$  の場合に成立すると仮定して、 $s = k + 1$  の場合に成り立つことを証明する。まず集合  $S$  を、 $A_i$  と独立でないもの ( $\Gamma(A_i)$  に含まれるもの)  $S_1$  と、 $A_i$  と独立なもの  $S_2$  に分ける。すると補題左辺は、条件付き確率の基本的な計算により

$$P \left[ A_i \mid \bigcap_{j \in S} \bar{A}_j \right] = \frac{P \left[ A_i \cap \left( \bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \right) \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right]}{P \left[ \bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right]} \quad (14.12)$$

と分かる。この分子と分母をそれぞれ評価する。

分子は

$$P \left[ A_i \cap \left( \bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \right) \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right] \leq P \left[ A_i \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right] = P[A_i] \leq x_i \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \quad (14.13)$$

と上から押さえられる。

次に分母を評価する。 $S_1$  が空集合の場合には、分母は 1 となり欲しい式が成り立つ。よって以下では  $S_1 = \{j_1, j_2, \dots, j_r\}$  は有限個の要素を持つとして、分母を評価する。分母は、確率の公式  $P[A_1, A_2 | B] = P[A_1 | B]P[A_2 | A_1, B]$  を繰り返し適用することにより、

$$\begin{aligned} P \left[ \bigcap_{j \in S_1} \bar{A}_j \mid \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right] &= \prod_{k=1}^r P \left[ \bar{A}_{j_k} \mid \bar{A}_1 \cap \dots \cap \bar{A}_{j_{k-1}} \cap \left( \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right) \right] \\ &= \prod_{k=1}^r \left( 1 - P \left[ A_{j_k} \mid \bar{A}_1 \cap \dots \cap \bar{A}_{j_{k-1}} \cap \left( \bigcap_{j \in S_2} \bar{A}_j \right) \right] \right) \\ &\geq \prod_{k=1}^r (1 - x_{j_k}) \\ &\geq \prod_{j \in \Gamma(A_i)} (1 - x_j) \end{aligned} \quad (14.14)$$

と評価できる。ただし 3 行目の不等式では  $S' = S_2 \cup \{1, 2, \dots, j_k - 1\}$  を  $S$  と置いて帰納法の仮定を用いた。最後の不等式では  $S_1 \subset \Gamma(A_i)$  を用いた。分子と分母の評価を代入することで、示したかった補題が  $s = k + 1$  でも成り立つことが言える。

ロバースの局所補題の証明。ロバースの局所補題の左辺  $P \left[ \bigcap_{i=1}^m \bar{A}_i \right]$  は、今示した補題を用いることで

$$P \left[ \bigcap_{i=1}^m \bar{A}_i \right] = \prod_{i=1}^m P \left[ \bar{A}_i \mid \bigcap_{j=1}^{i-1} \bar{A}_j \right] = \prod_{i=1}^m \left( 1 - P \left[ A_i \mid \bigcap_{j=1}^{i-1} \bar{A}_j \right] \right) \geq \prod_{i=1}^m (1 - x_i) \quad (14.15)$$

と示せる。 □

## 第 III 部

# フーリエ変換と特殊関数

## 15 線形空間論

この章では、これまで習った線形代数の枠組を、より抽象的かつ公理的な観点から構成し直す。数学科で習う線形代数は、このようなアプローチのものである。実は、フーリエ変換や直交多項式系の議論は、線形空間論の視点から見て、線形代数と同様の形で取り扱うことができる。そのため、ここでは公理的な線形空間論を概観することにする<sup>211</sup>。

### 15.1 代数

線形空間を導入する前に、群、環、体を簡単に導入しておこう。線形空間論の理解には必ずしも必要はない（以降の線形空間の例はすべて整数、実数、複素数を用いるので）が、群や体は物理でもよく登場するものなので、それを知っておくという意味も込めてここで紹介する。分からなければ、次の節まで飛ばしても構わない。

**定義 15.1 (群)**. 集合  $S$  と集合上の演算  $\circ (S \times S \rightarrow S)$  が、

- 結合法則  $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$  を満たす
- $a \circ e = e \circ a = a$  を満たす単位元  $e$  が存在する
- 任意の元  $a$  に対し、 $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$  を満たす逆元  $a^{-1}$  が存在する

とき、この代数系を「群 (group)」という。

さらに、交換法則 ( $a \circ b = b \circ a$ ) を満たすとき、その群は「可換群 (commutative group)」「加法群 (additive group)」「アーベル群 (Abelian group)」などと呼ばれる。

抽象的な定義を見ていてもよく分からないと思うので、具体例をいくつか見よう。

#### 例 1 : 巡回群 $\mathbb{Z}_n$

自然数  $n$  を一つ固定する。集合は  $\{0, 1, \dots, n-1\}$ 。演算は  $n$  で割った余りについての足し算。

#### 例 2 : 対称群 $S_n$

自然数  $n$  を一つ固定する。集合は  $n$  個の要素の置換全体。

ちなみに、置換の偶奇の性質により、偶置換全体も群をなす。これは「交代群  $A_n$ 」と呼ばれる。

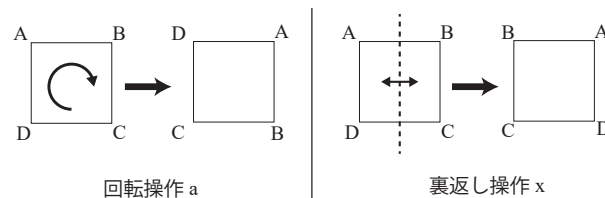


図 33: 二面体群  $D_8$  の二つの操作、90 度回転  $a$  と縦軸を対象軸とした裏返し  $x$ 。

#### 例 3 : 二面体群 (dihedral group) $D_{2n}$

<sup>211</sup>このような公理的な視点から線形代数を記述した教科書としては、斎藤毅『線形代数の世界 抽象数学の入り口 (大学数学の入門)』東京大学出版会、などがある。

集合は、正  $n$  角形の板に回転、または裏返しをほどこし、元と同じ形で重なるように写すような変換の集合。演算は、この変換を連続的に作用させて得られる変換。

例えば  $D_8$  は、正方形に対し、「回転」及び「縦方向を軸に裏返し」の操作を施して得られる変換全体の集合からなる (図 33 参照)。特に「時計回り 90 度回転をする操作  $a$ 」と「縦方向を軸に裏返しする操作  $x$ 」の二つの元だけで、可能な操作はすべて書くことが出来る。何も変化させない操作を特に  $e$  と書くことにすると、 $a^4 = x^2 = e$  が満たされる。

#### 例 4 : 剰余類の乗法群

自然数  $n$  を固定する。集合は、 $\{1, \dots, n-1\}$  のうち、 $n$  と互いに素なもの全体。演算は、二つの積を  $n$  で割った余り。これを  $\mathbb{Z}_n^*$  と書く。

例えば  $n = 12$  の場合、集合は  $\{1, 5, 7, 11\}$  からなり、 $5 \circ 7 = 11$  のようになる。

上記の例のうち、例 1 と例 4 は可換、例 2 と 3 は一般に非可換である。

ここまで見た例は、すべて要素が有限個の有限群であった。要素が無限個ある例もいくつか見ておこう。

#### 例 1 : 加法

集合は整数  $\mathbb{Z}$  または実数  $\mathbb{R}$ 。演算は通常の加法  $+$ 。

#### 例 2 : 行列の積

集合は  $n \times n$  の実行列で、行列式がゼロでないもの全体。演算は通常の行列の積。

#### 例 3 : 3 次元の回転群

集合は  $3 \times 3$  の実直交行列で、行列式が 1 であるもの全体。演算は通常の行列の積。これを  $SO(3)$  と書く<sup>212</sup>。

$SO(3)$  は「空間の回転を与える行列」である。以下の行列

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (15.1)$$

は  $z$  軸周り  $\theta$  回転を与えるものだが、 $xyz$  全ての軸で自由に回転させて、それをつないで作れる行列たちが  $SO(3)$  をなす。

#### 例 4 : 2 次元のユニタリ群

集合は  $2 \times 2$  のユニタリ行列で、行列式が 1 であるもの全体。演算は通常の行列の積。これを  $SU(2)$  と書く。

群では集合上に一種類の演算が定義されていたが、二種類の演算が定義されている代数系もある。

**定義 15.2 (環)**. 加法演算  $+$  の可換群の上に、さらに別の乗法演算  $\cdot (S \times S \rightarrow S)$  が定義されており、任意の  $a, b, c \in S$  について

- 乗法の結合法則  $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$  を満たす
- 乗法の単位元 ( $a \cdot e' = e' \cdot a = a$  を満たす  $e'$ ) が存在する
- 加法と乗法について分配法則  $(a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c, (a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c)$  を満たす

が成り立つとき、この代数系を「環 (ring)」という。

<sup>212</sup> $SO$  は special orthogonal の頭文字で、行列式が 1 であることを「特殊 (special)」と呼んでいる。

**定義 15.3 (体).** ある環が、さらに乗法について

- $e$  (加法の単位元) 以外の任意の元  $a \in S$  に対し、乗法の逆元 ( $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e'$  を満たす  $a^{-1}$ ) が存在する

を満たすとき、この代数系を「体 (field)」という。

**例 1: 足し算と掛け算**

集合として自然数  $\mathbb{Z}$  または実数  $\mathbb{R}$  をとり、通常の足し算及び掛け算を演算として選べば、これは体である。

**例 2: 行列**

集合として  $n \times n$  行列全体をとり、行列の足し算と掛け算をそれぞれ  $+$  と  $\cdot$  の定義とすれば、これは環である。この場合、加法の単位元はゼロ行列  $O$ 、乗法の単位元は単位行列  $E$  である。

**例 3:  $p$  元体**

$p$  を素数とする。集合として  $\{0, 1, \dots, p-1\}$  をとる。加法と乗法として、それぞれ  $p$  で割った余りの意味での足し算と掛け算を選ぶ。するとこの代数系は体である。(加法の単位元は  $0$ 、乗法の単位元は  $1$ ) この体を「 $p$  元体」と呼び  $F_p$  と書く。

**例 4: 多項式環**

可換環  $A$  が与えられたとする。(例えば  $A$  は整数  $\mathbb{Z}$  や実数  $\mathbb{R}$  などである)

$A$  の元を係数に持つ未知変数  $x$  の多項式  $\sum_{n=0}^N a_n x^n$  ( $a_n \in A$ ) 全体の集合を考え、加法と乗法を通常多項式の足し算と掛け算とすると、これは環となる。

ちなみに、多項式の割り算とその余りの計算を用いると、例えば「多項式を  $5x^3 - 3x^2 + 2x - 4$  で割った余りの多項式 (加法と乗法は通常多項式の足し算と掛け算の余りとする)」というものを考えることができる。これもまた環となる。この例の場合、集合は 2 次以下の多項式全体の集合である。

**例 5: 拡大体**

有理数全体の集合  $\mathbb{Q}$  に、新しい文字  $X$  を追加し、 $a + bX$  ( $a, b \in \mathbb{Q}$ ) と書かれる式全体の集合を考える。ただし  $X$  は  $X^2 = 3$  という関係式を満たすものとする。通常の足し算と掛け算を加法と乗法とすると、これは体となる。

$X$  の性質から明らかなように、これは  $a + b\sqrt{3}$  と書ける数全体の集合である。これを有理数体の拡大体と呼び、 $\mathbb{Q}(\sqrt{3})$  と書く。

代数の分野では、群などの公理を出発点にして、その公理を満たす任意の代数系が満たす性質を導出した、ありうる群としてどういうものがあるのかを解明したりしている。例えば、それ以上素因数分解できない数を「素数」というように、群においても、ある種「分解できないもの (=単純なもの)」を定義することができる。有限群の単純群は、完全なリストが得られている<sup>213</sup>。また、「5 次以上の方程式には、四則演算と  $n$  乗根だけでは表せない解を持つものがある」という有名な定理 (アーベルの定理) があるが、これは拡大体の理論を用いて証明される<sup>214</sup>。

## 15.2 線形空間

では線形空間 (ベクトル空間) を定義しよう。導入は極めて一般的な形で行う。以下、可換環  $A$  は整数  $\mathbb{Z}$ 、実数  $\mathbb{R}$ 、複素数  $\mathbb{C}$  などと置き換えて理解してもらいたい。

**定義 15.4 (A-加群).**  $A$  を可換環とする。集合  $V$  が加法  $+$  を持つ群 (可換群) であり、さらに任意の  $c, c' \in A$  と任意の元  $\psi, \phi \in V$  について以下の性質を満たすスカラー倍演算  $A \times V \rightarrow V$  が定義されているとき、 $V$  は  $A$ -加群であるという。ただしここで  $1 \in A$  は  $A$  の乗法の単位元である

<sup>213</sup>これは 20 世紀代数分野の最大の成果と言われている。

<sup>214</sup>むしろ歴史的には、この問題を取り扱うために群論や体論は発展した。

- 分配律： $(c + c')(\psi + \phi) = c\psi + c\phi + c'\psi + c'\phi$
- 複素数の乗法とスカラー倍の両立： $(cc')\psi = c(c'\psi)$
- 単位元 (identity element) の存在： $1 \cdot \psi = \psi$

特に  $A$  が体  $K$  であるとき、これを線形空間あるいはベクトル空間と呼ぶ。体  $K$  を強調する際には、 $K$  線形空間や  $K$  ベクトル空間などと呼ぶ。線形代数では特に  $K$  は実数  $\mathbb{R}$  や複素数  $\mathbb{C}$  であった。以降も特に  $K$  が  $\mathbb{R}$  や  $\mathbb{C}$  である場合を取り扱う。

#### 例 1： $n$ 次以下の実数係数多項式

$n$  次以下の実数係数多項式  $f(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$  は、 $A = \mathbb{R}$  として、自然に多項式の加法とスカラー倍を持つ。そのためこの空間は  $n + 1$  次元のベクトル空間をなす。

次数の上限  $n$  をなくして、任意の多項式や任意の関数についての空間を考えると、これは無限次元のベクトル空間となる。

#### 例 2：線形写像の Im と Ker

$V_1 \rightarrow V_2$  の線形変換  $f$  (分からなければ行列をベクトルにかけることだと思ってもらってもよい) について、 $f$  の核  $\text{Ker } f = \{a \in V_1 | f(a) = 0\}$  はベクトル空間である。また、 $f$  の像  $\text{Im } f = \{f(a) \in V_2 | a \in V_1\}$  もベクトル空間である。

#### 例 3：線形斉次微分方程式の解

(定数係数とは限らない) ある線形斉次微分方程式の解全体の集合を考える。例えば

$$2 \frac{d^2}{dx^2} f(x) + x^3 \frac{d}{dx} f(x) + 4e^x f(x) = 0 \quad (15.2)$$

は線形斉次微分方程式である<sup>215</sup>。すると、微分方程式の線形性により、「二つの解を足したもの」及び「解を定数倍したもの」もまた、同じ微分方程式の解である。よってこれはベクトル空間である。

ベクトルはこれまでは「数を並べたもの」と認識していたかもしれないが、数学的には「まず集合があり、それに（加法とスカラー倍という）演算を入れることでベクトルになる」のである。

なお、例 1 では数を並べたベクトルとの自然な対応関係がつけられたが、例 2 や例 3 ではそのベクトル空間がどういうものかが必ずしも分かっていない場合もある。しかしその場合でも、加法とスカラー倍で閉じていることが確認できるので、ベクトル空間の理論を問題なく適用することができる。

線形独立性、基底、次元などの定義は、これまでは数を並べたベクトルを念頭に置いて定義されていたと思うが、これらもすべて一般のベクトル空間に対して定義できる。

**定義 15.5** (線形独立).  $K$  ベクトル空間  $V$  の元  $x_1, \dots, x_m \in V$  が「線形独立 (linear independent)」であるとは、 $a_1, \dots, a_m \in K$  について

$$a_1 x_1 + \dots + a_m x_m = 0 \Rightarrow a_1 = \dots = a_m = 0 \quad (15.3)$$

が成り立つことをいう。ただし左の  $0$  はベクトル空間  $V$  の単位元、右の  $0$  は体  $K$  の単位元である。

線形独立でない場合、その元の組は「線形従属」であるという。

<sup>215</sup>線形性はあくまでも  $f(x)$  に対して議論している点に注意、係数  $x^3$  や  $4e^x$  は  $x$  について非線形な関数だが、それは関係ない。

**定義 15.6 (基底).**  $K$  ベクトル空間  $V$  の元の組  $x_1, \dots, x_m \in V$  で、任意の元  $v \in V$  に対し

$$v = a_1x_1 + \dots + a_mx_m \quad (15.4)$$

を満たす  $a_1, \dots, a_m \in K$  がただ一つだけ存在するとき、この元の組  $x_1, \dots, x_m \in V$  はこのベクトル空間の「基底 (basis)」であるという。

また、基底を構成する元の数  $m$  を、そのベクトル空間  $V$  の「次元 (dimension)」という<sup>216</sup>。

行列は線形変換として導入できるが、これはそのまま一般の  $K$  ベクトル空間に対しても拡張できる。

**定義 15.7 (線形写像).**  $K$  線形空間  $V, W$  を考える。写像  $f: V \rightarrow W$  が「線形写像 (linear mapping)」あるいは「線形変換 (linear transformation)」であるとは、以下の条件が満たされることをいう。

- 任意の  $x, y \in V$  について、 $f(x + y) = f(x) + f(y)$
- 任意の  $x \in V$  および任意の  $a \in K$  について、 $f(ax) = af(x)$

例 1: 微分

$V$  を  $x$  を変数に持つ実係数多項式の空間とする。このとき、微分演算子  $D = \frac{d}{dx}$  は、 $V \rightarrow V$  の線形写像である

[15-1]. 複素数  $\mathbb{C}$  を、 $x = a + bi \rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  と 2次元実ベクトル  $\mathbb{R}^2$  で表す。このとき、ある与えられた複素数  $\gamma$  をかける操作  $y = \gamma x$  は、2次元実ベクトル  $\mathbb{R}^2$  の表現ではどのように表されるか。

### 15.3 内積空間

次に内積を導入しよう。以下、体  $K$  は複素数  $\mathbb{C}$  で考える。実数  $\mathbb{R}$  の場合への拡張は容易である。

**定義 15.8 (内積空間).** ベクトル空間において、以下の性質を満たす「二つの集合の元  $\psi, \phi \in V$  を引数に持ち、数を入力する写像  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 」が定義されているとき、集合  $V$  は「内積空間」であるという。

- 半双線形性 (sesquilinearity) : 任意の元  $\psi, \phi, \eta \in V$  と任意の複素数  $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$  に対し

$$\langle \psi, c_1\phi + c_2\eta \rangle = c_1 \langle \psi, \phi \rangle + c_2 \langle \psi, \eta \rangle \quad (15.5)$$

$$\langle c_1\psi + c_2\phi, \eta \rangle = c_1^* \langle \psi, \eta \rangle + c_2^* \langle \phi, \eta \rangle \quad (15.6)$$

ただし  $c^*$  は  $c$  の複素共役である。

- エルミート (Hermitian) 性 : 内積の二つの引数を入れ替えたものは複素共役となる

$$\{\langle \psi, \phi \rangle\}^* = \langle \phi, \psi \rangle. \quad (15.7)$$

- 正値性 (positivity) :  $\phi = \psi$  のとき、

$$\langle \psi, \psi \rangle \geq 0 \quad (15.8)$$

特に等号が成り立つ元  $\psi$  はただ一つ存在し、それはゼロベクトル  $0$  である。

<sup>216</sup>ここでは証明しないが、次元が well-defined であること (次元が基底によらず一意であること) は証明出来る。

線形代数の講義で導入されたベクトル同士の内積はもちろんこの定義を満たしている。また、これを自然に関数に拡張したものとして

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int dx f^*(x)g(x) \quad (15.9)$$

という内積もよく知られている。

その他の例として、以下のようなものがある。

#### 例1：重み付き内積

$-\infty < x < \infty$  上で定義された関数  $f(x)$ 、 $g(x)$  の内積として

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)\rho(x) \quad (15.10)$$

という形のを考えよう。ただし  $\rho(x)$  は重み付けを行う関数である。これは内積の公理をすべて満たしている。重み付き内積は後の章で学ぶ直交多項式の基礎にある。

#### 例2：ヒルベルト・シュミット内積

正方行列  $A, B$  に対し、以下の量

$$\langle A, B \rangle := \text{Tr}[A^\dagger B] \quad (15.11)$$

は内積の公理を満たす。これは「ヒルベルト・シュミット内積 (Hilbert-Schmidt inner product)」と呼ばれる<sup>217</sup>。

内積が与えられれば、これに基づいてグラム・シュミットの正規直交化法を適用することができる。グラム・シュミットの正規直交化法は、与えられた基底から正規直交基底を構成する手続きであった。これもまた、一般の内積に対してもそのまま拡張できる。

例として、重み付き内積 (15.10) で  $\rho(x) = e^{-x^2}$  と選んだ

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)e^{-x^2} \quad (15.12)$$

というものを考えよう。これに対し、 $1, x, x^2, \dots$  という多項式の列に順にグラム・シュミットの正規直交化法を適用していこう。そうすると、この重み付き内積の意味で互いに直交している  $n$  次多項式  $H_n(x)$  が得られる。慣習上、ノルムを1ではなく

$$\langle H_n(x), H_n(x) \rangle = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (15.13)$$

と規格化すると、順に

$$H_0(x) = 1 \quad (15.14)$$

$$H_1(x) = 2x \quad (15.15)$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \quad (15.16)$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \quad (15.17)$$

⋮

と多項式が得られる。これらの多項式は「エルミート多項式 (Hermite polynomial)」という。エルミート多項式は、量子力学の調和振動子 (量子版のばね) を解く際に出てくるものであり、後の直交多項式の章で詳しく議論する。

<sup>217</sup>これは、有限次元の行列に限らず、より一般にヒルベルト空間のヒルベルト・シュミット作用素に対して定義される。

## 15.4 双対空間

体  $K$  に対するベクトル空間  $V$  が与えられているとする。このとき、ベクトル空間  $V$  から  $K$  への線形写像  $f$  全体のなす空間  $V^*$  を考える。これに対しては、以下のように自然に加法とスカラー倍が定義できる。ただし  $f, g \in V^*$ 、 $c \in K$ 、 $x \in V$  とする。

$$h = f + g \iff h(x) := f(x) + g(x) \quad (15.18)$$

$$h = cf \iff h(x) := cf(x) \quad (15.19)$$

そのため、この空間  $V^*$  はベクトル空間である。

**定義 15.9** (双対空間). ベクトル空間  $V$  から  $K$  への線形写像  $f$  全体のなすベクトル空間  $V^*$  のことを、ベクトル空間  $V$  の「双対空間 (dual space)」と呼ぶ。

ベクトル空間  $V$  に基底  $x_1, \dots, x_N$  が入っているとき、これに対応する双対空間の自然な基底  $f_1, \dots, f_N$  として

$$f_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (15.20)$$

というものを考えることができる。ただし 1 及び 0 はそれぞれ  $K$  における乗法及び加法の単位元である。この基底を、基底  $x_1, \dots, x_N$  の「双対基底」という。(なお、双対空間や双対基底は、内積なしで定義することに注意しておく)

次の章で見ると、フーリエ変換とその逆変換は、関数空間とその双対空間を行き来する関係になっている。ただしこの場合には無限次元なので、数学的に厳密な取り扱いをする際には、有限次元のベクトルの場合よりもいろいろな注意が必要になる。

