特殊関数

はじめに

目次

第1章	ガンマ関数	1
1.1	ガンマ関数の定義	1
1.2	ベータ関数	2
1.3	無限乗積による表現	4
1.4	ディガンマ関数	8
1.5	ガウス乗法公式	10
1.6	解析接続	13
1.7	スターリングの公式	15
1.8	不完全ガンマ関数	19
	1.8.1 積分による定義と級数展開	19
	1.8.2 指数積分	21
	1.8.3 高次の指数積分	25
第2章	ゼータ関数 2	27
2.1	調和級数	27
	2.1.1 素数の逆数和	30
	2.1.2 交代調和級数	32
2.2	バーゼル問題	34
2.3	ゼータ関数の導入	36
	2.3.1 ゼータ関数の収束	36
	2.3.2 素数による表現	37

	2.3.3	偶数ゼータ関数	39
	2.3.4	奇数ゼータ関数	40
2.4	定義域	ぱの拡張	43
	2.4.1	ゼータ関数の積分表示	43
	2.4.2	部分積分による解析接続	45
	2.4.3	複素数での積分表示	51
	2.4.4	負整数のゼータ関数	55
第3章	ベッセ	マル関数	61
3.1	ベッセ	: 2ル関数の導入	61
	3.1.1	ケプラーの法則	61
	3.1.2	ベッセル関数	63
	3.1.3	負の次数のベッセル関数	67
3.2	ベッセ	アル関数の漸化式	69
	3.2.1	ベッセル関数の母関数	69
	3.2.2	ベッセル関数の漸化式	71
3.3	積分表	表現	72
	3.3.1	整数次ベッセル関数	73
	3.3.2	シュレーフリの積分表示	74
	3.3.3	ポアソンの積分表示	78
3.4	ベッセ	アル関数の応用	80
	3.4.1	円形開口による回折	80
	3.4.2	円筒内の電磁波	83
3.5	ノイマ	ン関数	85
	3.5.1	ノイマン関数の定義	85
	3.5.2	級数展開表現	86
	3.5.3	ベッセルの微分方程式の解	89

	3.5.4	ノイマン関数の漸化式	90
	3.5.5	半奇整数次のノイマン関数	92
3.6	ハンケ	ル関数	92
	3.6.1	半奇整数次のハンケル関数	93
3.7	変形べ	、ッセル関数	94
	3.7.1	変形ベッセル関数	94
	3.7.2	第1種変形ベッセル関数の母関数	97
	3.7.3	積分表示	98
	3.7.4	変形ベッセル関数の応用	03
3.8	漸近展	開	06
	3.8.1	第 2 種変形ベッセル関数	06
	3.8.2	その他のベッセル関数1	09
3.9	解の独	は立性	10
	3.9.1	一般的な2階微分方程式1	10
	3.9.2	スツルムの比較定理1	11
	3.9.3	ベッセル関数のロンスキー行列式	13
3.10	球ベッ	セル関数	14
	3.10.1	球面座標でのヘルムホルツ方程式	14
	3.10.2	漸化式と高次の球ベッセル関数1	16
笠 4 辛	11 222	·ンドル関数 1	19
4.1		ンドル多項式	
		ルジャンドル微分方程式の級数解	
		ルジャンドル多項式1	
4.2		(と漸化式	
		母関数	
	4.2.2	特別な関数値	25

	4.2.3 パリアイ125
	4.2.4 関数値の上限
	4.2.5 漸化式
4.3	ルジャンドル多項式の応用例129
	4.3.1 点電荷のポテンシャル
	4.3.2 電気多重極子
4.4	ルジャンドル多項式の別の定義131
	4.4.1 ロドリグの公式
	4.4.2 シュレーフリ積分
4.5	直交性
4.6	ルジャンドル陪多項式
	4.6.1 陪微分方程式の解
	4.6.2 パリティ
	4.6.3 直交性
4.7	球面調和関数
	4.7.1 ヘルムホルツ方程式の解
	4.7.2 量子力学の角運動量144
4.8	第 2 種ルジャンドル関数
	4.8.1 ルジャンドル多項式の構成
	4.8.2 第 2 種ルジャンドル多項式の導入
	4.8.3 第1種ルジャンドル多項式との関係
第5章	エルミート関数 155
5.1	エルミート多項式
	5.1.1 エルミート微分方程式の級数解
5.2	母関数と漸化式
	5.2.1 指数型母関数

	5.2.2	漸化式と多項式の特定160
	5.2.3	ロドリグ表示
5.3	直交性	Ē
5.4	量子力	学における調和振動子164
	5.4.1	シュレーディンガーの方程式164
	5.4.2	調和振動子の波動関数165
第6章	ラゲー	-ル関数 169
6.1	ラゲー	·ル微分方程式169
	6.1.1	ラゲール多項式
	6.1.2	母関数と漸化式
	6.1.3	多項式の特定
	6.1.4	ロドリグの公式
6.2	ラゲー	・ル陪多項式
	6.2.1	ラゲール陪多項式
	6.2.2	母関数
	6.2.3	漸化式
	6.2.4	ロドリグ表示
	6.2.5	直交性
6.3	水素原	『子のシュレーディンガー方程式181
	6.3.1	エネルギー固有値
	6.3.2	古典的解釈
	6.3.3	波動関数の規格化185
第7章	チェヒ	ジシェフ多項式 189 - 189
7.1	ゲーゲ	。 シバウアー多項式
	7.1.1	第 2 種チェビシェフ多項式

	7.1.2	第1種チェビシェフ多項式	191
7.2	チェビ	ぎシェフの微分方程式	194
	7.2.1	ゲーゲンバウアー多項式の導関数	195
	7.2.2	三角関数による表現	196
7.3	直交性	Eと級数展開	198
	7.3.1	直交性	199
	7.3.2	チェビシェフ級数展開	199
	7.3.3	正弦関数のチェビシェフ級数展開	201
第8章	 積分∓	ジ式で定義される関数 	203
8.1	誤差関]数	203
	8.1.1	マクローリン級数と漸近展開	204
	8.1.2	不完全ガンマ関数との関係	205
	8.1.3	逆誤差関数	206
8.2	マーカ	1ムのQ関数	209
	8.2.1	Q 関数の計算	209
	8.2.2	数値計算	212
	8.2.3	雑音に重畳する信号の検出確率	213
8.3	フレネ	ベル積分	215
	8.3.1	球ベッセル関数との関係	215
	8.3.2	フレネル積分の数値計算	217
	8.3.3	スリットを通過する光の回折	219
	8.3.4	アンテナの放射パターン	220
	8.3.5	線形周波数変調信号のスペクトル	224

第1章 ガンマ関数

本章で取り扱うガンマ関数は階乗n! を拡張した関数である。階乗は本来, n! = $1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots n$ のように、自然数n に対して定義された演算である。階乗の定義域を実数全体、さらに、複素数全体に拡張するとどうなるか。まさに、好奇心のなせる業であるが、定義域を拡張するとガンマ関数という連続関数になることがわかる。本章では、ガンマ関数とそれに関連する諸関数について説明する。

1.1 ガンマ関数の定義

階乗n! は $n! \equiv 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots n$ という定義のように、もともと、自然数n に対して定義される演算である。階乗に対して、18 世紀の数学者オイラーは定義域を実数全体、または、複素数に拡張することに興味をもっていたようである。階乗の拡張としてオイラーが考案した関数は、

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt, \qquad (1.1)$$

なる積分によって定義される。この関数は**ガンマ関数**と呼ばれる。この積分を部分積分によって計算すると、

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt = \left[\frac{1}{x} t^x e^{-t} \right]_0^\infty + \frac{1}{x} \int_0^\infty t^x e^{-t} dt = \frac{\Gamma(x+1)}{x},$$

となるので, $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ なる関係が導かれる。一方, x=1 の場合においてガンマ 関数を計算すると,

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-t} dt = 1,$$

である。したがって、ガンマ関数の変数が自然数の場合、

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) = n(n-1)\Gamma(n-1) = \cdots = n!\Gamma(1) = n!$$

となり、ガンマ関数が階乗と結び付けられることがわかった。しかも、この積分表現はx>0 について有限の値に収束するため、ガンマ関数を階乗と同一視すれば、階乗の定義域は正の実数全体に拡張されたことになる。

ガンマ関数が正の整数変数について階乗と一致することは上に示したとおりであるが, 任意の正の実数変数について収束することを示しておく必要がある。任意の正の実数について積分の収束を示すには,

$$\Gamma(x) = \int_0^1 t^{x-1} e^{-t} dt + \int_1^\infty t^{x-1} e^{-t} dt,$$

と書いて, 右辺の各項を評価すればよい。右辺の第2項は,

$$\int_{1}^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt \le \int_{1}^{\infty} t^{\lceil x \rceil - 1} e^{-t} dt < \int_{0}^{\infty} t^{\lceil x \rceil - 1} e^{-t} dt = (\lceil x \rceil - 1)!,$$

であることから収束することがわかる。ただし、[x] は x より大きいか等しい整数のうちの最小値を与えるものとする。右辺の第 1 項に関して、

$$\frac{1}{e} \int_0^1 t^{x-1} dt < \int_0^1 t^{x-1} e^{-t} dt < \int_0^1 t^{x-1} dt,$$

なる不等式が成立する。この不等式の左辺と右辺を計算すると、

$$\frac{1}{ex} < \int_0^1 t^{x-1} e^{-t} dt < \frac{1}{x},$$

となるため, x>0 の条件で収束する。したがって, ガンマ関数を定義する積分は x が正の実数であれば収束することになる。つまり, ガンマ関数 $\Gamma(x)$ は, 自然数でしか定義できなかった階乗 n! を正の実数すべてに拡張した関数である。特に, $\Gamma(n+1)=n!$ の関係が成立する。