[15-2]. 有限次元のベクトルの場合、適切に規格化された左固有ベクトルが、右固有ベクトルの双対基底をなすことを確認せよ。

## 15.5 スペクトル定理

一般のベクトル空間から自身への線形写像  $A: V \rightarrow V$  に対しても、固有値や固有ベクトルに相当する概念を定義できる。線形変換  $A$  について、 $\lambda \in K$  の「固有空間 (eigenspace)」を

$$V_\lambda := \{x | (A - \lambda I)x = 0\} \quad (15.21)$$

で定義する。ただし  $I$  は恒等変換である。固有空間は部分ベクトル空間である。またこの一般化として、

$$\tilde{V}_\lambda := \{x | (A - \lambda I)^m x = 0, \exists m > 0\} \quad (15.22)$$

という空間を考えることも出来る。これは「一般化固有空間」と呼ばれる。

すると、有限次元ベクトル空間で  $K$  が代数的に閉じている場合、一般化固有空間全体の直和で、元のベクトル空間は記述できる。これは定理 2.7 のスペクトル定理の一般化であり、証明も定理 2.7 と同様にして示せる。

**定理 15.1** (スペクトル定理 (spectral theorem)). 任意の  $V \rightarrow V$  の線形写像  $A$  について、 $A$  の一般化固有空間たちの直和は  $V$  と一致する。つまり

$$V = \tilde{V}_{\lambda_1} \oplus \tilde{V}_{\lambda_2} \oplus \tilde{V}_{\lambda_3} \oplus \dots \quad (15.23)$$



これがジョルダン標準形を与えることはすでに見た。ここでは、このジョルダン標準形が、定数係数線形齊次微分方程式の一般解と関係していることを見よう。

定数係数線形齊次微分方程式

$$a_n \frac{d^n}{dx^n} f(x) + a_{n-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} f(x) + \cdots + a_1 \frac{d}{dx} f(x) + a_0 f(x) = 0 \quad (15.24)$$

の一般解は、対応する  $n$  次方程式が

$$a_n t^n + a_{n-1} t^{n-1} + a_1 t + a_0 = \prod_{i=1}^k (t - \lambda_k)^{n_k} \quad (15.25)$$

と因数分解される（解  $\lambda_k$  が  $n_k$  重解である）とき、これを用いて

$$f(x) = \sum_{i=1}^k e^{\lambda_k x} (c_{k,n_k-1} x^{n_k-1} + c_{k,n_k-2} x^{n_k-2} + \cdots + c_{k,1} x + c_0) \quad (15.26)$$

と書けることが知られている（気になる人は代入して確認してみよう）。そして実は、これはスペクトル定理と対応している。

既にみたように、（定数係数）線形齊次微分方程式の解全体はベクトル空間をなす。これを  $V$  とする。すると、微分演算子  $D := \frac{d}{dt}$  は、 $V \rightarrow V$  の線形写像を与える<sup>218</sup>。そのため、 $D$  に対するスペクトル定理を考えることにより、解の空間は

$$\left( \frac{d}{dt} - \lambda_i \right)^m f(x) = 0 \quad (15.27)$$

の形で書ける解の線形結合で与えられることが分かる。さらに、ジョルダンブロック (2.35) について、変換  $X^{[i,i]} - \lambda_i I$  は

$$e_n \rightarrow e_{n-1} \rightarrow \cdots \rightarrow e_1 \rightarrow 0 \quad (15.28)$$

という変換をその空間の自然な基底に対して与えるが、このジョルダン標準形の構造をなぞるように、 $\left( \frac{d}{dt} - \lambda_i \right)$  の作用は

$$\frac{1}{n!} x^n e^{\lambda_i x} \rightarrow \frac{1}{(n-1)!} x^{n-1} e^{\lambda_i x} \rightarrow \cdots \rightarrow \frac{1}{2} x^2 e^{\lambda_i x} \rightarrow x e^{\lambda_i x} \rightarrow e^{\lambda_i x} \rightarrow 0 \quad (15.29)$$

と関数を変化させていく。つまり、これらが解の空間の基底を与える。特に  $\frac{1}{m!} x^m e^{\lambda_i x}$  は  $m+1$  階の一般化固有状態に相当する。

## 15.6 固有値問題とスツルム・リウヴィル型問題

線形代数では、与えられた行列  $A$  に対する固有値方程式

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad (15.30)$$

を解く問題に数多く直面した。特に  $A$  が半正定値エルミート行列ならば、固有値方程式を満たす  $\lambda$  は常に正の実数である。これを一般化して、微分方程式の場合で考えよう。

非負の重み  $\rho(x)$  を付けた重み付き内積 (15.10) の下で、演算子  $L$  として

$$Lf(x) = \frac{1}{\rho(x)} \left( \frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) \quad (15.31)$$

というものを考える。この演算子は、適切な積分範囲と境界条件<sup>219</sup> が設定されているという仮定の下で、

$$\langle g, Lf \rangle = \int dx g^*(x) \left( \frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) = \int dx \left( -\frac{dg^*(x)}{dx} \frac{df(x)}{dx} p(x) - g^*(x) f(x) q(x) \right) \quad (15.32)$$

<sup>218</sup> これは定数係数の場合のみの性質である

<sup>219</sup> 積分の境界で関数がゼロになる or 周期境界で値が一致する、などの条件が課されていて、部分積分を実行した際に境界項はゼロになるということ。

と計算できる。特に  $p(x), q(x)$  が非負ならば、右辺を見ることにより、

$$\langle f, Lf \rangle \leq 0 \quad (15.33)$$

と分かる。つまり、 $-L$  は半正定値 ( $L$  は半負定値) の演算子である。

以上を踏まえて、固有値方程式の一般化の一種である、スツルム・リウヴィルの固有値問題を導入する<sup>220</sup>。

**定義 15.10** (スツルム・リウヴィルの固有値問題 (Sturm–Liouville problem) )。  $p(x), q(x), \rho(x)$  は与えられた非負関数とする。このとき、以下の微分方程式

$$\rho(x)Lf(x) = \left( \frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) = -\lambda\rho(x)f(x) \quad (15.34)$$

を満たすような、適切な境界条件<sup>221</sup>を満たす  $f(x)$  と  $\lambda$  を求めよ、という問題を「スツルム・リウヴィルの固有値問題」という。

既に行った考察により、以下のことが分かる。

- $\lambda$  は非負の実数である
- 規格化された固有関数は正規直交基底をなす。

また、より詳しい考察により、以下のことが分かっている。

- $\lambda$  には上限はない
- 下から  $n$  番目の固有値  $\lambda_n$  に対応する固有関数  $f_n(x)$  は、ゼロ点を  $n - 1$  個持つ。

特殊関数で出会う微分方程式の多くはスツルム・リウヴィル型微分方程式なので、このように一般論があらかじめわかっているのは便利である。

<sup>220</sup> 見やすくするために、両辺に  $\rho(x)$  をかけて書くのが一般的である。

<sup>221</sup> 積分区間を  $[a, b]$  とすると、 $\theta_1, \theta_2$  を固定したうえで

$$\cos \theta_1 f(a) + \sin \theta_1 f'(a) = 0 \quad (15.35)$$

$$\cos \theta_2 f(b) + \sin \theta_2 f'(b) = 0 \quad (15.36)$$

という形の境界条件を課す。 $\theta = 0$  は  $f(x) = 0$  を意味し、これは「ディリクレ境界条件 (Dirichlet boundary condition)」という。 $\theta = \frac{\pi}{2}$  は  $f'(x) = 0$  を意味し、これは「ノイマン境界条件 (Neumann boundary condition)」という。

## 16 フーリエ級数

フーリエ級数展開は、基本的な考え方は「振動・波動論」ですでに習っている（あるいは自習している）はずである。また厳密な取り扱いやフーリエ級数の代表的応用である微分方程式の解き方は、「実解析学」や「偏微分方程式論」の講義で習うはずである。そうした講義と同じ内容をこの講義で扱ってもあまり意味はないので、ここでは簡単な復習をしたあとは、離散フーリエ変換の応用を詳しく見ることにする。

### 16.1 フーリエ級数展開の考え方

フーリエ級数展開でやりたいことは「周期関数を、周期関数の代表格である三角関数の和の形で表そう」というものである。フーリエ級数展開でカギになるのは、自然数  $n, m$  に対して成り立つ以下の関係式である<sup>222</sup>。

$$\int_0^{2\pi} dx \sin(nx) \sin(mx) = \begin{cases} 0 & : n \neq m \\ \pi & : n = m \end{cases} \quad (16.1)$$

$$\int_0^{2\pi} dx \cos(nx) \cos(mx) = \begin{cases} 0 & : n \neq m \\ \pi & : n = m \end{cases} \quad (16.2)$$

$$\int_0^{2\pi} dx \sin(nx) \cos(mx) = 0 \quad (16.3)$$

イメージとしては、三角関数の振動数がずれていると、途中で正負が互いに打ち消し合って積分がゼロになってしまう、という風に理解しておけばいい。

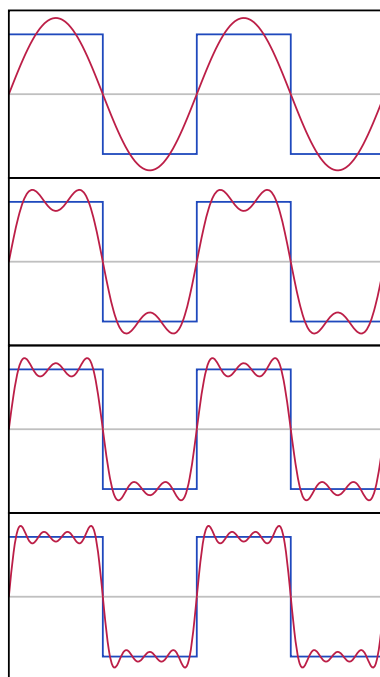


図 34: 方形波関数に対するフーリエ級数の例。適切な三角関数を足し合わせていくことで、方形波関数に近づいていく様子が見れる。画像は Wikipedia 「フーリエ級数」 より引用。

この関係があるため、もし  $f(x)$  が区間  $0 \leq x \leq 2\pi$  上の関数であり、

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin nx + \sum_{n=0}^{\infty} b_n \cos nx \quad (16.4)$$

<sup>222</sup>積和の公式を用いて変形すれば、これらの結果は簡単に示せる。

と書けていたとすると、

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) \sin nx \quad (16.5)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) \cos nx \quad (n \geq 1) \quad (16.6)$$

$$b_0 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) \quad (n = 0) \quad (16.7)$$

と、係数を  $f(x)$  から簡単に求めることが出来る。そのため逆に、一般の区間  $0 \leq x \leq 2\pi$  上の関数  $f(x)$  に対しても、式 (16.5)、(16.6) で係数を決めて、関数  $f$  は式 (16.4) 右辺のように展開できるだろうと考えるのは自然である。これを実行したのがフーリエ展開であり、その際の式 (16.4) 右辺をフーリエ級数という。フーリエ級数展開が何をしているのかは、方形波に対する図 34 などを見ると理解しやすいだろう<sup>223</sup>。

一般の場合に式 (16.4) 右辺が本当に左辺  $f(x)$  に収束するかはきちんとした議論が必要であり、数学的には高度な技術を要する部分もあるが、(物理の文脈で出会う) ほとんどのまともな関数では、フーリエ級数は元の関数に収束する (収束に関するデリケートな話題は 16.3 節で扱う)。

三角関数はオイラーの公式  $e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$  で指数関数に結び付けられるので、三角関数の代わりに指数関数を用いることが多い。この場合は

$$f(x) = \sum_n c_n e^{inx} \quad (16.8)$$

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx f(x) e^{-inx} \quad (16.9)$$

とフーリエ級数展開される。この場合は  $n \in \mathbb{Z}$  が波数である。この講義でも、以下では指数関数を用いたフーリエ変換の方を用いていく。

## 16.2 連続および離散フーリエ級数の性質

フーリエ変換は双対基底として理解することができる<sup>224</sup>。  $[0, 2\pi]$  の区間上の関数の空間を考える。この区間上の (適切な) 関数の空間<sup>225</sup> の基底として  $e_n(x) = e^{inx}$  ( $n \neq 0$ )、 $e_0(x) = 1$  というものがとれる。双対空間は、「 $[0, 2\pi]$  の区間上の関数から複素数  $\mathbb{C}$  への写像」のなす空間である。ここで、内積として

$$\langle f, g \rangle := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx f^*(x) g(x) \quad (16.10)$$

というものを考えると、基底  $\{e_n(x)\}$  の双対基底  $\{E_m[\cdot]\}$  は

$$E_m[f] := \langle e_m, f \rangle \quad (16.11)$$

と表せる。そうするとフーリエ級数展開は

$$f(x) = \sum_n E_n[f] e_n(x) \quad (16.12)$$

逆フーリエ変換は

$$G[\cdot] = \sum_n G[e_n] E_n[\cdot] \quad (16.13)$$

という一般的な形で表せる。この  $E_n[f]$  や  $G[e_n]$  は、フーリエ級数展開におけるフーリエ係数である。フーリエ変換にもう一度フーリエ変換を施すと元の関数に戻ることは、双対の双対は自分自身であることの特な場合である。

<sup>223</sup>ただし方形波のように不連続な関数の場合、フーリエ級数展開して得られる関数は、元の方形波の関数に各点収束はするが一樣収束せず、端に 1 割ほどの出っ張りが残り続けることが知られている。これは「ギブズ現象」と呼ばれており、詳しくは 16.3 節で扱う。

<sup>224</sup>より一般に、群に対するポントリャーギン双対性 (Pontryagin duality) の一例と見れる。

<sup>225</sup>任意の関数がフーリエ展開できるわけではないので、関数の空間を適切に制限する必要がある。

有限次元ベクトルの場合、左右の双対基底が（縦横を除けば）同じベクトル空間になったのと同様に、フーリエ変換の場合も元の空間の基底  $e_n(x)$  とその双対  $E_n[\cdot] = \langle e_n, \cdot \rangle$  は自然に同一視できる。そのため、両者を同一視して適宜混同した議論をしていく方が便利な場合が多く、本講義でもそのような方法を用いる。

ここまでは連続空間  $\mathbb{R}$  上のフーリエ変換を考えていた。ここでは  $\mathbb{Z}_2^{\otimes n} \rightarrow \mathbb{R}$  のブール関数<sup>226</sup> (Boolean function) を考えよう<sup>227</sup>。  $\mathbb{Z}_2$  は「2 で割った余りの足し算」あるいは「 $\pm 1$  の掛け算」と同一視できる。要素は、前者ならば  $\{0, 1\}$ 、後者ならば  $\{\pm 1\}$  である。二つの記法は、便利な方を用いればよい。

以下しばらく  $\{\pm 1\}$  の記法を用いる。ブール関数の重要な性質に、任意の関数が多項式で表示できる、というものがある。例えば、2 変数のブール関数で

$$f(x_1, x_2) = \max(x_1, x_2) \quad (16.14)$$

というものを考えよう。この関数は一見すると多項式的ではないが、実は

$$\max(x_1, x_2) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_1x_2 \quad (16.15)$$

と多項式で表せる。これはこの例に限らず一般に成り立つ性質である。このことを理解するには、 $a_1, \dots, a_n \in \{\pm 1\}$  に対する指示多項式 ( $\mathbf{x} = \mathbf{a}$  のときに限り 1、他の場合にはゼロをとる関数) が

$$1_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) = \left( \frac{1 + a_1x_1}{2} \right) \left( \frac{1 + a_2x_2}{2} \right) \dots \left( \frac{1 + a_nx_n}{2} \right) \quad (16.16)$$

と書けることを利用するとよい。これが指示関数であることは、 $(1 + ax)/2$  は  $a = x$  のとき 1、それ以外 ( $a = -x$ ) のとき 0 となることから明らかである。この表示を用いると、任意のブール関数  $f(\mathbf{x})$  は

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{a} \in \{\pm 1\}^n} f(\mathbf{a}) 1_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) \quad (16.17)$$

と展開できる。よって任意のブール関数は多項式表示を持つ。

さて、 $x_i^2 = 1$  であることから、各  $x_i$  は 1 次の項までしか現れない。よって多項式のありうる項は、各  $x_i$  が 0 個または 1 個出現するので、 $n$  変数ならば  $2^n$  個の項が現れる<sup>228</sup>。  $\{1, 2, \dots, n\}$  の部分集合  $S \subset \{1, \dots, n\}$  に対し、 $x^S$  で

$$x^S := \prod_{i \in S} x_i \quad (16.18)$$

を表すことにする。 $x^S$  たちは、 $n$  変数ブール関数の空間の基底をなす。これを用いて、ブール関数  $f$  のフーリエ変換とブール関数の空間の内積を以下のように定義する。

**定義 16.1** (ブール関数のフーリエ変換).  $\{\pm 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$  のブール関数  $f(\mathbf{x})$  のフーリエ変換を以下で定義する。

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{S \subset \{1, \dots, n\}} \hat{f}(S) x^S \quad (16.19)$$

$\hat{f}(S) \in \mathbb{R}$  がフーリエ係数である。

**定義 16.2** (ブール関数の内積).  $\{\pm 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$  のブール関数  $f(\mathbf{x}), g(\mathbf{x})$  の内積を以下で定義する。

$$\langle f, g \rangle := \frac{1}{2^n} \sum_{\mathbf{x} \in \{\pm 1\}^n} f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x}) \quad (16.20)$$

<sup>226</sup>ブール関数といった場合には、値域を  $\mathbb{R}$  ではなく  $\mathbb{Z}_2$  にする場合も多い。

<sup>227</sup>この節及び 16.6 節の内容は、R. O'Donnell, *Analysis of Boolean functions*, Cambridge university press を参照した

<sup>228</sup>この項数は、ありうる入力の場合の数  $2^n$  通りと一致している。

この定義が内積の公理を満たすことは容易に確認できる。すると、ブール関数のフーリエ係数は、実数に対するフーリエ変換と全く同様の形で、内積を用いて簡単に計算できることが分かる。

**定理 16.1.**  $x^S$  のフーリエ係数  $\hat{f}(S)$  は、以下で求まる。

$$\hat{f}(S) = \langle x^S, f \rangle \quad (16.21)$$

[16-1]. この定理を示せ。

[16-2].  $\max(x_1, x_2, x_3)$  をフーリエ級数展開せよ。

内積とフーリエ級数に関して成り立つ、プランシャールの定理を示しておこう。以下の証明から明らかのように、これは連続・離散を問わず、またそれ以外の場合にも一般の正規直交基底を用いた関数の展開に関して成り立つ結果である。

**定理 16.2** (プランシャールの定理 (Plancherel's theorem)).  $f(x) = \sum_n E_n[f]e_n(x)$  というフーリエ級数展開がなされているとする。ただし  $e_n$  は内積  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  の下での正規直交基底である。このとき、以下が成り立つ

$$\langle f, g \rangle = \sum_n E_n^*[f]E_n[g] \quad (16.22)$$

証明.

$$\langle f, g \rangle = \left\langle \sum_n E_n[f]e_n(x), \sum_m E_m[g]e_m(x) \right\rangle = \sum_{n,m} E_n^*[f]E_m[g] \langle e_n(x), e_m(x) \rangle = \sum_n E_n^*[f]E_n[g] \quad (16.23)$$

から従う。 □

特に  $f = g$  の場合の関係式

$$\langle f, f \rangle = \sum_n |E_n[f]|^2 \quad (16.24)$$

は「パーセヴァルの等式 (Parseval's identity)」と呼ばれる。

### 16.3 連続フーリエ変換の収束と特異性

ここまで、関数の空間が適切に定義されており、また関数がスムーズに収束することを暗黙の前提として、線形代数のときと同じように双対をとったりその表示を行き来したりできるかのように議論してきた。しかし、実空間のフーリエ変換では、収束性の問題などで極めてデリケートな事態が生じることが知られている。特に、「フーリエ変換して逆変換すると元の関数に戻る (フーリエ反転公式)」という性質が何らかの意味で成り立たない状況が生じうる。そのため、数学的に厳密な形でフーリエ変換を扱うことはなかなか面倒くさい<sup>229</sup>。

以下に、フーリエ変換が収束する場合・しない場合について、いくつか知られている結果をまとめておく<sup>230</sup>。 $S_N(x) := \sum_{n=0}^N a_n \sin nx + b_n \cos nx = \sum_{n=-N}^N c_n e^{inx}$  と定義する。 $\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(x) = f(x)$  がすべての  $x$  で成り立つとき、「フーリエ級数は  $f(x)$  に各点収束する」という。また、 $\lim_{N \rightarrow \infty} \max_x |S_N(x) - f(x)| = 0$  が成り立つとき、「フーリエ級数は  $f(x)$  に一様収束する」という。まず肯定的な結果について。

- $f(x)$  がリーマン可積分なら、測度ゼロの点を除いたほとんどすべての  $x$  について、フーリエ級数は  $f(x)$  に各点収束する (カルレソン (Carleson))。

<sup>229</sup>もう少し詳しくいうと、第  $n$  デリクレ核  $D_N(x) := \sum_{n=-N}^N e^{inx}$  が「良い核」ではなく、収束性が悪いことがさまじまな難しさを引き起こしている。

<sup>230</sup>詳細を知りたい人は、エリアス・M. スタイン、ラミ・シャカルチ『フーリエ解析入門』日本評論社などを読んで頂きたい。

- $f(x)$  が (1 回) 連続微分可能なら、フーリエ級数は  $f(x)$  に一様収束する。

一方で、後者の結果の「連続微分可能」を「連続」に置きなおすことはできない。

- $f(x)$  は連続だが、 $\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(x) \neq f(x)$  となる  $x$  が存在するような  $f(x)$  が存在する (デュ・ボア・レイモン (Du Bois Reymond))。

また、2次元以上の場合にはもっと厄介であることが分かっている。

- 2次元以上 ( $x \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ) の場合には、任意の  $p \neq 2$  について、フーリエ反転公式が  $L^p$  収束しない例が存在する<sup>231</sup> (フェファーマン (Fefferman))。

連続関数でフーリエ反転公式が成り立たない例は、極めて病的な例だが、不連続な関数の場合には一般にいろいろな問題が生じる。ここではその例として「ギブズ現象 (Gibbs phenomena)」を見ておこう。

ギブズ現象は、不連続関数のフーリエ変換において一般的にみられる現象である。分かりやすい例として、矩形波

$$f(x) := \begin{cases} 0 & x = 2n\pi \\ \frac{\pi}{4} & 2n\pi < x < (2n+1)\pi \\ 0 & x = (2n+1)\pi \\ -\frac{\pi}{4} & (2n+1)\pi < x < (2n+2)\pi \end{cases} \quad (16.25)$$

に対するフーリエ級数展開を考えよう (ただし  $n$  は整数)。すると、簡単な計算で

$$f(x) = \sin x + \frac{1}{3} \sin 3x + \frac{1}{5} \sin 5x + \dots \quad (16.26)$$

と書けることが分かる。また、部分和

$$f_n(x) := \sum_{j=0}^n \frac{1}{2j+1} \sin(2j+1)x \quad (16.27)$$

を定義すると、任意の  $x$  について

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x) \quad (16.28)$$

と各点収束することも証明できる。

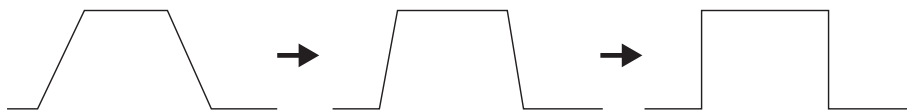


図 35: 矩形波のフーリエ変換の収束の仕方に対するナイーブな見方。台形の傾きがだんだん急になっていって矩形波に収束するだろうと考える人も多いだろうが、実は端の振る舞いはもっと複雑である。