1.2 ベータ関数

ガンマ関数の議論において、補助関数となる**ベータ関数**を定義しておくと便利なことが多い。ベータ関数は2つの変数をもつ関数であり、

$$B(x,y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt,$$

によって定義される。ベータ関数がガンマ関数の議論においてしばしば使用されるのは、 ガンマ関数と密接な関係があるからである。その例として、 $\Gamma(x)$ $\Gamma(y)$ を計算してみると、

$$\Gamma(x) \Gamma(y) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \cdot \int_0^\infty u^{y-1} e^{-u} du$$

$$= \int_0^\infty \int_0^t (t-u)^{x-1} u^{y-1} e^{-t} du dt$$

$$= \int_0^\infty \int_0^t \left(1 - \frac{u}{t}\right)^{x-1} \left(\frac{u}{t}\right)^{y-1} t^{x+y-2} e^{-t} du dt$$

$$= \int_0^\infty \int_0^1 (1-s)^{x-1} s^{y-1} t^{x+y-1} e^{-t} ds dt$$

$$= B(x,y) \int_0^\infty t^{x+y-1} e^{-t} dt = B(x,y) \Gamma(x+y),$$

1.2. ベータ関数 3

が得られる。まず、第 2 行目への変形は、 $t+u\mapsto t$ の変数変換によって積分の走査方向を 図 1.1 のように変換することによる。第 4 行目への変形は、s=u/t なる変数変換による。 この結果より、ベータ関数は

$$B(x,y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)},$$
(1.2)

によってガンマ関数と結び付けられている。

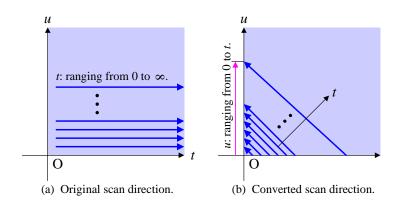


図 1.1: 積分変数の走査方向の変換

ベータ関数の定義式に対して、変数変換 $t = \sin^2 \theta$ を適用すると、その定義式は、

$$B(x,y) = 2 \int_0^{\pi/2} \sin^{2x-1}\theta \cos^{2y-1}\theta \,d\theta, \qquad (1.3)$$

のような面白い形で表現できる。特に, x = y = 1/2 とすると, この積分は,

$$B(1/2, 1/2) = 2 \int_0^{\pi/2} d\theta = \pi,$$

となる。ここで, $\Gamma(1)=1$ に注意して (1.2) を用いると, ただちに $\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi}$ が得られる。さらに, $\Gamma(x+1)=x$ $\Gamma(x)$ に注意すると,

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{15\sqrt{\pi}}{8}, \quad \dots$$

が得られる。これを一般化すれば、半奇整数の変数に対して、ガンマ関数が、

$$\Gamma(n+1/2) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2^n} \sqrt{\pi}$$

となることが導かれる。これが、自然数以外のガンマ関数の例である。変数を半奇整数に しただけで円周率の平方根が登場するのは予想外かもしれない。

1.3 無限乗積による表現

ガンマ関数の積分表示に関して, e^{-t} を $(1-t/n)^n$ で置き換えて 1 みよう。ここで, n は自然数とする。また, 積分表示の積分範囲 $[0,\infty)$ を [0,n) で置き換えよう。そのような置き換えで定義した関数を $\Gamma_n(x)$ と書くことにすると, その関数は,

$$\Gamma_n(x) = \int_0^n t^{x-1} \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n dt,$$

のように書くことができる。上に説明した置き換えゆえに, $\Gamma_n(x)$ は $n\to\infty$ の極限でガンマ関数 $\Gamma(x)$ に収束するはずである。ここで, 変数変換 s=t/n を適用し, $\Gamma_n(x)$ を計算すると.

$$\Gamma_n(x) = \int_0^1 n^x t^{x-1} (1-s)^n ds = n^x B(x, n+1)$$

$$= n^x \frac{\Gamma(x) \cdot n!}{\Gamma(x+n+1)} = n^x \frac{\Gamma(x) \cdot n!}{\Gamma(x) \cdot x (x+1)(x+2) \cdots (x+n)}$$

$$= \frac{n^x n!}{x (x+1)(x+2) \cdots (x+n)},$$

が得られる。この数式変形の第 1 行目でベータ関数の定義式が登場しているため、いったんベータ関数で数式を記述する。ベータ関数がガンマ関数を用いて記述できることを利用し、第 2 行目以降の数式変形を実行している。上で述べたように、 $\Gamma_n(x)$ は $n \to \infty$ の極限で $\Gamma(x)$ に収束するので、

$$\Gamma(x) = \lim_{n \to \infty} \frac{n^x \, n!}{x \, (x+1)(x+2) \cdots (x+n)},$$