一方、 $f_n(x)$  は  $f(x)$  には一様収束しない。一様収束しないこと自体は、フーリエ級数展開の右边が  $x$  の連続関数である一方、 $f(x)$  が不連続関数であることを考えれば、自然な帰結ではある。しかし、多くの人は、図 35 のように「台形のような波形が、ただどんどん傾きが急になる形で矩形波に収束していく」と思うのではないだろうか。ところが、実は正側の  $x = 0$  近傍において、 $\frac{\pi}{4}$  より真に「大きな」値をとり続ける点が存在し続けることが示せる。具体的には

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n\left(\frac{\pi}{n+1}\right) = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2} \cdot 0.089490\dots \quad (16.29)$$

<sup>231</sup> 反例の構成には「ベシコビッチ集合 (Besicovitch set)」というフラクタル図形が用いられる。「長さ 1 の線分を 2 次元平面内で 180 度回転させる際、線分が通過する領域の面積の最小値はどれだけか」という問題が「掛谷の問題」である。実は驚くべきことに、この問題は「面積ゼロに出来る」が答えである。そして、その際の通過領域がベシコビッチ集合である。

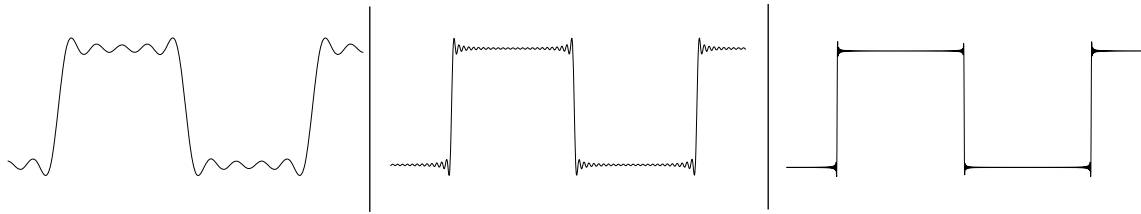


図 36: 左から順に、式 (16.27) の  $n = 5$ 、 $n = 25$ 、 $n = 125$  のプロット。矩形波の端の出っ張りが、 $n$  を大きくしても消えないことが分かる。画像は Wikipedia 「ギブズ現象」より引用。

となることが証明出来る。ただし  $0.089490\dots$  は

$$= 0.089490\dots = \int_0^\pi dx \frac{\sin x}{x} - \frac{\pi}{2} \quad (16.30)$$

によって定まる値である。要するに、反対側への（約 2 割ほどの）オーバーシュートが起きているのである。図 36 を見るとわかるように、 $x = 0$  近傍では出っ張りが発生しており、これは  $n$  をどれだけ大きくしても消えない。これは不連続点のフーリエ変換で一般的にみられる現象で、「ギブズ現象 (Gibbs phenomenon)」と呼ばれている。フーリエ変換を含む数値計算をする際には、注意しておく必要のある現象であろう。（なお、有限の出っ張りがあるにもかかわらず各点収束するのは、出っ張りの位置が  $n$  が大きくなるにつれてどんどん  $x = 0$  近傍に寄っていくからである）

なお式 (16.29) の証明は難しくない。 $g(x) := \frac{\sin x}{x}$  と置くと

$$f_n \left( \frac{\pi}{2(n+1)} \right) = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2j+1} \sin \left( \frac{2j+1}{2n+2} \pi \right) = \frac{1}{2n+2} \sum_{j=1}^n \frac{2n+2}{2j+1} \sin \left( \frac{2j+1}{2n+2} \pi \right) = \frac{\pi}{2n+2} \sum_{j=1}^n g \left( \frac{2j+1}{2n+2} \pi \right) \quad (16.31)$$

なので、 $n \rightarrow \infty$  極限で和を積分に置き換えることができ、右辺が  $\frac{1}{2} \int_0^\pi dx \frac{\sin x}{x}$  に収束することから示せる。

なお、高次元の場合には特異性はもっと激しくなることが知られている。3 次元以上の場合、半径 1 の単位球の特性関数（単位球内は 1、その外では 0 をとる関数）をフーリエ変換して逆変換すると、（不連続性のない）原点で発散が生じることが知られている（ピンスキー現象 (Pinsky phenomena)）。また、5 次元以上の場合には、任意の有理点で発散が生じることが知られている（倉坪現象）。

#### 16.4 デルタ関数とフーリエ変換

前節では数学的に厳密な話をしたが、この節では一転して数学的には極めていい加減だが、計算を進める上では非常に便利な、デルタ関数の取り扱いについて議論する。デルタ関数  $\delta(x)$  は、任意の関数  $g(x)$  と  $\varepsilon > 0$  に対し

$$\delta(x) = 0 \quad (x \neq 0) \quad (16.32)$$

$$\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} dx g(x) \delta(x) = g(0) \quad (16.33)$$

を満たす関数である（図 37）。イメージ的には、一点  $x = 0$  で無限大の値を、他の場所ではすべて 0 をとっていて、積分すると 1 になるような関数である。これは通常の意味での関数ではないが、超関数 (generalized function) 論の枠組では正当に取り扱うことができる。あるいは、量子力学では「ゲルファントの三つ組」という枠組で取り扱うことができる<sup>232</sup>。ここでは細かい点は気にせずに、デルタ関数を通常関数のようにとらえて議論を進める。

<sup>232</sup> 大変大雑把にいうと、これらの枠組は、デルタ関数のような「激しい関数」と、非常に滑らかな関数のような「行儀のよい関数」の積の積分のみを考えるのであれば、「激しい関数」も妥当な形で取り扱える、というものである。



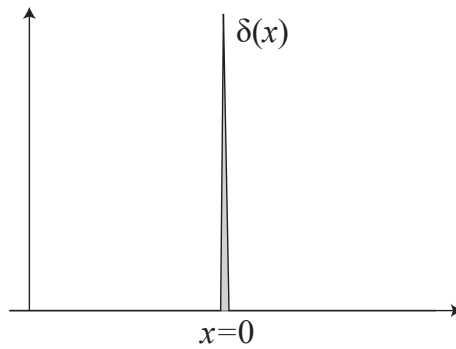


図 37: デルタ関数  $y = \delta(x)$  のイメージ図。点  $x = 0$  に、無限に細く無限に高いピークが立っている。グレーの領域の面積は 1 になるように、細さと高さの関係を保ちながら、幅をゼロ、高さを無限大に飛ばしている。

極限をとるとデルタ関数が得られる関数列は色々知られている。例えば

$$f_n(x) := \begin{cases} n & |x| \leq \frac{1}{2n} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (16.34)$$

$$g_n(x) := \frac{\sin nx}{\pi x} \quad (16.35)$$

$$h_n(x) := \sqrt{\frac{n}{\pi}} e^{-nx^2} \quad (16.36)$$

はすべて  $n \rightarrow \infty$  でデルタ関数に収束する。

デルタ関数は、引数がゼロになる場所での「速度」も重要である。例えば

$$\int_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon} dx g(x) \delta(ax) = \int_{0-\varepsilon/a}^{0+\varepsilon/a} dy \frac{1}{a} g\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y) = \frac{1}{|a|} g(0) \quad (16.37)$$

なので、

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (16.38)$$

という関係式が成り立つ。 $x = 0$  を通過する「速度」が  $ax$  だと  $a$  倍になっているので、積分して得られる値が  $\frac{1}{a}$  倍になってしまう、というイメージである。 $a$  が負の場合は積分範囲が負から正の方向になるので、符号が打ち消し合う。

[16-3].  $a > 0$  に対し、以下の関係を示せ。

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a} (\delta(x - a) + \delta(x + a)) \quad (16.39)$$

デルタ関数のフーリエ変換は、直接計算すると

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \quad (16.40)$$

と分かる。ただし  $k$  は適切な範囲<sup>233</sup> の積分または和である。これは、フーリエ変換の逆変換の式

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikt} \int ds f(s) e^{iks} = \frac{1}{2\pi} \int ds f(s) \int dk e^{ik(s-t)} \quad (16.41)$$

からも見て取ることができる関係式である。

<sup>233</sup> 周期境界条件の有限区間の場合には、 $k$  は離散的である。

## 16.5 フーリエ変換のラプラス近似への応用

フーリエ変換の一つの応用として、9.3節で見たラプラス近似と組み合わせる方法がある。ここではその一つの詳細を見ることにしよう。

和が偶数であるような<sup>234</sup> 与えられた整数  $x_1, \dots, x_n$  に対し、二つの和が一致するように二つの集合に分ける方法を探そう。すなわち

$$\sum_{i \in S} x_i = \sum_{i \notin S} x_i \quad (16.42)$$

となるような集合  $S$  を探すという問題である。例えば

$$1, 3, 9, 14, 23, 28, 32, 40$$

が与えられたとすると、

$$1 + 9 + 14 + 23 + 28 = 3 + 32 + 40 \quad (16.43)$$

と分割すればよい。この問題は「整数分割問題 (integer partitioning problem)」と呼ばれ、一般の場合にそのような分割が存在するかを判定するのは難しい問題であることが知られている<sup>235</sup>。

我々は今回、整数がランダムに与えられた際に、このような分割の方法が平均していくつあるかを考察したい。

問題:  $x_1, \dots, x_n$  として、 $\{0, 1, 2, \dots, B-1\}$  の整数を等確率でランダムに選ぶ。この状況における整数分割の方法は平均して何通りあるか。

我々が知りたい量は

$$Z = \frac{1}{2} \sum_{\{\pm\}^n} \chi(\pm x_1 \pm x_2 \pm x_3 \pm \dots \pm x_n) \quad (16.44)$$

の期待値  $\mathbb{E}[Z]$  と言い換えることができる。ただし  $\chi(x)$  は  $x = 0$  のときに 1 を、それ以外のときには 0 をとる関数とする。ここで、関数  $Z$  をフーリエ変換しよう。デルタ関数のフーリエ変換を思い出すと、整数値をとる  $x$  についての  $\chi(x)$  のフーリエ変換は

$$\chi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{ix\theta} \quad (16.45)$$

と書ける。そのため、 $Z$  のフーリエ変換は

$$Z = \frac{1}{2} \sum_{\{\pm\}^n} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i(\pm x_1 \pm \dots \pm x_n)\theta} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \prod_{i=1}^n (e^{ix_i\theta} + e^{-ix_i\theta}) \quad (16.46)$$

となり、特に  $x_i$  に関する項の積の形で書ける。この期待値を求めるには、各  $x_i$  について平均を取ればよい。

$$f(\theta) = \mathbb{E}[e^{ix\theta} + e^{-ix\theta}] = \frac{1}{B} \sum_{x=0}^{B-1} (e^{ix\theta} + e^{-ix\theta}) = \frac{1}{B} \left( \frac{e^{iB\theta} - 1}{e^{i\theta} - 1} + \frac{e^{-iB\theta} - 1}{e^{-i\theta} - 1} \right) = \frac{1}{2B} \left( 1 + \frac{\sin(B - \frac{1}{2})\theta}{\sin \frac{\theta}{2}} \right) \quad (16.47)$$

と計算できるので、

$$\mathbb{E}[Z] = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{n \ln f(\theta)} \quad (16.48)$$

とラプラス近似の形に持ち込める。 $f(\theta)$  は  $\theta = 0$  で最大値を取り、

$$f(0) = 2 \quad (16.49)$$

$$f''(0) = -\frac{2}{3}B^2 + O(B) \quad (16.50)$$

<sup>234</sup>和が奇数だと、そもそも和が一致するように二つの集合に分けることができない。和が奇数の場合には、二つの集合における和について、その差が 1 になるように分割する方法を考えるのが通例である。

<sup>235</sup>計算量クラスでいうと、NP 困難に属する問題である。

なので、

$$\mathbb{E}[Z] \simeq \frac{2^{n-1}}{B} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{3}\pi n}} \quad (16.51)$$

と分割数を推定できる<sup>236</sup>

## 16.6 離散フーリエ変換の応用

離散フーリエ変換もいろいろな応用が存在する<sup>237</sup>。ここでは簡単な例として、ほとんど線形な関数の検証を見てみよう<sup>238</sup>。関数の線形性には、以下の二通りの特徴づけがある。

1.  $f(x) + f(y) = f(x+y)$  が成り立つ。
2.  $f(x) = ax$  と書ける。

ただし  $\mathbb{Z}_2$  を  $\{\pm 1\}$  で記述している場合には、最初の特徴づけは  $f(x)f(y) = f(xy)$  と書き直される。これらが近似的に成り立つというのは、以下のような状況である。

1. 大半の  $x, y$  の組に対し、 $f(x) + f(y) = f(x+y)$  が成り立つ。
2. 大半の  $x$  について、 $f(x) = ax$  と書ける。

2 ならば 1 が成り立つのは明らかである。我々はその逆、すなわち 1 ならば 2 が成り立つのかを考えたい。結論からいうと、これは成り立つことが示せる。以下、表記は  $\{\pm 1\}$  のものを用いる。

**問題** :  $x, y \in \mathbb{Z}_2^N$  を等確率でランダムに選ぶと、 $f(x)f(y) = f(xy)$  が確率  $p > \frac{1}{2}$  で成り立つとする。このとき、ある  $a$  が存在し、確率  $p$  以上で  $f(x) = ax$  と書けることを示せ。

**証明**. 仮定  $P[f(x)f(y) = f(xy)] = p =: \frac{1}{2} + q$  から、 $\mathbb{E}[f(x)f(y)f(xy)] = 2q$  が言える。これをフーリエ級数展開すると

$$\begin{aligned} 2q &\leq \mathbb{E}[f(x)f(y)f(xy)] \\ &= \mathbb{E}\left[\sum_{n,m,k} E_n[f]e_n(x)E_m[f]e_m(y)E_k[f]e_k(xy)\right] \\ &= \sum_{n,m,k} E_n[f]E_m[f]E_k[f]\mathbb{E}[e_n(x)e_k(x)]\mathbb{E}[e_m(y)e_k(y)] \\ &= \sum_n (E_n[f])^3 \end{aligned} \quad (16.52)$$

が得られる。ここで 3 行目では  $e_k(xy) = e_k(x)e_k(y)$  が成り立つことを、4 行目ではプランシャールの定理により  $\mathbb{E}[e_n(x)e_k(x)] = \langle e_n, e_k \rangle = \delta_{n,k}$  であることを用いた。パーセヴァルの等式により

$$\sum_n (E_n[f])^3 \leq \max_n E_n[f] \sum_{n'} (E_{n'}[f])^2 = \max_n E_n[f] \quad (16.53)$$

が成り立つので、すべてつなぎ合わせると  $2q \leq \max_n E_n[f]$  と分かる。

最大値を与える  $n$  を  $n^*$  とする。指示関数  $e_{n^*}(x)$  自体が線形関数であることに注意する。これと  $f$  との内積は

$$\frac{1}{2^N} \sum_x e_{n^*}(x)f(x) = \langle e_{n^*}, f \rangle = E_{n^*}[f] \geq 2q \quad (16.54)$$

である。これは、少なくとも確率  $\frac{1}{2} + q = p$  で、 $f(x)$  と線形関数  $e_{n^*}(x)$  の結果が一致することを意味している。□

<sup>236</sup> ちなみに、この計算を利用して、分割が可能/不可能の転移点を厳密に求めることも出来る。12.2 節で見たモーメント法と閾値定理の方法に従うと、ここでの計算は一次モーメント法による上からの評価として機能する。二次モーメント法による下からの評価はもう少し丁寧な計算が必要だが、同様に評価することができる。詳細を知りたい人は、C. Moore and S. Mertens, *The nature of computation*, Oxford university press, Sec.14.5 を見てもらいたい。

<sup>237</sup> 有限群上のフーリエ変換は、群の指標を用いて記述されるため、群のいろいろな性質と結びつく。

<sup>238</sup> この問題が何の役に立つのか、一見するとよく分からないと思うが、実はこれは Long code とその検証という、計算機科学(計算量理論)でよく用いられている技法に出現するものである。PCP 定理を軸とした「いくつかの難しい組合せ最適化問題は、近似的にさえ効率的に解くことができない」という結果を証明する際に、Long code が用いられている。

## 17 直交多項式系

一般の直交多項式系 (system of orthogonal polynomials) は、15.3 節で見たように、重み付き内積 (15.10) (以下再掲)

$$\langle f(x), g(x) \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f^*(x)g(x)\rho(x) \quad (17.1)$$

を用いて、 $1, x, x^2, \dots$  に対してグラム・シュミットの正規直交化法を適用して得られるもののことである。

直交多項式系は  $\rho(x)$  の種類だけ存在するが、ここでは特に、スツルム・リュウビル型微分方程式 (15.34) (以下再掲)

$$\rho(x)Lf(x) = \left( \frac{d}{dx}p(x)\frac{d}{dx} - q(x) \right) f(x) = -\lambda\rho(x)f(x) \quad (17.2)$$

を満たすクラスである「古典的直交多項式」に対象を限定する。古典的直交多項式は、実は本質的には3種類しか存在しないことが知られているので、この3つを調べればよい<sup>239</sup>。

古典的直交多項式系の性質は、これら3つを統一的に扱える場合もあれば、3つそれぞれ個別に計算をしなければいけない場合もある。この講義ノートでは、統一的に扱える場合はなるべく統一的な記述を行うようにした。

### 17.1 古典的直交多項式の分類

1次元の微分方程式の区間は、「有限： $a \leq x \leq b$ 」「半無限  $a \leq x < \infty$ 」「無限  $-\infty < x < \infty$ 」の3種類が存在する。そして、適切な線形変換  $x \rightarrow Ax + B$  を施すことにより、それぞれの区間は  $-1 \leq x \leq 1$ 、 $0 \leq x < \infty$ 、 $-\infty < x < \infty$  としても一般性を失わない。この3つの区間それぞれに対し、古典的直交多項式系が一つずつ存在する<sup>240</sup>。

**定理 17.1** (ボホナーの定理 (Bochner's theorem)). 直交多項式系  $\{P_n(x)\}$  ( $n = 0, 1, 2, \dots : P_n(x)$  は  $n$  次多項式<sup>241</sup>) で、適切な境界条件の下での以下の形の微分方程式

$$p(x)\frac{d^2}{dx^2}P_n(x) + r(x)\frac{d}{dx}P_n(x) + q(x)P_n(x) = \lambda_n P_n(x) \quad (17.3)$$

を満たすとする。このような直交多項式系は、表1で与えられるヤコビ多項式 (Jacobi polynomial)<sup>242</sup>、ラゲール陪多項式 (associated Laguerre polynomial)、エルミート多項式 (Hermite polynomial) に限られる。

区間	名前	記号	$\rho(x)$	$h(x)$	因子
[-1, 1]	Jacobi	$J_n$	$(1-x)^a(1+x)^b$	$(1-x^2)$	-1
	Legendre		1	$(1-x^2)$	-1
[0, $\infty$ )	Laguerre	$L_n$	$e^{-x}$	$x$	
[0, $\infty$ )	associated Laguerre	$L_n$	$x^a e^{-x}$	$x$	
$(-\infty, \infty)$	Hermite	$H_n$	$e^{-x^2}$	1	-1

表 1: 古典的直交多項式系のリスト。ただしラゲール陪多項式のパラメータは  $a > -1$ 、ヤコビ多項式のパラメータは  $a, b > -1$  を満たすとする。ルジャンドル多項式はヤコビ多項式の特殊な場合で、 $a = b = 0$  に相当する。因子 -1 は、(最高次係数を正にするために)  $h(x)$  の定義をさらに -1 倍することを表す。

<sup>239</sup>本章の内容は、立川さんの物理数学 II の講義ノート (<https://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/lectures/2014-butsumisugaku2/>)、H. ホックシタット『特殊関数——その理・工学への応用』培風館、犬井鉄郎『特殊関数』岩波書店などに基づく。より詳しく知りたい人はこれらの文献も適宜参照していただきたい。

<sup>240</sup>実はもう一つ、周期境界条件に対応する  $|x| = 1$  (ただしここでは  $x$  は複素数。つまりこの領域は複素数平面の単位円周上) という領域が存在する。これに対しては「ベッセル多項式」という直交多項式系が存在する (これはよく特殊関数論で取り上げられるベッセル関数とは別物!)。ただしベッセル多項式はやや性質が異なるので、ここでは取り上げない。

<sup>242</sup>ヤコビ多項式及びルジャンドル多項式は  $P_n$  と書くことも多いが、今回は一般の多項式との混同を避けるために  $J_n$  と置いた。

スツルム・リウヴィル型微分方程式と対応付けるときには、 $q(x) = p'(x)$  と置く。 $n = 0, 1, 2$  の多項式が存在するという条件から、 $q(x), r(x), p(x)$  がそれぞれ 0 次、1 次、2 次以下の多項式であることが直ちにわかる。ここではポホナーの定理は特に証明せず、結果を正しいと認めて議論を進める。

$\rho(x)$  が与えられたので、これに対してグラム・シュミットの直交化法を施せば、それぞれの直交多項式が原理的には定まる。しかし、それだと各多項式がどのような形なのか、どのような性質を持っているのか議論しづらい。そのため、ほとんどの教科書では以下の「ロドリゲスの公式」を用いて各多項式を与える。

**定理 17.2** (ロドリゲスの公式 (Rodrigues' formula)).  $n$  次の古典的直交多項式は

$$P_n(x) = \frac{1}{\rho(x)} \frac{d^n}{dx^n} \rho(x) (h(x))^n \quad (17.4)$$

で与えられる。ただし  $h(x)$  は端点でゼロになる最低次の多項式に選ぶ。具体的には、ヤコビ多項式のとき  $-(1-x^2)$ 、ラゲール陪多項式<sup>243</sup>のとき  $x$ 、エルミート多項式のとき  $-1$  ととる。

ロドリゲスの公式で (規格化除き) 正しく直交多項式が与えられることを、以下の 2 つを示す形で示す。

- $P_n(x)$  は  $n$  次多項式である。
- 任意の  $m < n$  について、 $\langle P_n(x), x^m \rangle = 0$

1 つ目の性質より  $P_m$  は  $m$  次多項式なので、2 つ目の性質により  $m < n$  ならば  $\langle P_n(x), P_m(x) \rangle = 0$  が言える。内積の左右を入れ替えることで、 $m \neq n$  ならば  $\langle P_n(x), P_m(x) \rangle = 0$  であることが言える。そのためこれは求めたかった直交多項式だと分かる。

$n$  次多項式であることの証明。ラゲール陪とエルミートの場合はほぼ明らかなので、ヤコビの場合についてだけ示す。 $\rho(x)(h(x))^n = (1-x)^a(1+x)^b(-1)^n(1-x^2)^n = (-1)^n(1-x)^{a+n}(1+x)^{b+n}$  を  $n$  回  $x$  微分すると、

$$\frac{d^n}{dx^n} (1-x)^{a+n}(1+x)^{b+n} = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \frac{d^m}{dx^m} (1-x)^{a+n} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (1+x)^{b+n} = \sum_{m=0}^n c_m (-1)^m (1-x)^{a+n-m} (1+x)^{b+m} \quad (17.5)$$

という形になる。ただし  $c_m$  は適切な正の係数である。これを  $(1-x)^a(1+x)^b$  で割れば、得られるのは  $n$  次多項式である<sup>244</sup>。□

直交性の証明。部分積分を繰り返すことにより、 $n > m$  の場合

$$\begin{aligned} \langle P_n(x), x^m \rangle &= \int dx x^m \frac{d^n}{dx^n} \rho(x) (h(x))^n = (-1)^m m! \int dx \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} \rho(x) (h(x))^n \\ &= (-1)^m m! \left[ \frac{d^{n-m-1}}{dx^{n-m-1}} \rho(x) (h(x))^n \right] \end{aligned} \quad (17.6)$$

となる ( $n = m$  の場合、最後の等式が成り立たない点に注意)。ここで微分の回数が  $n$  回より少ないため、右辺は必ず  $h(x)$  でくくれる。 $h(x)$  は端点でゼロなので、右辺はゼロである。□

ちなみに、今回は  $h(x)$  と  $\rho(x)$  を与えて、それが直交多項式となることを示したが、逆に  $h(x)$  とロドリゲスの公式を与えて、 $P_n(x)$  が  $n$  次多項式であるべきという条件から  $\rho(x)$  を今の形に絞り込むことも出来る。例えば、ヤコビ多項式の場合であれば、

$$J_1(x) = \frac{\rho'(x)}{\rho(x)} (1-x^2) - 2x = Ax + B \quad (17.7)$$

<sup>242</sup>  $n = 0$  から始まる、というのは実は重要で、 $n = 0$  が存在しなくてもよい場合には、これら以外の直交多項式系が存在してもよい、ということが最近明らかになってきている。これらは「例外直交多項式」と呼ばれる。これについての解説としては、小林悟「解ける量子力学模型と直交多項式」(日本物理学会誌 2016 年 71 巻 3 号 p. 156-163) がある。

<sup>243</sup> ラゲール陪多項式の場合、慣習的に任意の  $n$  で  $L_n(0) = 1$  となるように規格化する。最高次係数は正も負もとる。

<sup>244</sup>  $m$  の和をとる各項の最高次係数は正なので、和をとる際にキャンセルして係数ゼロになることはない。

という条件が得られるので、これを変数分離法で解いて  $\rho(x) = (1-x)^a(1+x)^b$  の形にならないといけな  
いことが示せる。

[17-1]. ラゲール陪多項式の場合に、 $h(x) = x$  とロドリゲスの公式の形から  $\rho(x)$  の形を導け。

## 17.2 古典的直交多項式の等価な特徴づけ

古典的直交多項式には、ロドリゲスの公式以外にもいろいろな特徴づけ、表示が存在する。ここでは、微  
分方程式、母関数、漸化式という3つの表示を順にみていこう。

### 微分方程式

微分方程式を与える演算子  $L$  として、 $p(x) = \rho(x)h(x)$ 、 $q(x) = 0$  と選ぶ<sup>245</sup>。すなわち

$$L = \frac{1}{\rho(x)} \frac{d}{dx} \rho(x) h(x) \frac{d}{dx} = h(x) \frac{d^2}{dx^2} + \left( \frac{\rho'(x)}{\rho(x)} h(x) + h'(x) \right) \frac{d}{dx} \quad (17.8)$$

とする。ここで、3つの直交多項式系すべてにおいて、 $h(x)$  は  $x$  の高々2次、 $\frac{\rho'(x)}{\rho(x)} h(x) + h'(x)$  は  $x$  の1次  
の多項式なので、 $LP_n(x)$  は  $x$  の高々  $n$  次多項式であることが分かる。つまり、以下の形に展開できる。

$$LP_n(x) = \sum_{m=1}^n c_m P_m(x) \quad (17.9)$$

一方、 $L$  のエルミート性<sup>246</sup>、すなわち  $\langle f, Lg \rangle = \langle Lf, g \rangle$  を用いると、 $m < n$  の場合に

$$\langle P_m(x), LP_n(x) \rangle = \langle LP_m(x), P_n(x) \rangle = 0 \quad (17.10)$$

が言える。ただし二つ目の等式は、 $LP_m(x)$  が高々  $m$  次多項式であり、 $x^m$  ( $m < n$ ) と  $P_n(x)$  は全て直交  
するという事実による。すなわち、 $m < n$  ならば、 $c_m$  はすべてゼロである。これは  $P_n(x)$  が、 $L$  を用いた  
スツルム・リュウビル方程式

$$LP_n(x) = -\lambda_n P_n(x) \quad (17.11)$$

の形で書けることを意味している。ただし  $\lambda_n = -c_n$  は固有関数  $P_n(x)$  に対応する固有値 (の  $-1$  倍) で  
あり、この値を具体的に求めたい場合には  $P_n(x)$  と内積をとって  $x^n$  の係数比較をすればよい。例えばエル  
ミートの場合には、 $H_n(x)$  の最高次係数を  $k_n$  とすると、 $x^n$  の係数は

$$LH_n(x) = \left( \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} \right) H_n(x) = -2nk_n x^n + \dots \quad (17.12)$$

となるので、

$$\lambda_n = 2n \quad (17.13)$$

と分かる。これを代入すると

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n \right] H_n(x) = 0 \quad (\text{Hermite}) \quad (17.14)$$

という微分方程式が得られる。他の場合も同様にして

$$\left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = 0 \quad (\text{Laguerre}) \quad (17.15)$$

$$\left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (a+1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = 0 \quad (\text{a-Laguerre}) \quad (17.16)$$

$$\left[ (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} + (b-a - (a+b+2)x) \frac{d}{dx} + n(n+a+b+1) \right] J_n(x) = 0 \quad (\text{Jacobi}) \quad (17.17)$$

<sup>245</sup>前にコメントしたように  $q(x)$  は定数項なので、これは常に固有値  $\lambda$  の方に押し付けることができる。

<sup>246</sup>部分積分を2回行うことで直接確認することも出来る。

が得られる。

[17-2]. ヤコビ多項式の場合を導出せよ。

### 母関数

11.2 節では、数列に対して新しいパラメータを導入して母関数を作った。今回は、一変数関数列  $P_n(x)$  に対して新しいパラメータ  $y$  を導入して、二変数関数の母関数を作る。母関数  $G(x, y)$  は

$$G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) \frac{y^n}{n!} \quad (17.18)$$

で定義される。通常の母関数と同様に

$$P_n(x) = \left. \frac{\partial^n}{\partial y^n} G(x, y) \right|_{y=0} \quad (17.19)$$

が成り立つので、母関数はすべての直交多項式系の情報を持っている。

母関数を求めるには、「グルサの定理 (Goursat's theorem)」

$$\frac{d^n}{dx^n} f(x) = \frac{n!}{2\pi i} \oint dz \frac{f(z)}{(z-x)^{n+1}} \quad (17.20)$$

により微分を留数積分の形で表すのが便利である。ロドリゲスの公式と等比数列の和の公式を用いると

$$G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi i \rho(x)} \oint dz \frac{\rho(z) h(z)^n y^n}{(z-x)^{n+1}} = \frac{1}{2\pi i \rho(x)} \oint dz \frac{\rho(z)}{z-x-h(z)y} \quad (17.21)$$

が得られる。それぞれ  $h(z)$  と  $\rho(z)$  を代入して留数積分すると、エルミート、ラゲール陪、ヤコビ多項式の母関数は順に

$$G(x, y) = e^{x^2} e^{-(x-y)^2} = e^{2xy-y^2} \quad (\text{Hermite}) \quad (17.22)$$

$$G(x, y) = \frac{e^x}{1-y} e^{-x/(1-y)} = \frac{e^{-xy/(1-y)}}{1-y} \quad (\text{Laguerre}) \quad (17.23)$$

$$G(x, y) = \frac{e^x}{(1-y)x^a} \left( \frac{x}{1-y} \right)^a e^{-x/(1-y)} = \frac{e^{-xy/(1-y)}}{(1-y)^{a+1}} \quad (\text{a-Laguerre}) \quad (17.24)$$

$$G(x, y) = \frac{2^{a+b}}{R(1+R-y)^a(1+R+y)^b} \quad (\text{Jacobi}) \quad (17.25)$$

と書ける<sup>247</sup>。ただしヤコビ多項式の  $R$  は  $R = \sqrt{1-2xy+y^2}$  である<sup>248</sup>。

### 漸化式

漸化式そのものは、古典的な場合に限らず一般の直交多項式系において得られるものである。 $n$  次の多項式の最高次係数を  $k_n$  とする。すなわち  $P_n(x) = k_n x^n + \dots$  とする。すると、 $A_n = k_{n+1}/k_n$  とすると

$$P_{n+1}(x) - A_n x P_n(x) = \sum_{m=0}^n c_m P_m(x) \quad (17.26)$$

と書ける。ただし  $c_m$  は適当な係数である。左辺は  $x^{n+1}$  の項が消えるので、最高次が  $x^n$  である点に注意する。

ここで、式(17.26)左辺に対して  $P_m(x)$  ( $m \leq n$ ) との内積をとると、第一項目については  $\langle P_m(x), P_{n+1}(x) \rangle = 0$  が成り立ち、また第二項目についても  $m < n-1$  の場合には

$$\langle P_m(x), x P_n(x) \rangle = \langle x P_m(x), P_n(x) \rangle = 0 \quad (17.27)$$

<sup>247</sup>文献 (岩波公式集など) によっては、 $L_n/n!$  をラゲール多項式と定義しているものもある。その場合には、母関数は  $n!$  で割らない形で定義しないと同じ形にならない。また漸化式はここで述べたのとは違う形になる。

<sup>248</sup>ヤコビ多項式の場合の導出は煩雑である。犬井鉄郎『特殊関数』岩波書店に計算の工夫が出ている。

となる。よって式(17.26)右辺の  $c_m$  は、 $m = n, n-1$  を除いてすべてゼロであることが分かる。 $\langle xP_{n-1}(x), P_n(x) \rangle = k_{n-1}/k_n$  なので、 $C_n = A_n/A_{n-1}$  とおくと

$$P_{n+1}(x) - (A_n x + B_n)P_n(x) + C_n P_{n-1} = 0 \quad (17.28)$$

という漸化式が得られる。ただし  $B_n = -A_n \langle xP_n(x), P_n(x) \rangle$  である。これは具体的に解いて求める必要がある。

古典的直交多項式の場合は、母関数を用いて漸化式を速やかに導出することも出来る。具体的には、 $G(x, y)$  の式と式(17.21)の右辺を  $y$  で微分して係数比較することにより、 $P_n(x)$  と  $P_{n\pm 1}(x)$  とを結びつける漸化式が得られる。例えば、エルミート多項式の場合は、

$$\frac{\partial}{\partial y} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{y^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{y^{n-1}}{(n-1)!} \quad (17.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} e^{2xy-y^2} = (2x-2y)e^{2xy-y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \left( 2xH_n(x) \frac{y^n}{n!} - 2H_n(x) \frac{y^{n+1}}{n!} \right) \quad (17.30)$$

なので、両者の  $y^n$  の係数を比較して

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \quad (\text{Hermite}) \quad (17.31)$$

が得られる。同様にして

$$L_{n+1} - (2n+1-x)L_n(x) + n^2L_{n-1}(x) = 0 \quad (\text{Laguerre}) \quad (17.32)$$

$$L_{n+1} - (2n+a+1-x)L_n(x) + n(n+a)L_{n-1}(x) = 0 \quad (\text{a-Laguerre}) \quad (17.33)$$

が得られる<sup>249</sup>。

ちなみに、母関数を  $x$  で微分すると、直交多項式の微分についての関係式が得られる。やり方は同様なので省略し結果のみ示すと

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (\text{Hermite}) \quad (17.35)$$

$$L'_n(x) = L'_{n-1}(x) - L_{n-1}(x) \quad (\text{Laguerre/a-Laguerre}) \quad (17.36)$$

である。ヤコビ多項式の場合は省略する。

[17-3]. エルミート多項式の場合の微分の関係式を導出せよ。

### 17.3 陪多項式

ここまで、ラゲール陪多項式は天なりに定義し、ラゲール多項式との関係は、ラゲール多項式がその特殊な場合 ( $a = 0$ ) に含まれることを確認するにとどめていた。一般に、「 $\sim$ 陪多項式」は「 $\sim$ 多項式」の微分で得られる多項式を指す。ただしこの場合、 $a$  を非負整数に限定する必要がある。

$\rho(x) = x^a e^{-x}$ 、 $h(x) = x$  で定義されたラゲール陪多項式が、ラゲール多項式の微分で得られることは簡単に確認できる。ラゲールの微分方程式(17.15)の両辺を  $x$  で  $a$  回微分すると、

$$\frac{d^a}{dx^a} \left[ x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] L_n(x) = \left[ a \frac{d}{dx} + x \frac{d^2}{dx^2} - a + (1-x) \frac{d}{dx} + n \right] \frac{d^a}{dx^a} L_n(x) = 0 \quad (17.37)$$

が得られるので、整理すると角カッコ内はラゲールの陪微分方程式(17.16)そのものになる。よって  $\frac{d^a}{dx^a} L_n(x)$  がラゲール陪多項式になる。

<sup>249</sup> ヤコビ多項式の場合も同様に計算すると式が得られるが計算は非常に面倒である。結果のみ引き写すと

$$2(n+1)(n+a+b+1)S J_{n+1}(x) - (S+1) [S(S+2)x + (a^2 - b^2)] J_n(x) + 2(n+a)(n+b)(S+2) J_{n-1}(x) = 0 \quad (17.34)$$

である。ただし  $S = 2n + a + b$  と置いた。



ラゲール多項式以外に、ルジャンドル多項式についても陪多項式はよく議論される。しかし、これは  $\rho(x) = (1-x^2)^a$ ,  $h(x) = 1-x^2$  の場合に相当し、これはヤコビ多項式の特殊な場合なので、ここではこれ以上議論しない。

#### 17.4 量子力学への応用

古典的直交多項式の出現例としては、量子力学の固有状態がよく知られている。量子状態はそれ自身同士が直交しないとけないので、 $n$  番目の固有状態は

$$\psi_n(x) = C \cdot \sqrt{\rho(x)} P_n(x) \quad (17.38)$$

という形に置くのが妥当だろうと考えられる。(より一般には右辺は任意の関数  $f(x)$  を用いて  $C \cdot f'(x) \sqrt{\rho(f(x))} P_n(f(x))$  とする。実際、ラゲール陪多項式やルジャンドル多項式ではこの形で出現する)。このように置いて、元々の微分方程式に代入する<sup>250</sup> ことで、 $\psi$  の満たすべき微分方程式が得られる。

例えば  $\psi_n(x) = C \cdot \sqrt{\rho(x)} H_n(x)$  とエルミート多項式を用いて作った状態は

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - x^2 \right] \psi(x) = \lambda \psi(x) \quad (17.39)$$

を満たす。これは調和振動子のシュレディンガー方程式である。同様にラゲール陪多項式を用いた場合には、3次元の水素原子(逆二乗ポテンシャル)の動径方向のシュレディンガー方程式が得られる。ヤコビ多項式の特別な場合に当たるルジャンドル多項式は、球面調和関数の  $\theta$  (南北) 方向において現れる。人工的な設定でよければ、ヤコビ多項式を解に持つ量子力学のモデルも存在する<sup>251</sup>。

#### 17.5 数値積分への応用

直交多項式の少し変わった応用として、数値積分への利用を見てみよう。数値積分では積分を和に置き直す必要があるが、和に置き直す際の点の選び方の一つとして、直交多項式のゼロ点を用いるという「ガウス求積法 (Gaussian quadrature)」がある。その背後にあるのは以下の定理である。

**定理 17.3** (ガウス公式<sup>252</sup>)。  $f(x)$  は  $2n-1$  次以下の多項式とする。このとき、積分区間に合わせた  $n$  次の直交多項式  $P_n(x)$  とその重み関数  $\rho(x)$  を用いて、

$$\int dx \rho(x) f(x) = \sum_{i=1}^n w_i \rho(x_i) f(x_i) \quad (17.40)$$

と書ける。ただし  $x_i$  は  $P_n(x)$  の  $n$  個のゼロ点であり、重み  $w_i$  は関数  $L_i(x) := \prod_{j(\neq i)} (x - x_j)$  を用いて

$$w_i := \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} \quad (17.41)$$

で与えられる。

「積分区間に合わせた」とは、範囲が有限、半無限、無限にあわせて、ルジャンドル、ラゲール、エルミートの各多項式とその重み関数を用いるということである。積分したい関数  $g(x)$  が  $\rho(x)$  で割り切れる場合には、 $f(x) = g(x)/\rho(x)$  と置けばよい。一般には、積分したい関数  $f(x)$  は多項式ではないが、一般の  $f(x)$  についても、ガウス公式 (17.40) の右辺は左辺の良い近似になっていると考えられる。これは、 $f(x)$  の多項式近似と理解することができる。近似計算の場合には、 $\rho(x)f(x)$  を改めて  $f(x)$  と見れば、 $\rho(x) = 1$  と置いた場合と同様のガウス公式での計算で近似式が得られる。

<sup>250</sup>  $P_n(x) = \psi_n / \sqrt{\rho(x)}$  なので、これを元の微分方程式に代入して整理する。

<sup>251</sup> ダルブー・ポッシェル・テラー模型 (Darboux-Pöschel-Teller model) がその例を与える。

<sup>252</sup> 通常は、用いている直交多項式にあわせて「ガウス・ルジャンドル公式」「ガウス・ラゲール公式」「ガウス・エルミート公式」などと呼ぶ。

$w_i$  の定義式の積分は、各直交多項式  $P_n(x)$  を用いて

$$w_i = \int dx \frac{P_i(x)}{(x - x_i)P_i'(x_i)} \quad (17.42)$$

と書き直すことができる。この積分は、古典的直交多項式の諸性質<sup>253</sup> を使って計算することが出来、

$$w_i = \frac{2(1 - x_i^2)}{(nP_{n-1}(x_i))^2} \quad (\text{Legendre}) \quad (17.43)$$

$$w_i = \frac{x_i}{(n+1)^2(L_{n+1}(x_i))^2} \quad (\text{Laguerre}) \quad (17.44)$$

$$w_i = \frac{2^{n-1}n!\sqrt{\pi}}{n^2(H_{n-1}(x_i))^2} \quad (\text{Hermite}) \quad (17.45)$$

であることが知られている。なので、 $w_i$  の積分は実際には実行する必要はない。

この公式の背後にあるのは、ラグランジュ補間という結果である。

**定理 17.4** (ラグランジュ補間 (Lagrange interpolation) ).  $f(x)$  を  $n-1$  次以下の多項式とする。このとき、任意の  $n$  個の点  $x_1, \dots, x_n$  を用いて、 $f(x)$  は以下のように書ける

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} \quad (17.46)$$

ラグランジュ補間は、点を取る位置は任意の代わりに、 $f(x)$  は  $2n-1$  次ではなく  $n-1$  次までと制限が強い。ガウス公式は倍の次数まで完璧な記述ができるため、ガウス公式の方が近似精度が向上している。

**証明.** 式 (17.46) 右辺を  $g(x)$  と置く。 $g(x)$  は明らかに  $n-1$  次多項式である。

また、 $L_i(x_j) = 0$  ( $i \neq j$ ) より、すべての  $1 \leq i \leq n$  について  $g(x_i) = f(x_i)$  が成り立つ。よって  $n-1$  次多項式が  $n$  か所で一致したので、両者は恒等的に一致する。すなわち  $g(x) = f(x)$  である。□

**式 (17.40) の証明.** 積分したい  $2n-1$  次以下の多項式  $f(x)$  を  $P_n(x)$  で割り、 $f(x) = p(x)P_n(x) + q(x)$  と書く。 $p(x)$ 、 $q(x)$  はともに  $n-1$  次以下の多項式である点に注意する。

直交多項式の直交性より

$$\int dx \rho(x) f(x) = \int dx \rho(x) p(x) P(x) + \int dx \rho(x) q(x) = \int dx \rho(x) q(x) \quad (17.47)$$

が成り立つ。ラグランジュ補間をこの右辺に用いると、任意の  $n$  点  $x_1, \dots, x_n$  について、

$$\int dx \rho(x) q(x) = \sum_{i=1}^n \rho(x_i) q(x_i) \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} \quad (17.48)$$

が得られる。

一方、特に  $x_1, \dots, x_n$  を  $P_n(x)$  のゼロ点とすると、すべての  $1 \leq i \leq n$  で  $f(x_i) = q(x_i)$  が成り立つ。以上をまとめると、

$$\int dx \rho(x) f(x) = \sum_{i=1}^n \rho(x_i) q(x_i) \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} = \sum_{i=1}^n \rho(x_i) f(x_i) \int dx \frac{L_i(x)}{L_i(x_i)} \quad (17.49)$$

となり、求めたかった結果を得る □

<sup>253</sup> 古典的直交多項式では、各べきの係数間に非自明な関係式が成り立つので、それを利用する。

## 18 超幾何関数

特殊関数のいわば親玉のような存在として、超幾何関数と呼ばれる関数がある。超幾何関数は、それ自体が微分方程式論や可積分系の分野の興味の対象として研究されるとともに、その特定の形は物理や応用数学などのさまざまな場所に姿を現す。超幾何関数は一般論で言えることも多いので、ここではその基本的性質を見ていくことにしよう<sup>254</sup>。個々の特殊関数特有の性質は、必要が生じたときに調べた方がよいので、ここでは詳しく扱わない<sup>255</sup>。

### 18.1 微分方程式の特異点

これまで、微分方程式というと実空間上の微分方程式を考えてきたであろうが、ここでは概念を複素空間に拡張する。関数は解析関数のクラスに限定したうえで、複素空間中の微分方程式を考える（ただし微分方程式そのものは実空間でも定義できるようにしたいので、係数は実数にとる）。特に、以下の形の二階線形微分方程式を考える。

$$f''(z) + a(z)f'(z) + b(z)f(z) = 0 \quad (18.1)$$

我々は特に、「特異点 (singularity point)」を持つ微分方程式に関心がある。関数  $f(z)$  が  $z = a$  に特異点を持つとは、 $f(z)$  が  $z = a$  で発散している（極を持つ）ことをいう。微分方程式 (18.1) が  $z = a$  に特異点を持つとは、 $a(z)$  または  $b(z)$  が  $z = a$  で発散していることと定義する。

微分方程式の解  $f(z)$  が、特異点  $z = a$  近傍で  $f(z) \simeq (z - a)^l$  と振る舞っているとすると、この場合、 $f'(z) \sim (z - a)^{l-1}$ 、 $f''(z) \sim (z - a)^{l-2}$  なので、最も発散が速い主要項<sup>256</sup> が  $a(z) \sim (z - a)^{-1}$ 、 $b(z) \sim (z - a)^{-2}$  ならば、微分方程式の各項のべきは整合しており、そこまで異常な振る舞いは生じていない。一方、 $a(z)$  や  $b(z)$  の発散速度がこれより早い場合には、単純に  $f(z) \simeq (z - a)^l$  と置いても整合的にならず、異常性が強い。そこで、これらを区別してそれぞれ「確定特異点」、「不確定特異点」と呼ぶ。

**定義 18.1** (確定特異点・不確定特異点). 微分方程式 (18.1) で、 $z = a$  が特異点であり、 $a(z)$  の極が一位、 $b(z)$  の極が二位までのとき、 $z = a$  は「確定特異点 (regular singularity point)」であるという。 $a(z)$  の極が  $p_a$  位、 $b(z)$  の極が  $p_b$  位で  $\max(p_a, p_b/2) > 1$  のとき、 $z = a$  は  $\max(p_a, p_b/2)$  位の「不確定特異点 (irregular singularity point)」であるという

$z = \infty$  における特異性も通常議論の対象に含まれる。無限遠点を議論するには、 $z = \frac{1}{w}$  と変数変換して、 $w = 0$  における特異性を議論すればよい。 $g(w) = f(1/z)$  と置くと、

$$\frac{d}{dw} = \frac{dz}{dw} \frac{d}{dz} = -z^2 \frac{d}{dz} \quad (18.2)$$

を利用することで、

$$-z^2 f'(z) = g'(w) \quad (18.3)$$

$$-z^2 f''(z) = -\frac{d}{dw} f'(z) = \frac{d}{dw} (w^2 g'(w)) = 2wg'(w) + w^2 g''(w) \quad (18.4)$$