なる関係が成立するはずである。この関係式はオイラーの無限乗積の公式と呼ばれる。

オイラーの無限乗積の公式をもう少し、変形して見通しをよくしてみよう。上に記述した数式は不定値であるnが書かれているが、そのnが現れないような数式への変形に試みる。そのような形になるように数式変形すると、

$$\Gamma(x) = \lim_{n \to \infty} \frac{n^x n!}{x(x+1)(x+2)\cdots(x+n)}$$

$$= \frac{1}{x} \lim_{n \to \infty} n^x \left(1 + \frac{x}{1}\right)^{-1} \left(1 + \frac{x}{2}\right)^{-1} \cdots \left(1 + \frac{x}{n}\right)^{-1}$$

$$= \frac{1}{x} \lim_{n \to \infty} \left(\frac{2}{1} \frac{3}{2} \cdots \frac{n}{n-1}\right)^x \left(1 + \frac{x}{1}\right)^{-1} \left(1 + \frac{x}{2}\right)^{-1} \cdots \left(1 + \frac{x}{n}\right)^{-1}$$

$$= \frac{1}{x} \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{1}{k}\right)^x \left(1 + \frac{x}{k}\right)^{-1},$$

 $^{^{-1}}$ この置き換えは, $n o \infty$ の極限で $(1-t/n)^n o e^{-t}$ となる事実に基づいている。

が得られる。上の式と同じ式なので、この数式もオイラーの無限乗積の公式である。再び不定値nを用いるが、この数式を、

$$\Gamma(x) = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{x} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x} \frac{k}{k+x},$$

のように書き換えてガンマ関数の性質を調べてみよう。まず、この数式を用いて $\Gamma(x+1)$ を計算すると、

$$\Gamma(x+1) = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{x+1} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x+1} \frac{k}{k+x+1}$$

$$= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{x+1} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x+1} \frac{k}{k+1} \frac{k+1}{k+x+1}$$

$$= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{x+1} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x} \cdot \prod_{p=2}^{n+1} \frac{p}{p+x}$$

$$= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{x+1} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x} \cdot \prod_{p=1}^{n} \frac{p}{p+x} \cdot (x+1) \frac{n+1}{n+x+1}$$

$$= \lim_{n \to \infty} \frac{1}{x+1} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x} \frac{k}{k+x} = x \Gamma(x),$$

のように、ガンマ関数としての性質をもつことがわかる。この無限乗積の表示によると、変数 x がゼロ、または、負の整数のとき分母がゼロとなる。しかし、x がそれ以外の実数のとき無限乗積が収束するので、この公式によってガンマ関数の定義域は実数全体に拡張されたことになる。例えば、既に示した $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ を基点として、 $\Gamma(-1/2) = -2\sqrt{\pi}$ 、 $\Gamma(-3/2) = 4\sqrt{\pi}/3$ のように、負のガンマ関数を特定できる。変数が負である場合を含め、ガンマ関数をグラフに描くと図 1.2 のようになる。なお、このグラフを描くには、後の節で説明するスターリングの公式を利用した。

分母がゼロとなる負の整数ガンマ関数について考察しよう。負の整数はガンマ関数の1位の極である。その極の位数が1であることは無限乗積の公式から明らかである。それでは、1位の極x=-sにおける留数を計算してみよう。ガンマ関数の極が1位であることから、

$$\operatorname{Res}_{x=-s} \Gamma(x) = \lim_{x \to s} (x+s) \Gamma(x)
= \lim_{x \to -s} \lim_{n \to \infty} \frac{x+s}{x} \prod_{k=1}^{n} \left(\frac{k+1}{k}\right)^{x} \cdot \prod_{p=1}^{s-1} \frac{k}{k+x} \cdot \frac{s}{s+x} \cdot \prod_{p=s+1}^{n} \frac{k}{k+x}
= \lim_{n \to \infty} \frac{(-1)^{s}}{(n+1)^{s}} \frac{(s+1)(s+2) \cdots (n-1) n}{1 \cdot 2 \cdots (n-s-1)(n-s)}$$

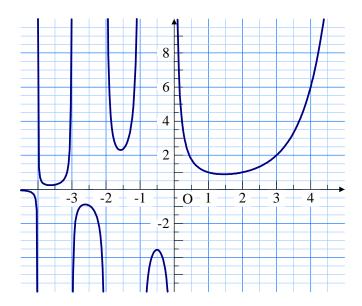


図 1.2: ガンマ関数

$$= \lim_{n \to \infty} \frac{(-1)^s}{(n+1)^s} \frac{(n-s+1)(n-s+2)\cdots(n-1)n}{s!}$$

$$= \frac{(-1)^s}{s!} \lim_{n \to \infty} \frac{n-s+1}{n} \frac{n-s+2}{n} \cdots \frac{n-1}{n} \frac{n}{n} = \frac{(-1)^s}{s!},$$