が得られる。よって、もともとの微分方程式 (18.1) は

$$g''(w) - \left( \frac{1}{w^2} a\left(\frac{1}{w}\right) - \frac{2}{w} \right) g'(w) + \frac{1}{w^4} b\left(\frac{1}{w}\right) g(w) = 0 \quad (18.5)$$

という微分方程式に書き直せる。この  $w = 0$  における振る舞いを考察すればよい。

**[18-1].**  $n$  を固定した際のラゲールの微分方程式 (17.15) の特異点の位置とその位数を求めよ。

<sup>254</sup>本章の内容は、先述の立川さんの講義ノートのほかに、坂井秀隆『常微分方程式』東京大学出版会、H. ホックシタット『特殊関数——その理・工学への応用』培風館、原岡喜重『超幾何関数』朝倉書店などに基づく。

<sup>255</sup>例えばベッセル関数などは、それだけで一冊の本になるほどさまざまな性質が調べられているので、必要が生じた際にはそういう本を適宜見てもらいたい。特殊関数全般に幅広く色々出ている邦書としては、『岩波 数学公式』の特殊関数の巻などが有名である。ウェブで見れるものとしては、「特殊関数グラフィックスライブラリー」(<https://math-functions-1.watson.jp/index.html>) が、特殊関数のさまざまな可視化や、特殊関数の満たす色々な性質を網羅的に掲載している。

<sup>256</sup>例えば  $b(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{z^2} + \frac{1}{z^3}$  の場合、発散の主要項は  $\frac{1}{z^3}$  なので、 $b(z)$  の  $z = 0$  における極は三位である。

## 18.2 超幾何関数の導入

確定特異点という概念を導入したので、確定特異点を持つ微分方程式の考察を進めよう<sup>257</sup>。  $z = a$  に確定特異点を持つ（連立）微分方程式は

$$\frac{d}{dz}X(z) = \frac{1}{z-a}A(z)X(z) \quad (18.6)$$

と書ける。ただし  $A(z)$  は行列、 $X(z)$  はベクトルである。

これが  $z = \infty$  で特異点となるかは、 $w = \frac{1}{z}$  の変換を施して

$$\frac{d}{dw}X\left(\frac{1}{w}\right) = -\frac{1}{w(1-aw)}A\left(\frac{1}{w}\right)X\left(\frac{1}{w}\right) \quad (18.7)$$

が  $w = 0$  で特異点か否かを見ることで調べられる。

ではまず、2つの確定特異点を持つ1階の微分方程式を考えよう。この場合、 $A$  と  $X$  はともに一変数、すなわちベクトルではなく数になる

ここで、 $A(z)$  がもし正のべき ( $z$  や  $z^3$  など) を持つならば、 $w = 0$  ( $z = \infty$ ) は不確定特異点になってしまう。同様に、 $A(z-a)$  がもし負のべきをもつならば、 $z = a$  は不確定特異点になってしまう。そのため、どちらの点も確定特異点となるためには、 $A(z)$  は定数でないといけない<sup>258</sup>。このときの微分方程式は

$$\frac{d}{dx}f(x) - \frac{b}{x-a}f(x) = 0 \quad (18.8)$$

である。これは簡単に解けて

$$f(x) = \frac{1}{(x-a)^b} \quad (18.9)$$

が解である。

さて、これは実は「幾何級数 (geometric series)」(を少し一般化したもの) である。幾何級数は、 $a = b = 1$  で符号を反転させた

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (18.10)$$

というものである。以下で我々が調べる「超幾何級数」はこの一般化とも見れる。

先程の幾何級数の例から、微分方程式の階数を一つ上げ、確定特異点の数も一つ増やしたものが「超幾何微分方程式」である。

**定義 18.2** (超幾何微分方程式). 特異点を3つ持ち、そのすべてが確定特異点であるような、二階の線形微分方程式を「超幾何微分方程式 (hypergeometric differential equation)」という。またその解を「超幾何関数 (hypergeometric function)」、その級数表示を「超幾何級数 (hypergeometric series)」という。

ひとまず超幾何微分方程式が定義できたが、このままではどんな微分方程式がよくわからない。なので以下、少しこの微分方程式の形を整理していこう。

複素平面全体+無限遠点は(無限遠が全て一点でつながっていると思うと)球面と同相である。まず、球面から球面への一对一の正則関数を用いて、特異点の位置を動かす。実はこのような関数は、一次分変換

$$z \rightarrow \frac{az+b}{cz+d} \quad (18.11)$$

<sup>257</sup> 特異点がすべて確定特異点である、有理型の線形常微分方程式を「フックス型微分方程式 (Fuchsian equations)」という。

<sup>258</sup>  $z$  のべきは  $z-a$  のべきの形に書き直せる。

で表せることが知られている。ただし  $ad - bc \neq 0$  とする。一次分数変換を用いれば、任意の与えられた 3 点を、それぞれ  $z = 0, 1, \infty$  に移すことができる<sup>259</sup>。

[18-2].  $z = 2, 3, 4$  を  $z = 0, 1, \infty$  に移す一次分数変換を与えよ。

$z = 0, 1$  に確定特異点を持つ二階線形微分方程式は一般に

$$f''(z) + \left( \frac{p_1(z)}{z} + \frac{p_2(z)}{z-1} \right) f'(z) + \left( \frac{q_1(z)}{z^2} + \frac{q_2(z)}{(z-1)^2} + \frac{q_3(z)}{z(z-1)} \right) f(z) = 0 \quad (18.12)$$

と書ける。複素平面上で他の特異点がないため、 $p_i, q_i$  は整関数である。これが  $z = \infty$  で確定特異点を持たないといけなないので、 $z \rightarrow \frac{1}{w}$  と変換すると

$$f''\left(\frac{1}{w}\right) + \frac{1}{w} \left( 2 - p_1\left(\frac{1}{w}\right) - \frac{p_2(1/w)}{1-w} \right) f'\left(\frac{1}{w}\right) + \frac{1}{w^2} \left( q_1\left(\frac{1}{w}\right) + \frac{q_2(1/w)}{(1-w)^2} + \frac{q_3(1/w)}{1-w} \right) f\left(\frac{1}{w}\right) = 0 \quad (18.13)$$

となる。 $w = 0$  が確定特異点になるには、 $p_i, q_i$  はすべて定数でないといけない。

$z \simeq 0$  近傍では、解は  $f(z) \sim z^a$  のようにふるまうはずである<sup>260</sup>。この解の形を式 (18.12) に代入して主要項のみ拾うと

$$a(a-1) + p_1a + q_1 = 0 \quad (18.14)$$

という二次方程式が得られるので、これを解くことで 2 つのべき  $a_{\pm}$  が得られる。同様に、 $z \simeq 1$  近傍の解を  $f(z) \sim (z-1)^b$ 、 $w \simeq 0$  近傍の解を  $f(w) \sim w^c$  と書くと、それぞれ

$$b(b-1) + p_2b + q_2 = 0 \quad (18.15)$$

$$c(c-1) + (2-p_1-p_2)c + q_1 + q_2 + q_3 = 0 \quad (18.16)$$

という二次方程式でべきが定まる。6 つのべき  $a_{\pm}, b_{\pm}, c_{\pm}$  が得られたが、これらはすべて独立なパラメータではなく、二次方程式の解と係数の関係より

$$a_+ + a_- + b_+ + b_- + c_+ + c_- = (1-p_1) + (1-p_2) + (-1+p_1+p_2) = 1 \quad (18.17)$$

という制限が課されている。

微分方程式 (18.12) を、これらのべきを束ねて書いたもの

$$P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ & b_+ & c_+ & z \\ a_- & b_- & c_- & \end{pmatrix} \quad (18.18)$$

と対応付ける表記をよく用いる。これを「リーマン図式 (Reimann scheme)」と呼ぶ。

ここでさらに、解の関数  $f(z)$  を少し変形し

$$g(z) = z^s(z-1)^t f(z) \quad (18.19)$$

という関数に対する微分方程式と捉え直してみよう。すると、この微分方程式に対するリーマン図式は

$$z^s(z-1)^t P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ & b_+ & c_+ & z \\ a_- & b_- & c_- & \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ + s & b_+ + t & c_+ - s - t & z \\ a_- + s & b_- + t & c_- - s - t & \end{pmatrix} \quad (18.20)$$

<sup>259</sup>  $z_1 \rightarrow 0, z_2 \rightarrow 1, z_3 \rightarrow \infty$  としたいならば、連立方程式  $az_1 + b = 0, cz_3 + d = 0, az_2 + b = cz_2 + d$  を解けばよい。なお、 $a, b, c, d$  をすべて定数倍しても変換は同じなので、定数倍の任意性は残る。

<sup>260</sup> より正確には、これに級数がかかった  $z^a \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$  の形である。

となる<sup>261</sup>。そのため、特に

$$g(z) = z^{-a_+}(z-1)^{-b_+}f(z) \quad (18.21)$$

と変形すれば

$$z^{-a_+}(z-1)^{-b_+}P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ a_+ & b_+ & c_+ \\ a_- & b_- & c_- \end{pmatrix} z = P \begin{pmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha \\ 1-\gamma & \gamma-\alpha-\beta & \beta \end{pmatrix} z \quad (18.22)$$

と整理した形に書ける。ただし  $\alpha = c_+ + a_+ + b_+$ 、 $\beta = c_- + a_+ + b_+$ 、 $\gamma = 1 - a_- + a_+$  と置いた。このリーマン関式のパラメータの置き方はよく用いられる。

式 (18.22) に対応する微分方程式は、

$$\left[ z(z-1)\frac{d^2}{dz^2} - (\gamma - (\alpha + \beta + 1)z)\frac{d}{dz} + \alpha\beta \right] f(z) = 0 \quad (18.23)$$

であり、これは「ガウスの超幾何微分方程式」と呼ばれる。以上から明らかなように、すべての超幾何微分方程式はガウスの超幾何微分方程式に帰着できる。

**定理 18.1** (ガウスの超幾何微分方程式). すべての超幾何微分方程式はガウスの超幾何微分方程式 (18.23) に帰着できる。

### 18.3 超幾何関数の3つの特徴づけ

超幾何関数には、微分方程式、級数表示、積分表示、という3つの表し方がある。既に微分方程式は式 (18.23) が得られているので、ここでは残りの二つがどのように表されるのか考察しよう。

まず級数表示から考えよう。微分方程式 (18.23) の解が  $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$  とべき級数展開できているとする。すると、これを式 (18.23) に代入すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n n(n-1)(z^n - z^{n-1}) - c_n \gamma n z^{n-1} + c_n (\alpha + \beta + 1) n z^n + c_n \alpha \beta z^n = 0 \quad (18.24)$$

なので、 $z^n$  での係数を取り出すと漸化式

$$c_{n+1} = \frac{(\alpha + n)(\beta + n)}{(n+1)(\gamma + n)} c_n \quad (18.25)$$

が得られる。そのため、「ポツホハマー記号 (Pochhammer symbol)」 $(a)_n := a(a+1)(a+2)\cdots(a+n-1)$  を導入すると

$$c_n = \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} \quad (18.26)$$

と求まる。

**定理 18.2** (超幾何級数 (hypergeometric series)). ガウスの超幾何微分方程式 (18.23) のべき級数解は

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n \quad (18.27)$$

で与えられる。これを「ガウスの超幾何級数」という。

<sup>261</sup>少し粗雑な表記だが、解を  $g(z) = z^s(z-1)^t f(z)$  と変換した際のリーマン関式の移り変わりをこのように書いている。

[18-3]. 関数  $f(u) = F(1, 1; 2; -u)$  を求めよ。

元の微分方程式 (18.23) が二階の微分方程式なのに、解が一つしか得られなかったことを疑問に思うかもしれない。これは、超幾何微分方程式において  $z = 0$  が特異点であることによる。べき級数展開で導かれたのは、指数 0 の方の解であり、指数  $1 - \gamma$  の方の解は  $z^{1-\gamma}g(z)$  という形を仮定して  $g(z)$  をべき級数展開することで得られる。

これを進めるには、リーマン図式で考えるのが便利である。上記のように解の形を変形すると

$$z^{\gamma-1}P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha & z \\ 1-\gamma & \gamma-\alpha-\beta & \beta \end{Bmatrix} = P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ \gamma-1 & 0 & \alpha+1-\gamma & z \\ 0 & \gamma-\alpha-\beta & \beta+1-\gamma \end{Bmatrix} \quad (18.28)$$

となる。右辺は超幾何級数解  $F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z)$  を伴う<sup>262</sup>ので、元の超幾何微分方程式 (18.23) のもう一つの解として

$$f(z) = z^{1-\gamma}F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z) \quad (18.29)$$

が得られる。よって超幾何微分方程式 (18.23) の一般解は

$$f(z) = C_1F(\alpha, \beta; \gamma; z) + C_2z^{1-\gamma}F(\alpha+1-\gamma, \beta+1-\gamma; 2-\gamma; z) \quad (18.30)$$

であると分かる。

さて、リーマン図式を使うと、これら以外にも多数の解の表示を得ることができる。例えば

$$(1-z)^{\alpha+\beta-\gamma}P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha & z \\ 1-\gamma & \gamma-\alpha-\beta & \beta \end{Bmatrix} = P \begin{Bmatrix} 0 & 1 & \infty \\ 0 & \alpha+\beta-\gamma & \gamma-\beta & z \\ 1-\gamma & 0 & \gamma-\alpha \end{Bmatrix} \quad (18.31)$$

という関係が成り立つので、

$$f(z) = (1-z)^{\alpha+\beta-\gamma}F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta; \gamma; z) \quad (18.32)$$

という形の解が存在するはずである。もちろんこれは見た目が違うだけで、すべて上記の一般解 (18.30) に含まれるものである。解が増えたわけではない点に注意しておく。

このアイデアを敷衍すると、0にする2か所のべきの選び方が12通り<sup>263</sup>、0になった2か所それぞれについてべき展開が存在するので、合計で24通りの超幾何級数を用いた解の表示を得ることができる。これは「クンマー (Kummer) の24の解」と呼ばれる。(さすがに24個の解を入力するのは大変なので省略。具体系を知りたい人は教科書なりウェブなりを見ていただきたい)。

最後の積分表示は、級数表示から導出するのが簡便である。これを導くために、二つの関係式を利用する。一つは、ガンマ関数を用いたベータ関数の表示

$$B(p, q) = \int_0^1 dx x^{p-1}(1-x)^{q-1} = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} \quad (18.33)$$

である。これは部分積分を繰り返すことで直接確認できる。もう一つは、幾何級数の派生式

$$\frac{1}{(1-x)^a} = 1 + ax + \frac{a(a+1)}{2}x^2 + \frac{a(a+1)(a+2)}{3!}x^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n!}x^n \quad (18.34)$$

である。これらを利用すると、以下の積分表示が導ける。

<sup>262</sup>リーマン図式の一行目と二行目の区別には意味がないので適宜入れ替えてよい。

<sup>263</sup> $z = \infty$ も適宜変数変換して0または1に動かせるので、 $z = \infty$ の一方のべきもゼロにすることができる。0, 1,  $\infty$ の中から2つを選ぶ方法が3通り、選んで2つの中にそれぞれ2つのべきがあり、どちらを消すかがそれぞれ2通りあるので計4通り。これらをすべて掛けると12通りである。

定理 18.3 (オイラーの積分表示). ガウスの超幾何級数 (18.27) は

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} (1-zs)^{-\beta} \quad (18.35)$$

と積分表示できる。

証明. 以下の導出は、収束の関係から  $\operatorname{Re}[\alpha] > 0$ ,  $\operatorname{Re}[\gamma - \alpha] > 0$ ,  $|z| < 1$  の条件下のものだが、解析接続することで極以外の任意の点に拡張可能である。

$(a)_j = \Gamma(a+j)/\Gamma(a)$  であることに注意すると

$$\begin{aligned} F(\alpha, \beta; \gamma; z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma+n)} \frac{(\beta)_n}{n!} z^n \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \int_0^1 ds s^{\alpha+n-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} \right) \frac{(\beta)_n}{n!} z^n \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \left( \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta)_n}{n!} (zs)^n \right) \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} (1-zs)^{-\beta} \end{aligned} \quad (18.36)$$

と、求めたかった表示を得る。ただし最後の等式では式 (18.34) を用いた。  $\square$

[18-4]. 以下の「ガウスの超幾何定理」が成り立つことを示せ。ただし収束性の問題についてはひとまず気にしなくてよい<sup>264</sup>。

$$F(\alpha, \beta; \gamma; 1) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} \quad (18.37)$$

#### 18.4 合流操作

ここまで、3つの確定特異点を持つ二階の線形微分方程式を見てきた。ここでは、これを利用して不確定特異点を持つ微分方程式を作りたい。アイデアは非常にシンプルで、2つの確定特異点（位数1の特異点）を同じ場所に運んでくっつけば、位数2の不確定特異点になる、というものである。このような操作を「合流 (confluence)」という。

以下具体例で説明する。ガウスの超幾何微分方程式 (18.23) において、 $z = \tilde{z}/\beta$  と変数変換すると、 $\tilde{z}$  は  $0, \beta, \infty$  の3か所に確定特異点を持つ。すると、 $\beta \rightarrow \infty$  極限を取れば、 $\tilde{z}$  は0に確定特異点、 $\infty$ に位数2の不確定特異点を持つようになる。これが合流操作である。

記号を増やしたくないので、以下  $\tilde{z}$  を改めて  $z$  と書き直して記述を進める。 $z \rightarrow z/\beta$  の変数変換を施したガウスの超幾何微分方程式は

$$\frac{1}{\beta} \left[ z \left( \frac{z}{\beta} - 1 \right) \frac{d^2}{dz^2} - \left( \gamma - \left( 1 + \frac{\alpha+1}{\beta} \right) z \right) \frac{d}{dz} + \alpha \right] f(z) = 0 \quad (18.38)$$

となる。この  $\beta \rightarrow \infty$  極限をとって得られるのが、「クンマーの合流型超幾何微分方程式」である。

<sup>264</sup>収束性の関係で、関係式が成り立つ条件として、「 $\gamma$  は0以下の整数ではない」「 $\alpha$  または  $\beta$  は0以下の整数」、または『 $\operatorname{Re}[\alpha + \beta] < \operatorname{Re}[\gamma]$ 』『 $\operatorname{Re}[\gamma - \alpha - \beta] > 0$ 』がすべて満たされる必要がある。



**定義 18.3** (クンマーの合流型超幾何微分方程式 (Kummer's confluent hypergeometric differential equation)). 以下の微分方程式

$$\left[ z \frac{d^2}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (18.39)$$

は、 $z = 0$  に確定特異点を、 $z = \infty$  に位数 2 の不確定特異点を持つ。これを「クンマーの合流型超幾何微分方程式」と呼ぶ。

さらにクンマーの合流型超幾何微分方程式に対し、 $z \rightarrow (1/s^2) + z/s$ 、 $\gamma = 1/s^2$  という変数変換を行う。すると方程式は

$$\left[ (1 + sz) \frac{d^2}{dz^2} - z \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (18.40)$$

となり、確定特異点が  $z = -1/s$ 、不確定特異点が  $z = \infty$  となる。これに対して  $s \rightarrow 0$  極限を取れば<sup>265</sup>、特異点は  $z = \infty$  における位数 3 の不確定特異点ただ一つとなる微分方程式が得られる。

**定義 18.4** (エルミート・ウェーバー方程式 (Hermite-Weber equation)). 以下の微分方程式

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} - z \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (18.41)$$

は、 $z = \infty$  に位数 3 の不確定特異点を持つ。これを「エルミート・ウェーバー方程式」と呼ぶ。

式 (18.41) は、適当な変数変換でエルミートの微分方程式 (17.14) にできることが確認できる。また、 $f(z) \rightarrow e^{z^2/4} f(z)$  と置くと、1 階微分の項が消えて

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} - \frac{z^2}{4} - \alpha + \frac{1}{2} \right] f(z) = 0 \quad (18.42)$$

が得られる。これは既に見た、量子力学の調和振動子のシュレディンガー方程式そのものの形である。

これらの方程式の不確定特異点に対し、さらに極限操作を施すことで、新たな微分方程式を得ることができる。これらは特異点の合流とは少し異なる極限操作である<sup>266</sup>。

クンマーの合流型超幾何微分方程式において、 $z \rightarrow z/\alpha$  と置くと

$$\left[ \alpha z \frac{d^2}{dz^2} + (\gamma\alpha - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right] f(z) = 0 \quad (18.43)$$

となる。ここにおいて  $\alpha \rightarrow \infty$  極限をとると、 ${}_0F_1$  微分方程式が得られる<sup>267</sup>。

**定義 18.5** ( ${}_0F_1$  微分方程式とベッセルの微分方程式 (Bessel's differential equation)). 以下の微分方程式

$$\left[ z \frac{d^2}{dz^2} + \gamma \frac{d}{dz} - 1 \right] f(z) = 0 \quad (18.44)$$

は、 $z = 0$  に確定特異点を、 $z = \infty$  に位数 3/2 の不確定特異点を持つ。これを「 ${}_0F_1$  微分方程式」と呼ぶ。

<sup>265</sup>  $z = -\infty$  と  $z = \infty$  は  $w = 1/z$  の変換の下では同じ点になることに注意。

<sup>266</sup> だが、より抽象的なレベルで見れば、合流と統一的に眺められる極限操作であることも知られている。木村弘信「一変数特殊関数再訪」数理解析研究所講義録 919 巻 1995 年 1-11 またこの視点で眺めることにより、ガウスの超幾何関数から始まる特殊関数の系列はこの 5 種類で尽きていることも確認できる。

<sup>267</sup> 坂井秀隆『常微分方程式』東京大学出版会の呼び方に従ったが、あまり一般的なものではないと思う。

これを  $z \rightarrow -s^2/4$ 、 $f(z) = s^k g(s)$ 、 $k = 1 - \gamma$  と置き直すと

$$\left[ s^2 \frac{d^2}{ds^2} + s \frac{d}{ds} + (s^2 - k^2) \right] g(s) = 0 \quad (18.45)$$

が得られる。これを「ベッセルの微分方程式」と呼ぶ。

また、エルミート・ウェーバー方程式と等価な式 (18.42) において、 $z \rightarrow (2/\varepsilon^3) + \varepsilon z$ 、 $\alpha = 1/2 - 1/\varepsilon^6$  と置くと

$$\left[ \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{z}{\varepsilon^2} - \frac{\varepsilon^2 z^2}{4} \right] f(z) = 0 \quad (18.46)$$

となる。これに対し、全体に  $\varepsilon^2$  をかけて  $\varepsilon \rightarrow 0$  極限をとると、エアリーの微分方程式が得られる。

**定義 18.6** (エアリーの微分方程式 (Airy's differential equation) )。以下の微分方程式

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} - z \right] f(z) = 0 \quad (18.47)$$

は  $z = \infty$  に位数  $5/2$  の不確定特異点を持つ。これを「エアリーの微分方程式」と呼ぶ。

合流で得られる関数を整理すると図 38 のようになる。

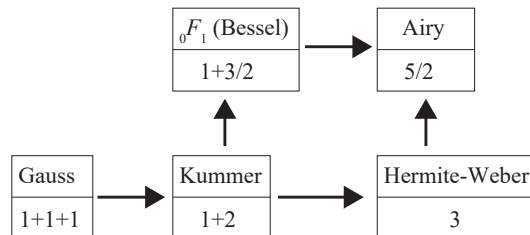


図 38: 合流でどの関数が得られるのかをまとめたもの。下の  $1+2$  のような数字は、特異点の数とその位数を表す。

[18-5].  ${}_0F_1$  微分方程式において、関数を  $f(z) \rightarrow z^{-\gamma/2} f(z)$  と置き直したうえで、変数変換  $z \rightarrow (1/\varepsilon^3) + z/\varepsilon^2$ 、 $\gamma = 2\varepsilon^{-3/2}$  を行って  $\varepsilon \rightarrow 0$  極限をとると、合流が生じてエアリーの微分方程式が得られることを示せ。