のように留数が計算できる。この導出はx=0を含んでいない。しかし、無限乗積の公式からx=0における留数が1だとわかる。この事実は、x=-sにおける留数 $(-1)^s/s!$ について、s=0としても矛盾しない。よって、ガンマ関数の極における留数は、

$$\operatorname{Res}_{z=-s} \Gamma(z) = \frac{(-1)^s}{s!}, \qquad (s = 0, 1, 2, \ldots)$$

と書くことができる。

ここまでの考察結果をまとめると, 無限乗積の公式:

$$\Gamma(x) = \frac{1}{x} \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{1}{k} \right)^x \left(1 + \frac{x}{k} \right)^{-1}, \tag{1.4}$$

によってガンマ関数の定義域は実数全体に拡張できた。ただし、ガンマ関数はゼロ、または、負の整数を 1 位の極とする。例えば、x=-s における留数は $(-1)^s/s!$ で与えられる。

極をもつ表現を避けるため、ワイエルシュトラス (Weierstrass) はガンマ関数の逆数に対して無限乗積の公式を提案した。その公式は、オイラーの無限乗積の逆数を計算すれば得られるので、

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = x \lim_{n \to \infty} n^{-x} \prod_{k=1}^{n} \left(1 + \frac{x}{k} \right) = x \lim_{n \to \infty} \prod_{k=1}^{n} \left(1 + \frac{x}{k} \right) e^{-x \log n}$$

$$= x \lim_{n \to \infty} \prod_{k=1}^{n} \left(1 + \frac{x}{k} \right) e^{-x/k} \cdot e^{x(1+1/2+1/3+\dots+1/n - \log n)}$$
$$= x e^{\gamma x} \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x}{k} \right) e^{-x/k},$$

となる。ここで、 γ はオイラー定数と呼ばれる数値であり、

$$\gamma \equiv \lim_{n \to \infty} 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n} - \log n = 0.577215665\dots$$

である。ガンマ関数の逆数であるので、当然、 $1/\Gamma(x)$ は $x=0,-1,-2,\ldots$ を 1 位の零点としている。これはワイエルストラスの無限乗積を見ても確認できる。

ワイエルシュトラスの無限乗積より興味深い性質が導かれる。

$$\frac{1}{\Gamma(x)\Gamma(-x)} = -x^2 \sum_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{k^2}\right) = -\frac{x \sin \pi x}{\pi}.$$

この式の右辺を得るには、正弦関数のオイラーの無限乗積:

$$\sin \pi x = \pi x \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{k^2} \right),$$

を用いた。 さらに, $\Gamma(1-x) = -x\Gamma(-x)$ であるので,

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin \pi x},\tag{1.5}$$

なる関係式が得られる。この公式はオイラーの反射公式と呼ばれる。得られた関係式に x=1/2 を代入すると, $\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi}$ が得られる。この結果は, ベータ関数を用いて導いた結果と一致する。

二項定理への応用 ガンマ関数の定義域を実数全体に広げたことの応用として、二項定理 における多項式の展開係数にガンマ関数を応用しよう。二項定理は、整数nが与えられた とき、

$$(1+x)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! (n-k)!} x^k,$$

が成立するという記述である。ここで、指数を整数nの代わりに実数 ν とした場合、階乗の代わりにガンマ関数を用いて、

$$(1+x)^{\nu} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\nu+1)}{k! \Gamma(\nu-k+1)} x^{k}, \tag{1.6}$$

と書けることを示そう。まず、 $(1+x)^{\nu}$ はマクローリン級数展開すると、

$$(1+x)^{\nu} = 1 + \nu x + \frac{\nu(\nu-1)}{2!} x^2 + \frac{\nu(\nu-1)(\nu-2)}{3!} x^3 \cdots$$
$$= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\nu(nu-1)(\nu-2)\dots(\nu-k+1)}{k!} x^k,$$

のように表される。この数式の分子と分母に $\Gamma(\nu-k+1)$ を乗じると,

$$(1+x)^{\nu} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\nu(\nu-1)(\nu-2)\cdots(\nu-k+1)\cdot\Gamma(\nu-k+1)}{k!\,\Gamma(\nu-k+1)} x^k,$$

= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(\nu+1)}{k!\,\Gamma(\nu-k+1)} x^k,

のように数式変形されるので、非整数 ν を与えた場合の二項定理 (1.6) が得られる。さらに、(1.6) は整数次の場合も包含した公式になっている。それを示すには、次数を ν の代わりにnとして、(1.6) を、

$$(1+x)^n = \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(n+1)}{k! \, \Gamma(n-k+1)} x^k + \sum_{k=n+1}^\infty \frac{\Gamma(n+1)}{k! \, \Gamma(n-k+1)} x^k$$
$$= \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(n+1)}{k! \, \Gamma(n-k+1)} x^k + \sum_{k=0}^\infty \frac{\Gamma(n+1)}{(n+k+1)! \, \Gamma(-k)} x^{n+k+1},$$

のように変形すればよい。右辺の第 2 項は負の整数変数によるガンマ関数が含まれている。ワイエルシュトラスの無限乗積によると、負の整数変数によるガンマ関数の逆数はゼロであるので、この数式の右辺の第 2 項はゼロとなる。したがって、(1.6) は整数次の場合でも正しい関係式を表現している。さらに、数値計算の目的では役に立たないが、(1.6) は負の整数次についても関係式が成立する。実際に、 $\nu = -n$ として (1.6) を計算すると、

$$(1+x)^{-n} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(-n+1)}{k! \Gamma(-n-k+1)} x^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Gamma(n+k)}{k! \Gamma(n)} x^k$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (n+k-1)!}{k! (n-1)!} = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-n)(-n-1)(-n-2)\cdots(-n-k+1)}{k!} x^k,$$

が成立することからその正当性が示せる。ただし、第 1 行目での数式変形には、ガンマ関数の反射公式 $\Gamma(x)$ $\Gamma(1-x)=\pi/\sin\pi x$ を用いた。

1.4 ディガンマ関数

本節では、ディガンマ関数と呼ばれる関数を紹介しよう。ディガンマ関数は、ガンマ関数の対数微分であり、第3章で紹介するベッセル関数にも現れる。

ガンマ関数の対数を得るには、ワイエルシュトラスの無限乗積を利用するのが便利である。ワイエルシュトラスの無限乗積の対数をとると、

$$\log \Gamma(x) = -\log x - \gamma x - \sum_{k=1}^{\infty} \left[\log \left(1 + \frac{x}{k} \right) - \frac{x}{k} \right],$$

1.4. ディガンマ関数

となる。この式の両辺を微分すると、

$$\frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)} = -\frac{1}{x} - \gamma + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+x}\right),\,$$

となる。この数式は, $\log \Gamma(x)$ の導関数であり, ディガンマ関数と呼ばれる。つまり, ディガンマ関数は.

$$\psi(x) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \log \Gamma(x) = -\frac{1}{x} - \gamma + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+x}\right),\tag{1.7}$$

9

のように定義される。特に、変数が整数であればディガンマ関数は、,

$$\psi(n) = -\gamma + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k},$$

のように書くことができる。この式に対して x=1 を代入すると $\psi(1)=-\gamma$ であるので, $\Gamma(1)=1$ であることに注意すると,

$$\Gamma'(1) = -\gamma,$$

が導かれる。つまり、ガンマ関数 $\Gamma(x)$ の傾きは、x=1でオイラー数に等しい。

ディガンマ関数の級数表現 (1.7) は, 簡単な関数形であるので微分を繰り返すことは容易である。微分を繰り返し, 高次導関数を得ることができれば, ディガンマ関数を級数展開することが可能である。そこで, ディガンマ関数の微分を繰り返すと,

$$\psi'(x) = \frac{1}{x^2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(k+x)^2},$$

$$\psi''(x) = -\frac{2}{x^3} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{(k+x)^2},$$

$$\psi'''(x) = \frac{6}{x^4} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{6}{(k+x)^2},$$

となる。これを一般化すると,

$$\psi^{(n)}(x) = (-1)^{n+1} n! \left(\frac{1}{x^{n+1}} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(k+x)^{n+1}} \right),$$

のように高次導関数を記述できる。ディガンマ関数 $\psi(x)$ と, 得られた導関数に x=1 を代入すると,

$$\psi(1) = -\gamma,$$

$$\psi^{(n)}(1) = (-1)^{n-1} n! \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^{n+1}} = (-1)^{n+1} n! \, \zeta(n+1),$$

が得られる。なお、第2行目の数式の右辺で用いた $\zeta(n+1)$ は、第2章で取り扱うゼータ 関数である。したがって、ディガンマ関数はマクローリン級数:

$$\psi(1+x) = -\gamma + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \zeta(n+1) x^n, \tag{1.8}$$

で表現することができる。第2章で示すが、ゼータ関数は変数が大きな場合、関数値が1に近い値となる。そのため、このマクローリン級数の収束半径は|x|<1である。さらに、このマクローリン級数を積分すると、

$$\log \Gamma(1+x) = -\gamma x + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \zeta(n) x^n,$$
 (1.9)

が得られる。つまり、-1 < x < 1 の範囲でガンマ関数の対数がマクローリン級数で表現できたことを意味している。この級数は収束半径が小さいので、実際の計算に用いる場合は次のような手順を踏む。まず、級数に代入する変数を $-1/2 \le x < 1/2$ に制限し、マクローリン級数で $\log \Gamma(1+x)$ を計算する。その場合、10 項まで計算すれば 10 進 4 桁以上の有効数字が得られる。続いて、 $\Gamma(x+1) = x \Gamma(x)$ を利用して、変数を必要な値まで持ち上げる。それによって、任意の変数についてガンマ関数を計算することが可能である。一方、x > 30 のような大きな変数については、この方法よりも、第 1.7 節で説明するスターリングの公式を用いたほうがよい。