追加の極限操作で何が起きているのか、もう少し詳しく見てみよう。 ${}_0F_1$  微分方程式について、極限をとる前 (式 (18.43)) ととった後 (式 (18.44)) とで、 $w = 1/z$  と置き替えた微分方程式はそれぞれ

$$\left[ -2\alpha \frac{d^2}{dw^2} + \left( \frac{1}{w^2} - \frac{2\alpha}{w} - \frac{\gamma\alpha}{w} \right) \frac{d}{dw} - \alpha \frac{1}{w^3} \right] f(w) = 0 \quad (18.48)$$

$$\left[ -2 \frac{d^2}{dw^2} - \left( \frac{2}{w} + \frac{\gamma}{w} \right) \frac{d}{dw} - \frac{1}{w^3} \right] f(w) = 0 \quad (18.49)$$

である。クンマーの超幾何微分方程式 (18.48) では、1 階微分と 0 階微分の係数の  $w = 0$  での位数はそれぞれ 2 と 3 なので、微分方程式全体の位数は  $\max(2, 3/2) = 2$  である。一方、 ${}_0F_1$  微分方程式 (18.49) では、1 階微分と 0 階微分の係数の  $w = 0$  での位数はそれぞれ 1 と 3 なので、微分方程式全体の位数は  $\max(1, 3/2) = 3/2$  である。

同様に、エアリーの微分方程式について、極限をとる前 ((18.46)) ととった後 ((18.47)) とで、 $w = 1/z$

と置き替えた微分方程式はそれぞれ

$$\left[ -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{2}{\varepsilon^2 w} \frac{d}{dw} - \frac{1}{\varepsilon^2 w^5} - \frac{\varepsilon^2}{4w^6} \right] f(w) = 0 \quad (18.50)$$

$$\left[ -\frac{d^2}{dw^2} - \frac{2}{w} \frac{d}{dw} - \frac{1}{w^5} \right] f(w) = 0 \quad (18.51)$$

である。エルミート・ウェーバー方程式 (18.50) では、1 階微分と 0 階微分の係数の  $w = 0$  での位数はそれぞれ 1 と 6 なので、微分方程式全体の位数は  $\max(1, 6/2) = 3$  である。一方、エアリーの微分方程式 (18.51) では、1 階微分と 0 階微分の係数の  $w = 0$  での位数はそれぞれ 1 と 5 なので、微分方程式全体の位数は  $\max(1, 5/2) = 5/2$  である。

超幾何関数には、微分方程式以外にも級数表示と積分表示という表示があった。合流型についても同様に級数表示と積分表示がある。

例えば、ガウスからクンマーへの極限を級数表示でとれば

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; z) := \lim_{\beta \rightarrow \infty} F(\alpha, \beta; \gamma; \frac{z}{\beta}) := \sum_{n=0}^{\infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} \frac{z^n}{\beta^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{n! (\gamma)_n} z^n \quad (18.52)$$

が得られる。ただし  $\lim_{\beta \rightarrow \infty} (\beta)_n / \beta^n = 1$  を用いた。同様にして、 ${}_0F_1$  微分方程式の解の級数表示、

$${}_0F_1(\gamma; z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (\gamma)_n} z^n \quad (18.53)$$

も得られる。

[18-6]. クンマーの超幾何微分方程式 (18.39) の一つの解は  ${}_1F_1(\alpha; \gamma; z)$  である。もう一つの解を  ${}_1F_1$  を用いて表せ。

積分表示も、同様にして極限を取れば得られる。例えば、ガウスからクンマーの場合ならば、

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; z) &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} F(\alpha, \beta; \gamma; \frac{z}{\beta}) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} \left(1 - \frac{sz}{\beta}\right)^{-\beta} \\ &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_0^1 ds s^{\alpha-1} (1-s)^{\gamma-\alpha-1} e^{sz} \end{aligned} \quad (18.54)$$

と、簡単に書き直すことができる。

前の章で見た 3 つの古典的直交多項式も、これらの超幾何関数または合流型超幾何関数を用いて表せる。エルミート多項式は、すでに見たようにエルミート・ウェーバー方程式 (18.41) と本質的に等価であり、 $z = \infty$  に位数 3 の不確定特異点を持つ。ヤコビ多項式はガウスの超幾何関数で、ラゲール陪多項式はクンマーの合流型超幾何関数で、それぞれ以下のように表せる<sup>268</sup>。

$$J_n(x) = \binom{n+a}{n} \cdot F(-n, n+a+b+1; a+1; \frac{1-x}{2}) \quad (18.55)$$

$$L_n(x) = (-1)^a \frac{(\Gamma(n))^2}{\Gamma(a)\Gamma(n-a)} {}_1F_1(a-n, a+1; x) \quad (18.56)$$

ベッセルの微分方程式やエアリーの微分方程式、あるいは前章のエルミートの微分方程式や（ヤコビ多項式の特別な場合の）ルジャンドルの微分方程式は、物理や応用数学の色々なところに（変数変換をすることで）顔を出す。また、こうした微分方程式の解である特殊関数は、その特殊関数特有のさまざまな漸化式、加法定理、積分表示、漸近展開公式などを持つ<sup>269</sup>。しかし、そうした個別の性質は、実際に必要が生じた

<sup>268</sup> これらの超幾何級数は  $(-n)_m$  や  $(a-n)_m$  のような項を和の分子に含むため、ある大きさ以上の  $m$  では値がすべてゼロとなり、有限次数の多項式となる。

<sup>269</sup> ベッセル関数については、式 (18.45) の  $k$  が整数や半整数の場合に限って成り立つ関係式なども多い。

ときに必要な事柄について調べた方が明らかに有用なので、ここでは「調べれば色々出てくる可能性がある」という事実だけを頭に止めておいてもらい、それ以上の深入りはしないことにする。

### 18.5 隣接関係と変換公式

ある超幾何関数についての性質が分かったときに、それと似た超幾何関数についても、同じような性質を持っているのではないかと期待するのは自然である。超幾何関数の「隣接関係 (contiguity relation)」とは、ある超幾何関数とそれから一つの引数だけ  $\pm 1$  変化させた超幾何関数 (たち) を結び付ける関係式である。また、「 $\sim$ 次変換公式」とは、超幾何関数の変数  $z$  を  $n$  次式に変換した場合の超幾何関数を、引数  $z$  の超幾何関数で表す関係式である。

こうした超幾何関数の満たす関係式は非常に膨大なので、どのような関係式があるのかを見るために、ここではそのほんの一部だけを紹介する。そうした関係式を集めた文献<sup>270</sup> はいろいろあるので、必要が生じた際にはそうした文献を見れば有益な関係式が得られるかもしれない、ということだけ頭に置いておけばよい。

まず隣接関係から考えよう。これを説明するため、 $D := z \frac{d}{dz}$  という記号を導入する。すると、

$$(D + \alpha)F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} (n + \alpha) \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha + 1)_n (\beta)_n}{n! (\gamma)_n} z^n = \alpha F(\alpha + 1, \beta; \gamma; z) \quad (18.57)$$

という微分を用いた隣接関係が得られる。ここで  $(n + \alpha)(\alpha)_n = \alpha(\alpha + 1)(\alpha + 2) \cdots (\alpha + n - 1)(\alpha + n) = \alpha(\alpha + 1)_n$  を用いた。

微分を用いない場合には、3つの超幾何関数の間の関係式が得られる。例えば、以下のような関係式が成り立つことが知られている。

$$\gamma(1 - z)F(\alpha, \beta; \gamma; z) - \gamma F(\alpha, \beta - 1; \gamma; z) + (\gamma - \alpha)zF(\alpha, \beta; \gamma + 1; z) = 0 \quad (18.58)$$

証明は、左辺の  $z^n$  の係数を書き出すと

$$\begin{aligned} & \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma + 1)_{n-1}} \left( \frac{1}{n!} - \frac{1}{(n-1)!} \frac{\gamma + n - 1}{(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)} - \frac{\beta - 1}{\beta + n - 1} \frac{1}{n!} + (\gamma - \alpha) \frac{1}{(n-1)!} \frac{1}{(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)} \right) \\ &= \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma + 1)_{n-1}} \left( \frac{n}{\beta + n - 1} \frac{1}{n!} + \frac{1}{(n-1)!} \frac{-\alpha - n + 1}{(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (18.59)$$

とゼロになることから示せる。ガウスはこのような隣接関係を 15 個見つけている。これらを利用して、さらに新しい隣接関係を見つけることも出来る。

次に、変数  $z$  を変換する場合の変換公式を見よう。これは、級数表示、積分表示、微分方程式表示など、色々な方法を用いて様々な関係式が導ける。次数ごとの変換のリストも導かれている<sup>271</sup>。

ここでは、ガウスの超幾何微分方程式 (18.23) を出発点にして二次変換公式の一つ導出してみよう。 $\gamma = (\alpha + \beta + 1)/2$  と置くと

$$\left[ z(z-1) \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\alpha + \beta + 1}{2} (1-2z) \frac{d}{dz} + \alpha\beta \right] f(z) = 0 \quad (18.60)$$

という微分方程式が得られる。 $F(\alpha, \beta; \frac{\alpha + \beta + 1}{2}; z)$  はこの解のうち、 $z = 0$  が特異点とならないものである。

ここで、 $y = 4z(1 - z)$  という変数変換を行うと、

$$\frac{df}{dz} = \frac{dy}{dz} \frac{df}{dy} = 4(1 - 2z) \frac{df}{dy} = 4\sqrt{1 - y} \frac{df}{dy} \quad (18.61)$$

$$\frac{d^2 f}{dz^2} = \frac{d}{dz} \left( 4(1 - 2z) \frac{df}{dy} \right) = 16(1 - y) \frac{d^2 f}{dy^2} - 8 \frac{df}{dy} \quad (18.62)$$

<sup>270</sup> 例えば H. Bateman and A. Erdélyi, *Higher Transcendental Functions*, McGraw-Hill Inc. (1953) など。

<sup>271</sup> ネットで読める日本語で解説した記事としては、子葉「超幾何関数の変換」(<https://www.dropbox.com/s/lia8t19srg511hy/hypergeometric.pdf?dl=0>) がある。

と  $z$  微分を  $y$  微分に書き換えられる。これらを式 (18.60) に代入して全体を 4 で割ると

$$\left[ y(y-1) \frac{d^2}{dy^2} - \left( \frac{\alpha+\beta+1}{2} - \left( \frac{\alpha+\beta}{2} + 1 \right) y \right) \frac{d}{dy} - \frac{\alpha\beta}{4} \right] f(y) = 0 \quad (18.63)$$

と、再び超幾何微分方程式が得られる。 $y=0$  が特異点にならない解は  $F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\beta}{2}; \frac{\alpha+\beta+1}{2}; y\right) = F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\beta}{2}; \frac{\alpha+\beta+1}{2}; 4z(1-z)\right)$  である。これは元々の微分方程式 (18.60) の解と一致しないといけなないので

$$F\left(\alpha, \beta; \frac{\alpha+\beta+1}{2}; z\right) = F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\beta}{2}; \frac{\alpha+\beta+1}{2}; 4z(1-z)\right) \quad (18.64)$$

という二次変換公式が成り立つことが分かる。

## 18.6 誤差関数への応用

大体の級数展開可能な関数は、超幾何関数、超幾何級数を用いれば記述することができる。一つの例として、誤差関数を書き下してみよう。

「誤差関数 (error function)」とは、ガウス分布の  $[-x, x]$  の領域の面積

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2} \quad (18.65)$$

のことである。これと本質的に同一な「相補誤差関数 (complementary error function)」は、ガウス分布のテール部分の面積

$$\operatorname{erfc}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty dt e^{-t^2} \quad (18.66)$$

で定義される。これらは初等関数の範囲では書き下せないことが知られている<sup>272</sup> が、超幾何関数を用いれば記述することができる。

まず誤差関数の積分中の  $e^{-t^2}$  を級数展開し、項ごとに積分を実行することで、

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{n!} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} \quad (18.67)$$

という級数展開が得られる。さらにこれに  $e^{x^2}$  を掛けて変形を進めると

$$e^{x^2} \operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} x^{2m} \right) \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \left( \sum_{l=0}^k \frac{(-1)^l}{l!(2l+1)(k-l)!} \right) x^{2k+1} \quad (18.68)$$

が得られる。二つ目の等式では  $k = n + m$  として  $k$  の和をとった。このカッコ内の和は

$$\sum_{l=0}^k \frac{(-1)^l}{l!(2l+1)(k-l)!} = \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k \frac{(-1)^l}{2l+1} \binom{k}{l} = \frac{1}{k!} \int_0^1 dx (1-x^2)^k = \frac{1}{k!} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos^{2k+1} \theta = \frac{1}{k!} \frac{(2k)!!}{(2k+1)!!} \quad (18.69)$$

と計算できる。ただし  $n!! = n(n-2)(n-4)\dots$  は一つ飛ばしの階乗記号である。最後の三角関数のべき乗の積分はよく知られたものである<sup>273</sup>。これを代入したうえで  $(2k)!!/k! = 2^k$  を用いると、誤差関数は

$$\operatorname{erf} x = e^{-x^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k}{(2k+1)!!} x^{2k+1} = e^{-x^2} \frac{2x}{\sqrt{\pi}} {}_1F_1(1, 3/2; x^2) \quad (18.70)$$

と、合流型超幾何関数を用いて書ける。

<sup>272</sup> 不定積分  $\int dt e^{-t^2}$  が初等関数の範囲内で解けないことが証明されている。

<sup>273</sup>  $I_n = \int d\theta \cos^n \theta$  とすると、 $\int d\theta \cos^n \theta = \int d\theta \cos^{n-2} \theta (1 - \sin^2 \theta) = I_{n-2} - \left[ -\frac{\cos^{n-1} \theta}{n-1} \sin \theta \right]_0^{\pi/2} - \int d\theta \frac{\cos^n \theta}{n-1}$  より  $I_n = \frac{n-1}{n} I_{n-2}$  が得られる。これを繰り返し用いることでこの表示式を得る。

ちなみに、誤差関数と相補誤差関数は、二階線形微分方程式

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + 2x \frac{d}{dx} \right] f(x) = 0 \quad (18.71)$$

の二つの解でもある。このことは、

$$\frac{d}{dx} \operatorname{erf}(x) = \frac{d}{dx} \operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (18.72)$$

であることから直ちに確認できる。

## 19 楕円関数

この章では、超幾何関数と並んで重要な特殊関数の一群である、楕円関数を取り扱う。楕円関数は、複素関数論の枠組で議論が展開されることが多いが、同時に力学の問題から整数論など<sup>274</sup>まで幅広い応用を持つ<sup>275</sup>。

### 19.1 楕円積分とヤコビの楕円関数

楕円関数は、三角関数のある種の拡張として導入できる。よく知られているように、三角関数の逆関数は積分表示できる。すなわち

$$y = \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \quad (19.1)$$

$$\rightarrow x =: \sin y \quad (19.2)$$

という関係が成り立つ。そこでこれを少し一般化して

$$y = \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (19.3)$$

$$\rightarrow x =: \operatorname{sn} y \quad (19.4)$$

で関数  $\operatorname{sn}$  を定義する<sup>276</sup>。これを「ヤコビの楕円関数 (Jacobi elliptic functions)」という。ヤコビの楕円関数は本当はパラメータ  $k$  に依存している。それを明示する際には  $\operatorname{sn}(y, k)$  のように書く。

三角関数は  $\sin$  以外に  $\cos$  などがあるが、それと同様にヤコビの楕円関数にも  $\operatorname{sn}$  以外に

$$\operatorname{cn} y = \sqrt{1 - \operatorname{sn}^2 y} \quad (19.5)$$

$$\operatorname{dn} y = \sqrt{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 y} \quad (19.6)$$

などがある<sup>277</sup> <sup>278</sup>。 $k = 0$  のときにはヤコビの楕円関数は通常の三角関数に一致する。

$$\operatorname{sn}(x, 0) = \sin x \quad (19.9)$$

$$\operatorname{cn}(x, 0) = \cos x \quad (19.10)$$

$$\operatorname{dn}(x, 0) = 1 \quad (19.11)$$

これを見ると、 $\operatorname{sn}$ ,  $\operatorname{cn}$  がそれぞれ  $\sin, \cos$  の一般化に対応しており、 $\operatorname{dn}$  は半径に対応していると見ることができる。

<sup>274</sup>例えば、 $n$  が五角数 ( $n = k(3k+1)/2$  と表せる和) でない限り、「 $n$  を偶数個の相異なる正整数の和で表す方法」と「 $n$  を奇数個の相異なる正整数の和で表す方法」の場合の数は一致するという「オイラーの五角数定理」や、すべての自然数は高々4個の平方数の和で表せるという「ラグランジュの四平方定理」などが、楕円関数 (正確には、それと密接に関連したテータ関数) を用いて証明出来る。また、五次方程式には四則演算とべき根を用いた解の公式は存在しないことはよく知られているが、上記テータ関数を用いた解の公式も存在する。

<sup>275</sup>楕円関数について書いてある教科書・テキストとしては、ヤコビの楕円関数という具体的な関数を中心に考察するものと、複素関数論の観点から抽象的に楕円関数を議論するものとの、大きく分けることが出来る。前者の教科書としては、戸田盛和『楕円関数入門』日本評論社、後者の教科書としては梅村浩『楕円関数論 楕円曲線の解析学』東京大学出版会、エリアス・スタイン、ラミ・シャカルチ『複素解析 (プリンストン解析学講義 II)』日本評論社の第9, 10章などがある。オンラインテキストとしては、森田健「楕円関数論」(<https://fuchino.ddo.jp/yatsugatake/ellipticx.pdf>)、Scientific Doggie 管理人「楕円関数と楕円積分」(<http://www.wannyan.net/scidog/ellipse/ellipse.pdf>) などが、両方の視点にまたがって解説している。

<sup>276</sup> $\operatorname{sn}$  は「エスエヌ」と読む。

<sup>277</sup> $\operatorname{cn}$  や  $\operatorname{dn}$  も、 $\operatorname{sn}$  のような積分の逆関数で定義することも出来る。 $k' = \sqrt{1-k^2}$  を用いて、それぞれ

$$y = \int_x^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(k'^2+k^2t^2)}} \rightarrow x = \operatorname{cn} y \quad (19.7)$$

$$y = \int_x^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(t^2-k'^2)}} \rightarrow x = \operatorname{dn} y \quad (19.8)$$

と書ける。

<sup>278</sup>順に「シーエヌ」「ディーエヌ」と読む。

ここまでの説明では、なぜこれらの関数が「楕円」関数と呼ばれるのか、よく分からなかったと思う。これが楕円関数と呼ばれるのは、sn の定義に現れた積分が「楕円積分」と呼ばれているからである。

$x$  及び  $x$  の多項式  $p(x)$  の平方根を用いた有理式  $f$  の積分

$$\int f(x, \sqrt{p(x)}) dx \quad (19.12)$$

を考えよう。 $p(x)$  が一次または二次のときは、この積分は初等関数の範囲で実行できるが、それより高次の場合は一般には初等関数の範囲では積分できない。特に  $p(x)$  が三次または四次のときのこの積分を「楕円積分 (elliptic integral)」という。楕円積分は変数変換により、以下の3つのどれかに帰着できることが知られている<sup>279</sup>。

$$F(x, k) := \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (19.13)$$

$$E(x, k) := \int_0^x \sqrt{\frac{1-k^2t^2}{1-t^2}} dt \quad (19.14)$$

$$\Pi(a; x, k) := \int_0^x \frac{dt}{(1-at^2)\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (19.15)$$

これら3つの積分を、順に第1種、第2種、第3種の楕円積分と呼ぶ。またこの形の積分の表示を「ヤコビの標準形 (Jacobi normal form)」と呼ぶ。ヤコビの楕円関数 sn は、第1種楕円積分の逆関数として定義されている。

$t = \sin \theta$  と変数変換することで、ヤコビの標準形は以下の「ルジャンドルの標準形」に書き換えられる。

$$F(\phi, k) := \int_0^\phi \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}} \quad (19.16)$$

$$E(\phi, k) := \int_0^\phi \sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta} d\theta \quad (19.17)$$

$$\Pi(a; \phi, k) := \int_0^\phi \frac{d\theta}{(1-a \sin^2 \theta)\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}} \quad (19.18)$$

特に  $\phi = \frac{\pi}{2}$  としたものを「完全楕円積分」という。

さて、長径1、短径  $k$  の楕円

$$x^2 + \frac{y^2}{k^2} = 1 \quad (19.19)$$

の  $x=0$  から  $x=x'$  までの周長を計算しよう。曲線の長さの公式  $L = \int \sqrt{1+(dy/dx)^2} dx$  を用いると、

$$L = \int_0^{x'} \sqrt{1 + \left(\frac{kt}{\sqrt{1-t^2}}\right)^2} dt = \int_0^{x'} \sqrt{\frac{1-(1-k^2)t^2}{1-t^2}} dt = \int_0^{x'} \sqrt{\frac{1-k'^2t^2}{1-t^2}} dt \quad (19.20)$$

と第2種楕円積分の形になる。ただし  $k' = \sqrt{1-k^2}$  と置いた。これが「楕円」積分の名前の由来である。ただ、楕円の周長と結びつくのは第2種楕円積分なのに対し、ヤコビの楕円関数は第1種楕円積分を用いて定義されるので、ヤコビの楕円関数と楕円との結びつきは強くなく、呼び名は慣習的なものだと思っておいた方がいい。

## 19.2 ヤコビの楕円関数の基本性質

ここからは、ヤコビの楕円関数及び楕円積分が持つ性質を見ていこう。

### 微分

楕円積分  $y = F(x, k)$  ( $x = \text{sn } y$ ) を  $x$  微分すると

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}} = \frac{1}{\sqrt{(1-\text{sn}^2 y)(1-k^2 \text{sn}^2 y)}} = \frac{1}{\text{cn } y \text{ dn } y} \quad (19.21)$$

<sup>279</sup>これは  $p(x)$  が三次であるか四次であるかによらない。



が成り立つ。よって sn の微分は

$$\frac{d}{dy} \operatorname{sn} y = \frac{dx}{dy} = \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y \quad (19.22)$$

と書けることが分かる。cn と dn は sn を用いて書けるので、これらの微分も容易に求まる。結果を記すと

$$\frac{d}{dy} \operatorname{cn} y = -\operatorname{sn} y \operatorname{dn} y \quad (19.23)$$

$$\frac{d}{dy} \operatorname{dn} y = -k^2 \operatorname{sn} y \operatorname{cn} y \quad (19.24)$$

である。

[19-1]. cn の微分の式を導け。

### 加法定理

三角関数は、加法定理  $\sin(x+y) = \sin x \cos y + \sin y \cos x$  を満たす。これと同様に、ヤコビの楕円関数も加法定理を満たす。天下りだが、sn は以下の加法定理を満たす。

$$\operatorname{sn}(x+y) = \frac{\operatorname{sn} x \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2 y} \quad (19.25)$$

この加法定理 (19.25) を証明しよう。それには、 $x+y=c$  と置いた式

$$\operatorname{sn} c = \frac{\operatorname{sn} x \operatorname{cn}(c-x) \operatorname{dn}(c-x) + \operatorname{sn}(c-x) \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2(c-x)} = \frac{\operatorname{sn} x (\operatorname{sn}(c-x))' + \operatorname{sn}(c-x) (\operatorname{sn} x)'}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2(c-x)} \quad (19.26)$$

の右辺の  $x$  微分がゼロであることを確認すれば十分である ( $x=0$  のときに右辺 =  $\operatorname{sn} c =$  左辺であることは簡単に確認できるので)。式 (19.26) 右辺の分子を  $N$ 、分母を  $D$  と置く。 $N/D$  の微分は  $(N'D - D'N)/D^2$  なので、 $N'D = D'N$  が示せば十分である。sn の 2 階微分が

$$(\operatorname{sn} x)'' = (\operatorname{cn} x)' \operatorname{dn} x + \operatorname{cn} x (\operatorname{dn} x)' = \operatorname{sn} x (-\operatorname{dn}^2 x - k^2 \operatorname{cn}^2 x) = -(1+k^2) \operatorname{sn} x + 2k^2 \operatorname{sn}^3 x \quad (19.27)$$

を満たすことを用いれば、 $N$  と  $D$  の微分はそれぞれ

$$N' = 2k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{sn}(c-x) (\operatorname{sn}^2 x - \operatorname{sn}^2(c-x)) \quad (19.28)$$

$$D' = 2k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{sn}(c-x) [\operatorname{sn} x \operatorname{cn}(c-x) \operatorname{dn}(c-x) - \operatorname{sn}(c-x) \operatorname{cn} x \operatorname{dn} x] \quad (19.29)$$

だと分かる。これを代入して頑張って計算すると

$$N'D = D'N \quad (19.30)$$

が示せる。

ちなみに、cn と dn もそれぞれ以下の加法定理を満たす。

$$\operatorname{cn}(x+y) = \frac{\operatorname{cn} x \operatorname{cn} y - \operatorname{sn} x \operatorname{sn} y \operatorname{dn} x \operatorname{dn} y}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2 y} \quad (19.31)$$

$$\operatorname{dn}(x+y) = \frac{\operatorname{dn} x \operatorname{dn} y - k^2 \operatorname{sn} x \operatorname{sn} y \operatorname{cn} x \operatorname{cn} y}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 x \operatorname{sn}^2 y} \quad (19.32)$$

元々の (積分を用いて定義された) ヤコビの楕円関数  $\operatorname{sn} x$  は、 $K = F(\frac{\pi}{2}, k)$  を用いて  $-K \leq x \leq K$  の範囲でしか定義できていなかった。しかし、三角関数の場合と同様に、加法定理を用いて値を定義していくことで、定義域を実数全体に拡張できる。そうすると、例えば sn は  $x=K$  で対称な形

$$\operatorname{sn} x = \operatorname{sn}(2K - x) \quad (19.33)$$

をしており、周期が  $4K$  である

$$\operatorname{sn}(4K + x) = \operatorname{sn} x \quad (19.34)$$

ことなどが分かる<sup>280</sup>。

[19-2]. 式 (19.33) を導出せよ。

### 完全楕円積分の超幾何関数表示

完全楕円積分は超幾何関数を用いて表すことができる。第一種完全楕円積分は、

$$\begin{aligned} F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) &= \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2\sin^2\theta}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(-1)^n (2n-1)!!}{2^n} (-k^2)^n \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2n}\theta \end{aligned} \quad (19.35)$$

となる。ただし最後の等式では  $1/\sqrt{1-x}$  をテイラー展開した。  $\int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2n}\theta = \frac{\pi}{2} \frac{(2n-1)!!}{2n!!}$  なので、これを代入して整理することで第一種完全楕円積分は

$$F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \frac{\pi}{2} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; k^2\right) \quad (19.36)$$

と超幾何関数を用いて表せる。

同様に、第二種完全楕円積分は

$$E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \frac{\pi}{2} F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; k^2\right) \quad (19.37)$$

と表せる。

## 19.3 力学への応用

この節では、ヤコビの楕円関数の力学への応用をいくつか見ることにしよう。実は、高校の物理と大学1年の力学でそれぞれ、ヤコビの楕円関数が必要となる問題を既に見ているはずである。まずはそれらを確認していくことにしよう。

### 振り子の運動

長さ  $l$ 、先端の質点の質量  $m$  の振り子の運動を考えよう。鉛直方向に対して振り子のなす角度  $\theta$  を変数にとり、これが満たす微分方程式を考えたい。質点の運動方程式を直接考えてもよいが、エネルギー保存則が

$$\frac{1}{2}ml^2 \left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 + mgl(1 - \cos\theta) = E \quad (19.38)$$

と書けるので、これを出発点にする。振り子が到達する最大角を  $\theta_0$  とすると、 $E = mgl(1 - \cos\theta_0)$  である。これを用いて整理すると、 $\theta$  は微分方程式

$$\frac{d\theta}{dt} = \sqrt{\frac{2g}{l}(\cos\theta - \cos\theta_0)} = 2\sqrt{\frac{g}{l} \left(\sin^2\frac{\theta_0}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right)} \quad (19.39)$$

を満たすと分かる。変数を  $x = \sin\frac{\theta}{2}/\sin\frac{\theta_0}{2}$ 、 $k = \sin\frac{\theta_0}{2}$  と置くと、 $\frac{dx}{dt} = \sqrt{1-k^2x^2}/2k$  が得られるので、

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{g}{l}(1-x^2)(1-k^2x^2)} \quad (19.40)$$

が得られる。この微分方程式は変数分離法で解けて

$$\int \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}} = \sqrt{\frac{g}{l}} \int dt \quad (19.41)$$

<sup>280</sup>  $\operatorname{cn}$  は周期  $4K$ 、 $\operatorname{dn}$  は周期  $2K$  である。後の節で複素方向への拡張を見るが、 $\operatorname{cn}$  と  $\operatorname{dn}$  の周期は  $\operatorname{sn}$  の場合とは微妙に異なる。

となる。左辺は楕円積分そのものなので、結局

$$x = \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{g}{l}}(t - t_0), k \right) \quad (19.42)$$

が解となる。変数を元に戻すと

$$\theta(t) = 2 \arcsin \left[ \sin \frac{\theta_0}{2} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{g}{l}}(t - t_0), \sin \frac{\theta_0}{2} \right) \right] \quad (19.43)$$

が解として得られる。

振り子の運動がヤコビの楕円関数（あるいは楕円積分）を用いて解けたわけだが、「振り子の問題で現れる積分を楕円積分と名付けた」と見てもよいわけで、そうみるならばこれは単に名前を付けただけであり、そこまで「応用して解けた」というほどでもないかもしれない。ただし、これと同じ積分がそれ以外のさまざまな問題にも表れるということは、注目に値する。

### オイラーのコマ

一点が固定された三次元空間中の剛体の運動を考察しよう<sup>281</sup>。角運動量の変化についての式

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L} = \mathbf{N} \quad (19.44)$$

を出発点にする。ただし  $\mathbf{L} = I\boldsymbol{\omega}$  は角運動量ベクトル ( $I$  は慣性モーメントテンソル、 $\boldsymbol{\omega}$  は角速度ベクトル)、 $\mathbf{N}$  はこの剛体にかかっている固定点回りのトルクである。ここから、角速度ベクトル  $\boldsymbol{\omega}$  の時間発展を導く。

式 (19.44) は外部にある慣性系から見た角運動量だが、剛体の議論では「剛体に固定された座標」で見たいことが多い。実際、もし外部の慣性系から見て議論をすることになると、剛体は時々刻々向きを変えるので、慣性テンソルが時間とともに変化するという、扱いにくい状況になる。剛体に沿った座標系<sup>282</sup> で運動を見ると、運動方程式は

$$\dot{\mathbf{L}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{L} = \mathbf{N} \quad (19.45)$$

と書ける。なお、以降しばらく剛体に沿った座標系を用いるので、剛体に沿った座標系の量に対しても静止系の場合と同じ記号を用いる。 $\mathbf{L} = I\boldsymbol{\omega}$  なので、角速度ベクトルの時間発展方程式として

$$I\dot{\boldsymbol{\omega}} + \boldsymbol{\omega} \times I\boldsymbol{\omega} = \mathbf{N} \quad (19.46)$$

が得られる。特に慣性主軸を座標軸にとれば、 $L_i = I_i\omega_i$  が成り立ち、式 (19.46) は

$$I_1\dot{\omega}_1 - \omega_2\omega_3(I_2 - I_3) = N_1 \quad (19.47)$$

$$I_2\dot{\omega}_2 - \omega_3\omega_1(I_3 - I_1) = N_2 \quad (19.48)$$

$$I_3\dot{\omega}_3 - \omega_1\omega_2(I_1 - I_2) = N_3 \quad (19.49)$$

である。これは1年生の力学の講義で習った「オイラーの運動方程式」である。

特にトルクがない状況、 $\mathbf{N} = \mathbf{0}$ 、を考えよう。この設定は「オイラーのコマ (Euler's top)」とも呼ばれる。重心が固定されている場合や、剛体を放り投げて重心座標で見ている場合などがこれに相当する。以下  $I_1 > I_2 > I_3$  とする<sup>283</sup>。また、 $L^2 > 2EI_2$  が成り立つとする（この不等式が逆の場合は、以下の  $I_1$  と  $I_3$  を逆にする）。

エネルギー保存則は

$$\frac{1}{2} \left( \frac{L_1^2}{I_1} + \frac{L_2^2}{I_2} + \frac{L_3^2}{I_3} \right) = \frac{1}{2} (I_1\omega_1^2 + I_2\omega_2^2 + I_3\omega_3^2) = E \quad (19.50)$$

<sup>281</sup> オイラーのコマとラグランジュのコマについては、ランダウ、リフシッツ『力学 増訂第3版』の記述を参照した。

<sup>282</sup> 外部に固定された座標系から見ると、角運動量保存則より  $\mathbf{L}$  は時間変化しない。一方、剛体に沿った座標系から見ると、剛体が回転することにより  $\mathbf{L}$  の向きが変化する。

<sup>283</sup>  $I_i$  のどれか2つが等しければ、これは調和振動になり、容易に解くことが出来る。

と書ける。また角運動量の大きさ自身も保存するので、

$$L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = I_1^2 \omega_1^2 + I_2^2 \omega_2^2 + I_3^2 \omega_3^2 = L^2 \quad (19.51)$$

も成り立つ<sup>284</sup>。ただし  $L$  は角運動量ベクトルの長さである。この二つの保存則を用いると、式 (19.48) は

$$\frac{d\omega_2}{dt} = \frac{I_3 - I_1}{I_2} \omega_1 \omega_3 = \frac{1}{I_2 \sqrt{I_1 I_3}} \sqrt{[(2EI_3 - L^2) - I_2(I_3 - I_2)\omega_2^2] [L^2 - 2EI_1 - I_2(I_2 - I_1)\omega_2^2]} \quad (19.52)$$

と計算できる。文字が多くて分かりにくいだが、 $\omega_2$  に関わる部分だけ見ると、右辺は  $\sqrt{(a - b\omega_2^2)(c - d\omega_2^2)}$  という形をしているので、これは楕円積分に持ち込める。実際、以下のように

$$\tau := t \sqrt{\frac{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)}{I_1 I_2 I_3}}, \quad s := \omega_2 \sqrt{\frac{I_2(I_3 - I_2)}{2EI_3 - L^2}}, \quad k^2 := \frac{(I_2 - I_1)(2EI_3 - L^2)}{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)} \quad (19.53)$$

と時刻を  $t$  から  $\tau$  に、角速度を  $\omega_2$  から  $s$  に変換し、パラメータ  $k^2 < 1$  を導入すると、 $s$  (つまり  $\omega_2$ ) の微分方程式は

$$\frac{ds}{d\tau} = \sqrt{(1 - s^2)(1 - k^2 s^2)} \quad (19.54)$$

となり、

$$\tau = \int_0^s \frac{da}{\sqrt{(1 - a^2)(1 - k^2 a^2)}} \quad (19.55)$$

と楕円積分の形で解が求まる。今の変数の下だと  $s = \text{sn}(\tau, k)$  と解ける。元の変数に戻すと

$$\omega_2(t) = \sqrt{\frac{2EI_3 - L^2}{I_2(I_3 - I_2)}} \text{sn} \left( \sqrt{\frac{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)}{I_1 I_2 I_3}} t, \sqrt{\frac{(I_2 - I_1)(2EI_3 - L^2)}{(I_3 - I_2)(L^2 - 2EI_1)}} \right) \quad (19.56)$$

が解である。

#### <補論>：ラグランジュのコマ

次に、重心ではない一点が固定された対称なコマの一樣重力下の運動を解析しよう。特に、 $I_1 = I_2 \neq I_3$  であり、 $I_3$  の慣性主軸上の一点が固定されているものとする。これは「ラグランジュのコマ (Lagrange's top)」とも呼ばれる。典型例は一点で地面に接する軸対称なコマである。今回の設定の場合、座標系は剛体に固定されたものではなく、コマの外部に固定されたものを用いた方がよい。特に、固定点を原点とした対称軸の向きの極座標  $(\theta, \phi)$  と、対称軸周りの回転角  $\psi$  の3変数で状態を指定する<sup>285</sup> ことにする (図 39)。 $\phi$  方向の軸の回転をコマの「歳差運動<sup>286</sup> (precession)」、 $\theta$  方向の軸の振動をコマの「章動 (nutation)」という<sup>287</sup>。

$\phi$  方向回転が  $I_1$  軸と  $I_3$  軸が混ざり合う向きであることに気を付けると、この系の運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2} I_1 \dot{\theta}^2 + \frac{1}{2} I_1 (\dot{\phi} \sin \theta)^2 + \frac{1}{2} I_3 (\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta)^2 \quad (19.57)$$

と書けることが分かる<sup>288</sup>。コマの質量を  $M$ 、固定点から重心までの距離を  $l$  とすると、ラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2} I_1 (\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \sin^2 \theta) + \frac{1}{2} I_3 (\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta)^2 - Mgl \cos \theta \quad (19.58)$$

と書ける。見ると明らかのように、ラグランジアンは  $\psi$  および  $\phi$  を陽に含んでいない。そのため、オイラー・

<sup>284</sup> 今剛体に沿った座標系を用いているので、各向きの角運動量は変化する。

<sup>285</sup> このような角度の指定方法を「オイラー角 (Euler angle)」という。

<sup>286</sup> 「首振り運動」「みそすり運動」「すりこぎ運動」などとも呼ばれる。

<sup>287</sup> 歳差運動は普段のコマ遊びで簡単に観察できるが、章動はなかなか見えにくい。「コマの歳差運動のシミュレーション」<https://www.youtube.com/watch?v=z kwa 0 ebx j j U> では、章動を含めたコマのシミュレーション動画が見れる。

<sup>288</sup>  $I_1 = I_2$  なので、 $x$  軸から  $\phi$  だけ回転したところを  $1$  軸にとることができる。そうすると  $\theta$  の変化は純粋な  $2$  軸周りの回転のみなせる。一方、 $\theta$  による傾きがあるため、 $\phi$  の変化は  $1$  軸周りと  $3$  軸周りの回転が混ざり合ったものになる。

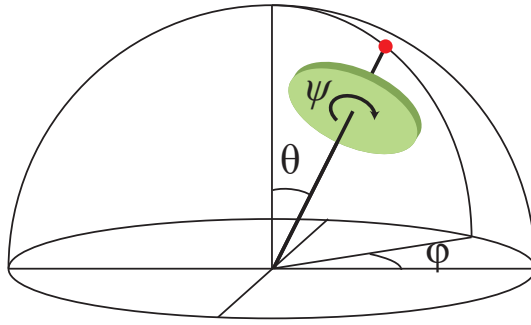


図 39: 一点が固定されたコマの運動の解析における座標の設定。回転軸に対する極座標  $(\theta, \phi)$  と、回転軸周りの剛体の回転角  $\psi$  の3変数で状態が指定できる。

ラグランジュ方程式より、

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_3(\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta) = 0 \quad (19.59)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I_1 \dot{\phi} \sin^2 \theta + I_3 \dot{\phi} \cos^2 \theta + I_3 \dot{\psi} \cos \theta = 0 \quad (19.60)$$

となり、この2つの量が時間変化しない保存量であることが直ちにわかる。保存量として、上記の二つを  $I_1$  で割った値

$$A := \frac{I_3}{I_1}(\dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta) \quad (19.61)$$

$$B := \dot{\phi} \sin^2 \theta + \frac{I_3}{I_1}(\dot{\phi} \cos^2 \theta + \dot{\psi} \cos \theta) \quad (19.62)$$

を導入しておこう。これらの値は初期状態にのみ依存して決まる量である。

$A, B$  が決まれば、 $\dot{\psi}$  と  $\dot{\phi}$  を消去して、 $\theta$  のみの運動方程式に変形することができる。式 (19.61) より  $\dot{\psi} = \frac{AI_1}{I_3} - \dot{\phi} \cos \theta$  であり、これを式 (19.62) に代入して整理すると

$$\dot{\phi} = \frac{B - A \cos \theta}{\sin^2 \theta} \quad (19.63)$$

が得られる。全エネルギー  $E = K + U$  もまた保存量なので、

$$E - \frac{I_1^2 A^2}{2I_3} = \frac{1}{2} I_1 \dot{\theta}^2 + \frac{I_1 (B - A \cos \theta)^2}{2 \sin^2 \theta} + Mgl \cos \theta \quad (19.64)$$

は保存する<sup>289</sup>。

見通しをよくするために、さらに  $u = \cos \theta$  という変数変換をする。この変数変換の下で式 (19.64) を整理すると

$$\dot{u}^2 = (1 - u^2)(C - Du) - (B - Au)^2 \quad (19.65)$$

となる。ただしここで

$$C := \frac{2E}{I_1} - \frac{I_1 A^2}{I_3} \quad (19.66)$$

$$D := \frac{2Mgl}{I_1} \quad (19.67)$$

と置いた。右辺の因数分解を  $D(u - a)(u - b)(u - c)$  と置く (三次方程式は解の公式があるので、 $A \sim D$

<sup>289</sup>後の計算の都合で、 $\frac{I_1^2 A^2}{2I_3}$  を左辺に移した。

を用いて  $a, b, c$  を書き下すこともできる)。このとき、変数変換

$$s = \sqrt{\frac{u-a}{b-a}} \quad (19.68)$$

を行うと、 $k := \sqrt{(b-a)/(c-a)}$  を用いて

$$t = \int \frac{du}{\sqrt{D(u-a)(u-b)(u-c)}} = \frac{2}{\sqrt{D(c-a)}} \int \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}} \quad (19.69)$$

となり、解はヤコビの楕円関数で記述できることが分かる。

他にも、大縄跳びの大縄の形状や座屈現象が、ヤコビの楕円関数を用いて解けることが知られている<sup>290</sup>。

#### 19.4 相加相乗平均との関係

楕円積分の応用例として、相加相乗平均との意外なつながりについて見てみたい。二つの初期値  $a_0 \geq b_0$  に対し、二つの数列  $\{a_n\}, \{b_n\}$  を

$$a_{n+1} = \frac{a_n + b_n}{2}, \quad b_{n+1} = \sqrt{a_n b_n} \quad (19.70)$$

で帰納的に定義する。つまり、 $a_{n+1}$  と  $b_{n+1}$  は、それぞれ  $a_n$  と  $b_n$  の相加平均と相乗平均だということである。

相加相乗不等式より、

$$a_n \geq a_{n+1} \geq b_{n+1} \geq b_n \quad (19.71)$$

が成り立つ。さらに

$$0 < a_{n+1} - b_{n+1} \leq a_{n+1} - b_n = \frac{1}{2}(a_n - b_n) \quad (19.72)$$

が成り立つので、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n - b_n) = 0 \quad (19.73)$$

である<sup>291</sup>。よって  $a_n$  と  $b_n$  は共通の値に収束する。これを

$$M(a_0, b_0) := \lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n \quad (19.74)$$

と書くことにする。

この量は一見楕円積分とは何も関係がないように見えるが、実は  $M(a, b)$  は楕円積分そのものであることが示せる<sup>292</sup>。

**定理 19.1.**  $a \geq b > 0$  に対し、以下が成り立つ。

$$I(a, b) := \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta}} = \frac{\pi}{2M(a, b)} \quad (19.75)$$

左辺  $I(a, b)$  は

$$\int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta}} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2(1 - (1 - b^2/a^2) \sin^2 \theta)}} = \frac{1}{a} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}\right) \quad (19.76)$$

<sup>290</sup> 戸田盛和『楕円関数入門』日本評論社に導出が出ている。

<sup>291</sup>  $(a_n - b_n) \leq (a_0 - b_0)/2^n$  である。

<sup>292</sup> 以下の証明は梅村浩『楕円関数論 楕円曲線の解析学』東京大学出版会の 6.1 節を参照した。

なので、これは第一種楕円積分そのものである<sup>293</sup>。

証明.  $I(a, b)$  の積分において、 $t = b \tan \theta$  と変数変換すると

$$I(a, b) = \frac{1}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta}} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} \quad (19.77)$$

となるので、以下ではこの右辺を考察する。

我々の目標は、

$$I(a, b) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{\left(\left(\frac{a+b}{2}\right)^2 + t^2\right) \left(\sqrt{ab}^2 + t^2\right)}} = I\left(\frac{a+b}{2}, \sqrt{ab}\right) \quad (19.78)$$

を示すことである。式 (19.78) が示せれば、 $I(a_0, b_0) = I(a_1, b_1) = \dots = I(a_\infty, b_\infty) = I(M, M) = \pi/2M$  と導きたい結果が直ちに示せる。

式 (19.78) を示すため、変数変換

$$u = \frac{1}{2} \left( t - \frac{ab}{t} \right) \quad (19.79)$$

を行う。

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{ab}{t^2} \right) = \sqrt{\frac{u^2 + ab}{t^2}} \quad (19.80)$$

と書けるので、 $0 < t < \infty$  が  $-\infty < u < \infty$  に対応することに注意すると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} &= 2 \int_0^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{\frac{(a^2 + t^2)(b^2 + t^2)}{t^2} (u^2 + ab)}} \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{(4u^2 + (a+b)^2)(u^2 + ab)}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{\left(u^2 + \left(\frac{a+b}{2}\right)^2\right) (u^2 + ab)}} \end{aligned} \quad (19.81)$$

となり、求めたかった式 (19.78) が得られた。□

この関係式を利用することによる、算術幾何平均を繰り返したとだけで非常に高速で収束する円周率計算公式を得ることも出来る<sup>294</sup>。

## 19.5 ヤコビの楕円関数の複素関数化

ヤコビの楕円関数  $\operatorname{sn}$  は楕円積分の逆関数として定義したので、そのままでは実数に対してしか定義がなされていない状態である。これを以下のように複素数に拡張する<sup>295</sup>。

まず引数が純虚数の場合を考える。そのために、 $\operatorname{sn}$  の定義式の積分に  $x = ia$  を代入した

$$\int_0^{ia} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} = i \int_0^a \frac{ds}{\sqrt{(1+s^2)(1+k^2s^2)}} \quad (19.83)$$

という積分を考える。ただし右辺への変形では  $s = -it$  という変数変換を行った。右辺の形から明らかな

<sup>293</sup> ガウスは手計算で小数点第 11 桁まで計算して、式 (19.75) が成り立つことを発見した。

<sup>294</sup> 梅村浩『楕円関数論 楕円曲線の解析学』東京大学出版会の 6.2 節に公式とその導出が出ている。結果のみ示すと、 $c_n := \sqrt{a_n^2 - b_n^2} = (a_{n-1} - b_{n-1})/2$  に対し

$$\pi = \frac{2M(1/\sqrt{2})^2}{1 - \sum_{n=0}^{\infty} 2^n c_n^2} \quad (19.82)$$

が成り立つ。

<sup>295</sup> 複素関数論の観点からトップダウンに議論を進める場合には、ヤコビのテータ関数を導入し、その比としてヤコビの楕円関数  $\operatorname{sn}$  を定義する。ここで述べるのはボトムアップのわりと泥臭いタイプの議論である。