1.5 ガウス乗法公式

次にガウスの乗法公式を紹介しよう。ガウスの乗法公式は、

$$\Gamma(z)\Gamma\left(z+\frac{1}{n}\right)\Gamma\left(z+\frac{2}{n}\right)\cdots\Gamma\left(z+\frac{n-1}{n}\right) = (2\pi)^{(n-1)/2}n^{1/2-nz}\Gamma(nz), \qquad (1.10)$$

なる関係式である。本節ではこの公式を導出する。

正弦関数の積 乗法公式証明のための補助定理として, 正弦関数の積に関する公式を証明 しておく。その補助定理とは,

$$\prod_{k=1}^{n-1} \sin \frac{\pi k}{n} = \frac{n}{2^{n-1}} \tag{1.11}$$

である。この補助定理を証明するには、n 次方程式 $\omega^n-1=0$ を考える。この方程式は 1 の複素 n 乗根を解とする方程式である。その複素 n 乗根を ω_k $(k=0,1,\ldots,n-1)$ としよう。ただし、 $\omega_k=e^{2\pi i k/n}$ である。剰余定理を利用すると、その n 次方程式は、

$$\omega^n - 1 = (\omega - \omega_0)(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2) \cdots (\omega - \omega_{n-1}),$$

1.5. ガウス乗法公式

のように書き換えられる。また, $\omega_0 = 1$ であるので,

$$\frac{\omega^n - 1}{\omega - 1} = (\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2) \cdots (\omega - \omega_{n-1})$$
$$= 1 + \omega + \omega^2 + \cdots + \omega^{n-1},$$

11

のように書き換えることもできる。この関係式に $\omega = 1$ を代入すると、

$$(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2) \cdots (\omega - \omega_{n-1}) = n,$$

なる式が得られる。この式c, $\omega_k = e^{2\pi i k/n}$ を代入すると、

$$\prod_{k=1}^{n-1} e^{\pi i k/n} \left(-2i \sin \frac{\pi k}{n} \right) = n,$$

のように変形できる。この式の左辺を計算すると,

LHS =
$$2^{n-1}(-i)^{n-1}e^{\pi i(n-1)/2}\prod_{k=1}^{n-1}\sin\frac{\pi k}{n} = 2^{n-1}\prod_{k=1}^{n-1}\sin\frac{\pi k}{n}$$
,

となる。この数式はn に等しいはずであるので,n と等号で結べば補助定理の数式が得られる。

乗法公式の証明 ガウスの乗法定理の証明には、

$$\Phi(z) = \frac{1}{n\Gamma(nz)} n^{nz} \Gamma(z) \Gamma\left(z + \frac{1}{n}\right) \Gamma\left(z + \frac{2}{n}\right) \cdots \Gamma\left(z + \frac{n-1}{n}\right),$$

なる関数 $\Phi(z)$ を定義し、その値を評価する。ここで、分母と分子を個別に評価しよう。また、双方に現れるガンマ関数にはオイラーの無限乗積を用いることにする。分母は、

Denom =
$$\lim_{m \to \infty} \frac{n \cdot m^{nz} m!}{nz (nz+1)(nz+2) \cdots (nz+m)}$$
,

と書ける。無限大の極限をとる変数mはnmと置き換えることができるので、

Denom =
$$\lim_{m \to \infty} \frac{n \cdot (nm)^{nz} (nm)!}{nz (nz+1)(nz+2) \cdots (nz+nm)},$$

のように書いてもよい。一方, 分子は,

Numer =
$$n^{nz} \prod_{k=0}^{n-1} \lim_{m \to \infty} \frac{m^{z+k/n} m!}{(z+k/n)(z+k/n+1)\cdots(z+k/n+m)}$$

= $n^{nz} \prod_{k=0}^{n-1} \lim_{m \to \infty} \frac{m^{z+k/n} n^{m+1} m!}{(nz+k)(nz+k+n)(nz+k+2n)\cdots(nz+k+nm)}$
= $n^{nz}(m!)^n \lim_{m \to \infty} m^{nz+(n-1)/2} n^{(m+1)n}$
 $\times \prod_{k=0}^{n-1} \frac{1}{(nz+k)(nz+k+n)(nz+k+2n)\cdots(nz+k+nm)}$,

のように計算できる。計算した分母と分子を組み合わせると,

$$\Phi(z) = \frac{\text{Numer}}{\text{Denom}} = \lim_{m \to \infty} \frac{(m!)^n \, n^{(m+1)n} \, m^{(n-1)/2}}{(nm)!},$$

となり, $\Phi(z)$ が z に依存しないことがわかる。言い換えると, $\Phi(z)$ は定数である。この定数を確定するため, z=1/n を代入すると,

$$\Phi(z) = \Gamma\left(\frac{1}{n}\right) \Gamma\left(\frac{2}{n}\right) \cdots \Gamma\left(\frac{n-1}{n}\right) \Gamma(1),$$