ように、左辺の積分の結果は純虚数である。そのため、この積分の値を  $v$  と置けば

$$iv = \int_0^{ia} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (19.84)$$

$$\rightarrow ia =: \operatorname{sn}(iv) \quad (19.85)$$

で、純虚数の場合のヤコビの楕円関数を定義することにする<sup>296</sup>。

ただしこのままでは式 (19.83) 右辺の積分がどのようなものなのかよくわからない。そこで、この積分を既知のヤコビの楕円関数を用いて表すことを考える。通常の場合と同様に、ルジャンドルの標準形に近い形に変形しよう。ただし今回は項が  $(1-t^2)$  の形ではなく  $(1+s^2)$  の形をしているので、 $s = \tan \theta$  と変数変換する。すると式 (19.83) 右辺は

$$v = \int_0^a \frac{ds}{\sqrt{(1+s^2)(1+k^2s^2)}} = \int_0^\psi \frac{d\theta}{\sqrt{1-k'^2 \sin^2 \theta}} \quad (19.86)$$

と書ける。ただし  $a = \tan \psi$ 、 $k' := \sqrt{1-k^2}$  と置いた。右辺は楕円積分のルジャンドルの標準形そのものなので、ヤコビの楕円積分の定義を思い出すと、これは

$$\operatorname{sn}(v, k') = \sin \psi \quad (19.87)$$

が成り立つということである。

$\operatorname{cn}$  の定義より  $\operatorname{cn}(v, k') = \cos \psi$  が成り立つので、

$$\operatorname{sn}(iv, k) = ia = i \tan \psi = i \frac{\operatorname{sn}(v, k')}{\operatorname{cn}(v, k')} \quad (19.88)$$

と、引数が純虚数の場合の  $\operatorname{sn}$  が、パラメータ  $k'$  の  $\operatorname{sn}$  と  $\operatorname{cn}$  を用いて表せた。同様にして

$$\operatorname{cn}(iv, k) = \frac{1}{\operatorname{cn}(v, k')} \quad (19.89)$$

$$\operatorname{dn}(iv, k) = \frac{\operatorname{dn}(v, k')}{\operatorname{cn}(v, k')} \quad (19.90)$$

が得られる。

一般の複素数の場合、すなわち  $\operatorname{sn}(a+bi)$  の値は、 $\operatorname{sn}$  の加法定理 (19.25) を用いて計算すればよい。

では、複素関数  $\operatorname{sn}$  の周期、極とゼロ点を求めよう。 $\operatorname{sn}$  が周期  $4K = 4F(\frac{\pi}{2}, k)$  を持つことは既に見た。しかし、 $\operatorname{sn}$  は虚軸方向にもう一つ別の周期を持つ。

$\operatorname{sn}$  の虚軸方向の定義は式 (19.88) である。楕円積分を用いて  $K' := F(\frac{\pi}{2}, k')$  と置くと、 $\operatorname{sn}(v+2K', k') = -\operatorname{sn}(v, k')$ 、 $\operatorname{cn}(v+2K', k') = -\operatorname{cn}(v, k')$  が成り立つので、

$$\operatorname{sn}(iv+2iK', k) = \operatorname{sn}(iv, k) \quad (19.91)$$

が成り立つ。つまり、 $\operatorname{sn}$  は周期  $2iK'$  を持つ。このように2つの周期を持つ関数を「二重周期関数」という。二重周期関数については次の節で一般的な視点から詳しく考察する。

次に  $\operatorname{sn}$  の極を求めよう。 $\operatorname{cn}(v, k')$  は  $v = K'$  でゼロになるので、 $\operatorname{sn}(iK', k)$  は発散する。つまり  $\operatorname{sn}(x, k)$  は  $x = iK'$  を極に持つ。

そうすると、 $x = iK' + y$  ( $y \in \mathbb{R}$ ) の直線上はすべて極に見えるかもしれないが、実はそうはなっていない。

<sup>296</sup> 本当はこれが well-defined な定義であること (加法定理で整合的な結果を与えることなど) を確認する必要があるが、ここでは省略する。



ない。加法定理 (19.25) に代入してみると

$$\begin{aligned} \operatorname{sn}(iK' + y) &= \frac{\operatorname{sn}(iK') \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \operatorname{cn}(iK') \operatorname{dn}(iK')}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2(iK') \operatorname{sn}^2 y} \\ &= \frac{i \frac{\operatorname{sn}(K', k')}{\operatorname{cn}(K', k')} \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \frac{1}{\operatorname{cn}(K', k')} \frac{\operatorname{dn}(K', k')}{\operatorname{cn}(K', k')}}{1 + k^2 \frac{\operatorname{sn}^2(K', k')}{\operatorname{cn}^2(K', k')} \operatorname{sn}^2 y} \\ &= \frac{i \operatorname{sn}(K', k') \operatorname{cn}(K', k') \operatorname{cn} y \operatorname{dn} y + \operatorname{sn} y \operatorname{dn}(K', k')}{\operatorname{cn}^2(K', k') + k^2 \operatorname{sn}^2(K', k') \operatorname{sn}^2 y} \end{aligned} \quad (19.92)$$

なので、 $\operatorname{sn} y \neq 0$ 、 $\operatorname{sn}^2(K', k') \neq 0$  ならば、 $\operatorname{cn}(K', k') \rightarrow 0$  としても右辺は発散しない。むしろ右辺は

$$= \frac{\operatorname{dn}(K', k')}{k^2 \operatorname{sn}^2(K', k') \operatorname{sn} y} \quad (19.93)$$

となり、 $x = iK' + y$  ( $y \in \mathbb{R}$ ) の直線上では  $\operatorname{sn}$  は実数となることが分かる。極は  $y = 0$  と  $y = 2K$  の 2 か所である。

ちなみにゼロ点は、 $x = 2nK$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ) である。もちろん極とゼロ点は、二重周期に従って複素数平面全域にくまなくひろがっている。

[19-3].  $\operatorname{sn} z$  が実数をとるような複素数  $z$  を全て求めよ。

## 19.6 二重周期関数としての楕円関数

ここまで、楕円積分の逆関数という非常に具体的かつイメージしやすい形で、楕円関数の一つであるヤコビの楕円関数を導入し、それについて詳しく議論してきた。ここからは、複素関数論の立場から、抽象的に楕円関数の特徴づけていく。なお、収束性などの数学的に厳密な取り扱いは適宜端折りながら議論を進めていく。

複素数を引数に持つ関数  $f(z)$  について、ある  $\omega \in \mathbb{C}$  が存在し、 $f(z + \omega) = f(z)$  が任意の  $z \in \mathbb{C}$  で成り立つとき、この関数は周期  $\omega$  を持つという。例えば三角関数  $\cos x$ 、あるいは複素平面へ拡張した  $\cos z := (e^{iz} + e^{-iz})/2$  は、周期  $2\pi$  を持つ関数である。

これを一般化させ、二種類の異なる周期  $\omega_1, \omega_2$  を持つ関数  $f(z)$  を考えよう。つまり、任意の  $z$  について

$$f(z + \omega_1) = f(z), \quad f(z + \omega_2) = f(z) \quad (19.94)$$

が成り立つということである。ただし、 $\omega_1 = k\omega_2$  となるような実数  $k$  がある場合は単一周期的場合と変わらない<sup>297</sup> ので、 $\omega_2/\omega_1 =: \tau \notin \mathbb{R}$  の場合を考える。このような関数を「二重周期関数 (doubly periodic function)」という。

複素平面は 2 次元なので、三重周期を持つことは出来ない。よって、周期関数を最も一般化したものは二重周期関数である。そして、複素関数論における「楕円関数」とは、二重周期関数のことをいう。

**定義 19.1** (楕円関数). 複素有理関数  $f(z)$  が楕円関数であるとは、その有理関数が定数関数でない二重周期関数であることをいう。

これで楕円関数は定義できたが、しかしこれだけでは抽象的過ぎて、楕円関数 (二重周期関数) がどのような関数なのか、その性質はよくわからない。そこで以下では、楕円関数はどのような性質を持つかを考察していく。なお、引数を  $\omega_1$  で割ることで、周期は 1 と  $\tau \notin \mathbb{R}$  の楕円関数を考えれば十分なので、以下ではこの設定で考える。

以下の定理は、楕円関数の性質を議論する際に繰り返し用いられる基本的なものである。

<sup>297</sup>より正確には、 $k$  が有理数の場合は単一周期的、 $k$  が無理数の場合は  $\omega$  方向に定数の関数である。

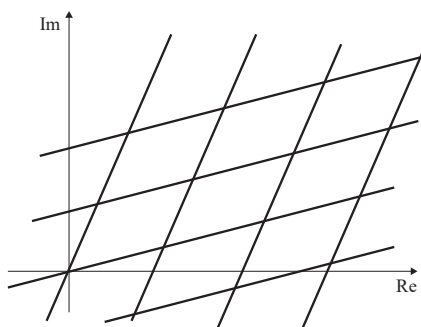


図 40: 二重周期のイメージ図。一つの平行四辺形が基本周期平行四辺形である。

**定理 19.2** (リウヴィルの第一定理 (Liouville's first theorem)). 二重周期を持つ整関数<sup>298</sup>は定数関数である。

**証明.** 二重周期を持つ整関数は有界である。複素関数論のリウヴィルの定理により、有界な整関数は定数関数のみである<sup>299</sup>。 □

0, 1, 1 +  $\tau$ ,  $\tau$  の 4 点に囲まれた平行四辺形を「基本周期平行四辺形」という。リウヴィルの第一定理により、楕円関数は基本周期平行四辺形内に特異点を持つ必要がある。次の定理は、どのような特異点がありうるかに制限を課す。

**定理 19.3** (リウヴィルの第二定理 (Liouville's second theorem)). 基本周期平行四辺形内に 1 位の極を一つだけ持つ二重周期関数は存在しない。

**証明.** 原点を適宜動かすことにより、極は基本周期平行四辺形の边上ではなく内部だとして一般性を失わない。C を基本周期平行四辺形の边上を周る経路とすると、コーシーの積分定理により

$$\text{Res}f(z) = \oint_C dzf(z) \tag{19.96}$$

が成り立つ。ところが二重周期性より

$$\int_0^1 dzf(z) = \int_\tau^{1+\tau} dzf(z), \quad \int_0^\tau dzf(z) = \int_1^{1+\tau} dzf(z) \tag{19.97}$$

が成り立つので、式 (19.96) 右辺は

$$\oint_C dzf(z) = \int_0^1 dzf(z) + \int_1^{1+\tau} dzf(z) + \int_{1+\tau}^\tau dzf(z) + \int_\tau^0 dzf(z) = 0 \tag{19.98}$$

である。よって  $\text{Res}f(z) = 0$  であり、これは 1 位の極が一つの場合には実現しえない。 □

<sup>298</sup> 複素数平面全域で定義された正則関数 (全域で微分可能な関数) のこと。

<sup>299</sup> 複素関数論でリウヴィルの定理を習ったと思うが、念のため証明を書いておく。  $|f(z)| < M$  とすると、グルサの定理により

$$|f'(z)| = \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{|z|=r} \frac{f(z)}{z^2} dz \right| \leq \frac{1}{2\pi} \frac{M}{r^2} 2\pi r = \frac{M}{r} \tag{19.95}$$

が成り立つ。r は任意なので、 $r \rightarrow \infty$  とすることで  $|f'(z)| = 0$  を得る。

**定理 19.4** (リウヴィルの第三定理 (Liouville's third theorem)). 二重周期関数は、基本周期平行四辺形内において、等しい数の極とゼロ点を持つ。ただし  $n$  位の極及びゼロ点はそれぞれ  $n$  個と数える。

**証明.** 二重周期関数  $f(z)$  に対し、 $F(z) = f'(z)/f(z) = (\ln f(z))'$  という関数を考える。 $f(z)$  が  $z_i$  において  $p_i$  位の極を持つ場合、すなわち  $f(z) \sim (z - z_i)^{-p_i}$  が成り立つ場合、 $F(z)$  は  $z_i$  近傍で

$$F(z) = \frac{d}{dz} \ln f(z) \sim -\frac{p_i}{z - z_i} \quad (19.99)$$

となり、 $z_i$  は  $F(z)$  の 1 位の極であり、係数  $-p_i$  がかかる。これはゼロ点の位数についても同様で、 $f(z) \sim (z - z_j)^{q_j}$  が成り立つ場合、 $F(z)$  は  $z_j$  近傍で

$$F(z) = \frac{d}{dz} \ln f(z) \sim \frac{q_j}{z - z_j} \quad (19.100)$$

となり、 $z_j$  は  $F(z)$  の 1 位の極であり、係数  $q_j$  がかかる。

$F(z)$  に対し、基本周期平行四辺形の辺に沿った積分を考える。留数積分をすることにより

$$0 = \oint_C dz F(z) = \sum_i (-p_i) + \sum_j q_j \quad (19.101)$$

が得られる。よって  $f(z)$  の極とゼロ点の数は等しい。 □

リウヴィルの定理は第四までであるが、ここでは省略する。

リウヴィルの第一定理の強力な応用として、以下の結果がある

**定理 19.5.**  $f(z)$  と  $g(z)$  は共通の周期を持ち、極とゼロ点が位数を含めて一致しているとする。このとき、 $g(z)$  は  $f(z)$  の定数倍である。

**証明.** 関数  $F(z) = f(z)/g(z)$  を考える。 $F(z)$  の極となりうる点は、 $f(z)$  の極及び  $g(z)$  のゼロ点だが、これらは互いに分子分母キャンセルするので、実際にはどの点も極にならない<sup>300</sup>。よって  $F(z)$  は極を持たない二重周期関数であり、リウヴィルの第一定理により定数関数である。これは  $g(z) = cf(z)$  を意味する。 □

### 19.7 ワイエルシュトラスの $\wp$ 関数

リウヴィルの第二定理を踏まえると、もっとも単純な形の極を持つ楕円関数は、基本周期平行四辺形中に

- 2 位の極を一つだけ持つ
- 1 位の極を二つ持つ

のどちらかである。前者の雛型であるとともに、すべての楕円関数をそこから構成できる楕円関数が、ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数<sup>301</sup> である。(ちなみにヤコビの楕円関数  $\operatorname{sn}$  は後者の例になっている)

ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数は、基本周期平行四辺形の各頂点に 2 位の極を持つ関数である。これを記述するため、頂点集合及び原点を除く頂点の集合を

$$\Lambda := \{z = m + n\tau; m, n \in \mathbb{Z}\} \quad (19.102)$$

$$\Lambda^* := \Lambda - (0, 0) \quad (19.103)$$

<sup>300</sup> ちなみに、 $f(z)$  の極を  $g(z)$  の極がすべてキャンセルして、なお  $g(z)$  の極が余っている (極の総位数が  $g(z)$  の方が大きい) 場合には、リウヴィルの第三定理により  $g(z)$  のゼロ点の総位数もまた  $f(z)$  のそれを上回るの、必ず  $g(z)$  のゼロ点のどれかがキャンセルできず、 $F(z)$  に極が生まれる。そのため、この証明の論法は、 $f(z)$  と  $g(z)$  の極とゼロ点がきっちり一致している場合にしか成り立たない。

<sup>301</sup>  $\wp$  は「ペー」と読む。

と書くことにする。

**定義 19.2** (ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数 (Weierstrass  $\wp$  function) ). ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数は

$$\wp(z) := \frac{1}{z^2} + \sum_{w \in \Lambda^*} \left[ \frac{1}{(z-w)^2} - \frac{1}{w^2} \right] \quad (19.104)$$

で定義される。

カッコ内の第二項  $\frac{1}{w^2}$  は、全体の発散を抑えるための項である。構成から、これが各頂点に 2 位の極を持つ二重周期関数であることはほぼ明らかである<sup>302</sup>。

ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数の性質をいくつか見ておこう。関数の形より明らかに、 $\wp(z)$  は偶関数である。偶関数であることと二重周期性とを組み合わせることで

$$\wp'(1/2) = \wp'(\tau/2) = \wp'\left(\frac{1+\tau}{2}\right) = 0 \quad (19.105)$$

が得られる。一方、 $\wp(z)$  の微分は

$$\wp'(z) = -2 \sum_{w \in \Lambda} \frac{1}{(z-w)^3} \quad (19.106)$$

なので、これは各頂点に 3 位の極を持つ二重周期関数である。リウヴィルの第三定理により、 $\wp'(z)$  のゼロ点は 3 個、つまり上記の 3 つ以外にはゼロ点は存在しないことが分かる。またこれら 3 つのゼロ点は 1 位であることもわかる。

そのため、 $(\wp'(z))^2$  は、 $z = 0$  に 6 位の極を持ち、 $z = 1/2, \tau/2, (1+\tau)/2$  に 2 位のゼロ点を持つ関数である。一方、

$$\wp(1/2) = e_1, \quad \wp(\tau/2) = e_2, \quad \wp\left(\frac{1+\tau}{2}\right) = e_3 \quad (19.107)$$

と置くと、

$$g(z) := (\wp - e_1)(\wp - e_2)(\wp - e_3) \quad (19.108)$$

もまた、 $z = 0$  に 6 位の極を持ち、 $z = 1/2, \tau/2, (1+\tau)/2$  に 2 位のゼロ点を持つ関数である<sup>303</sup>。よって定理 19.5 により、

$$(\wp')^2 = c(\wp - e_1)(\wp - e_2)(\wp - e_3) \quad (19.109)$$

と書けることが分かる。 $z = 0$  で展開して係数比較することにより、係数  $c$  は 4 だと分かる<sup>304</sup>。以上より、ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数は、以下の非線形微分方程式

$$(f'(z))^2 = 4(f(z) - e_1)(f(z) - e_2)(f(z) - e_3) \quad (19.110)$$

の解であると分かる。

しかし、このままでは  $e_1, e_2, e_3$  の具体的な値が分からず、そのためこの微分方程式がどのような形かもわからない。もう少しわかりやすい表現を得るために、別の観点から考察を進めよう。 $\wp(z)$  をローラン展開すると

$$\wp(z) = \frac{1}{z^2} + 3E_4z^2 + 5E_6z^4 + 7E_8z^6 + \dots \quad (19.111)$$

が得られる。ただし  $E_k$  ( $k \geq 4$ ) はアイゼンシュタイン級数 (Eisenstein series)

$$E_k := \sum_{\omega \in \Lambda^*} \frac{1}{\omega^k} \quad (19.112)$$

<sup>302</sup> もちろん数学的には、関数の収束とともに、こうした基本性質もきちんと証明する必要がある。

<sup>303</sup> ゼロ点が 1 位ではないのは、 $\wp'$  が  $e_1, e_2, e_3$  においてゼロとなるからである。また、 $\wp - e_i$  は 2 位の極をただ一つ持つので、リウヴィルの第三定理により、これらが 4 位以上のゼロ点となることはできない。

<sup>304</sup>  $\wp(z) \sim 1/z^2 \dots$  である一方、 $\wp'(z) \sim -2/z^3 \dots$  である。

である。この級数展開より

$$(\wp(z))^2 = \frac{1}{z^4} + 6E_4 + \dots \quad (19.113)$$

$$(\wp(z))^3 = \frac{1}{z^6} + \frac{9E_4}{z^2} + 15E_6 + \dots \quad (19.114)$$

$$(\wp'(z))^2 = \frac{4}{z^6} - \frac{24E_4}{z^2} - 80E_6 + \dots \quad (19.115)$$

などが成り立つことが分かる。ただし… は  $z$  の 2 次以上の項が省略されている。

これらを組み合わせて、 $z$  の負べきの項を消すと

$$(\wp'(z))^2 - 4(\wp(z))^3 + 60E_4\wp(z) = -140E_6 + \dots \quad (19.116)$$

という関係式が得られる。ところが、右辺は整関数かつ二重周期関数なので、リウヴィルの第一定理によりこれは定数でないといけない。すなわち、… で省略された  $z$  の 2 次以上の項はゼロにならないといけない。よって、 $\wp(z)$  は以下の微分方程式を満たすことが分かる。

**定理 19.6** ( $\wp$  関数が満たす非線形微分方程式).  $\wp$  関数は、以下の非線形微分方程式の解である。

$$(f'(z))^2 = 4(f(z))^3 - 60E_4f(z) - 140E_6 = 0 \quad (19.117)$$

またこれにより、 $\wp$  関数は実軸上では以下の積分

$$v := \int_x^\infty \frac{dt}{\sqrt{4t^3 - 60E_4t - 140E_6}} = \int_x^\infty \frac{dt}{\sqrt{4(t-e_1)(t-e_2)(t-e_3)}} \quad (19.118)$$

の逆関数

$$x = \wp(v) \quad (19.119)$$

であるということも分かる。この形を見れば、 $\wp$  関数がヤコビの楕円関数と近いこともよく分かるだろう。

特にここで、

$$t := e_3 + \frac{e_1 - e_3}{s^2} \quad (19.120)$$

$$k := \sqrt{\frac{e_2 - e_3}{e_1 - e_3}} \quad (19.121)$$

と置き換えると、

$$v = \frac{1}{\sqrt{e_1 - e_3}} \int_0^y \frac{ds}{\sqrt{(1-s^2)(1-k^2s^2)}} \quad (19.122)$$

と第一種楕円積分の形で書ける。ただし  $y$  は  $x - e_3 = (e_1 - e_3)/y^2$  を満たすように定められている。ヤコビの楕円関数  $\text{sn}$  の定義より、 $y = \text{sn}((e_1 - e_3)v)$  が成り立つ。

以上をつなぎ合わせるにより、ワイエルシュトラスの  $\wp$  関数とヤコビの楕円関数  $\text{sn}$  を結びつける関係式

$$\wp(v) = e_3 + \frac{e_1 - e_3}{\text{sn}^2(\sqrt{e_1 - e_3}v)} \quad (19.123)$$

が得られる。

ここまで、 $\wp$  関数という特定の楕円関数を詳しく調べたが、我々が  $\wp$  関数に着目するには理由がある。実は、 $\wp$  関数を用いれば、同じ二重周期を持つ任意の二重周期関数を表すことが出来るのである。

我々はまず、同じ周期  $1$  と  $\tau$  を持つ偶関数  $f(z)$  が、 $\wp(z)$  の有理関数として表せることを示す。 $f(z)$  の極

を（位数込みで<sup>305</sup>） $\pm a_i$ 、ゼロ点を（位数込みで） $\pm b_j$ と書くことにする。すると

$$\frac{(\wp(z) - \wp(b_1))(\wp(z) - \wp(b_2)) \cdots}{(\wp(z) - \wp(a_1))(\wp(z) - \wp(a_2)) \cdots} \quad (19.124)$$

は  $f(z)$  と（位数込みで）同じ極とゼロ点を持つ。そのため、定理 19.5 により、これは  $f(z)$  の定数倍である。

また、任意の奇関数  $g(z)$  について、 $g(z)/\wp'(z)$  は偶関数である。上の結果により、 $g(z)/\wp'(z)$  は  $\wp(z)$  の有理関数で表せる。

さて、任意の関数は必ず偶関数と奇関数の和で表せる<sup>306</sup>。そのため、以下の定理が得られる。

**定理 19.7.** 任意の二重周期関数は、同じ二重周期を持つ  $\wp(z)$  と  $\wp'(z)$  の有理関数として表せる。

[19-4].  $\wp''(z)$  を  $\wp(z)$  の二次の多項式で表せ。

<sup>305</sup> 点  $x$  が位数  $n$  の極である場合には、 $a_i$  は  $n$  回  $x$  をとるとのこと。

<sup>306</sup>  $h(z)$  に対し、 $f(z) = (h(z) + h(-z))/2$ 、 $g(z) = (h(z) - h(-z))/2$  とすればよい。