となる。続いて、この値を自乗すると、

$$\Phi(1/n)^2 = \Gamma\left(\frac{1}{n}\right) \Gamma\left(\frac{n-1}{n}\right) \cdot \Gamma\left(\frac{2}{n}\right) \Gamma\left(\frac{n-2}{n}\right) \cdots \Gamma\left(\frac{n-1}{n}\right) \Gamma\left(\frac{1}{n}\right)
= \prod_{k=1}^{n-1} \Gamma\left(\frac{k}{n}\right) \Gamma\left(1 - \frac{k}{n}\right) = \pi^{n-1} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{1}{\sin(\pi k/n)}
= \frac{(2\pi)^{n-1}}{n},$$

のように計算できる。この計算では、オイラーの反射公式と、先ほど証明した補助定理を利用した。したがって、定数 $\Phi(z)$ は、

$$\Phi(z) = (2\pi)^{(n-1)/2} n^{-1/2},$$

であることが特定できた。この式の左辺に $\Phi(z)$ の定義式を代入すると, ガウスの乗法定理が証明できる。 \P

ガウスの乗法公式の応用例として、n=2を代入すると、

$$\Gamma(z) \Gamma\left(z + \frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} 2^{1-2z} \Gamma(2z),$$

が得られる。この結果はルジャンドル (Legendre) の 2 倍角公式と呼ばれる公式である。この公式の例として半整数のガンマ関数 $\Gamma(m+1/2)$ 計算してみよう。整数変数 z=m をルジャンドルの 2 倍角公式に代入すると、

$$\Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi} \, 2^{-(2z-1)} \, (2m-1)!}{(m-1)!}$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots (m-1)} \cdot \frac{1}{2} \frac{2}{2} \frac{3}{2} \frac{4}{2} \frac{5}{2} \cdots \frac{2m-1}{2}$$

$$= \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)}{2^m} \sqrt{\pi},$$

が得られる。これはベータ関数を導入して計算した半奇整数のガンマ関数と一致する。

1.6. 解析接続 13

1.6 解析接続

オイラーやワイエルシュトラスの無限乗積の公式から $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ なる関係が検証できた。この関係を逆に使い、ガンマ関数の定義域を正の実数だけでなく 実数全体に拡張することができた。基準値 $\Gamma(x)$ から定義域を逐次、低下させていくと、

$$\Gamma(x-1) = \frac{\Gamma(x)}{x-1}, \quad \Gamma(x-2) = \frac{\Gamma(x)}{(x-1)(x-2)},$$

$$\Gamma(x-3) = \frac{\Gamma(x)}{(x-1)(x-2)(x-3)}, \quad \dots$$

となり、これを一般化すると、

$$\Gamma(x-n) = \Gamma(x) \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{x-k},$$

と書くことができる。この性質を利用するとxを負の実数にも拡張することができたのだ。

それでは、ガンマ関数の定義域を複素数全体に拡張しよう。そのためにはガンマ関数の積分表現を変形する。まず、積分 $I_0(s)$ を

$$I_0(s) = \int_0^\infty z^{s-1} e^{-z} dz,$$

のように定義する。この $I_0(s)$ は言うまでもなくガンマ関数 $\Gamma(s)$ に等しい。ここで、z が正の実数であれば $z^s=z^{\mathrm{Re}\,s}e^{i\,\mathrm{Im}\,s\,\mathrm{log}\,z}$ であるので、たとえ変数 s が複素数だとしても、 $\mathrm{Re}\,s>0$ であれば積分 $I_0(s)$ は有限の値に収束する。

引き続き, $z\mapsto ze^{2\pi i}$ のように変換して積分 I_0 を書き直した結果を $I_{2\pi}$ と定義する。そのとき,

$$I_{2\pi}(s) = \int_0^\infty e^{2\pi i(s-1)} z^{s-1} e^{-z} dz = e^{2\pi i s} \int_0^\infty z^{s-1} e^{-z} dz,$$

となる。ここで積分路を図 1.3 に示す経路 $C~(=C_++C_r+C_-)$ であるとする。原点周りの積分路について、半径 $r\to 0$ とすると、 $z=re^{i\theta}$ より、

$$\int_{C_r} z^{s-1} e^{-z} dz = i e^{2\pi i s} r^s \int_0^{2\pi} e^{is\theta} e^{-re^{i\theta}} d\theta,$$

となる。つまり, $\mathrm{Re}\,s>0$ であれば $r\to 0$ の極限における経路 C_r の積分はゼロとなる。よって, 経路 C に沿った積分は

$$\int_C z^{s-1} e^{-z} dz = I_{2\pi}(s) - I_0(s) = (e^{2\pi i s} - 1)\Gamma(s),$$

となる。よって、ガンマ関数は、

$$\Gamma(s) = \frac{1}{e^{2\pi i s} - 1} \int_C z^{s-1} e^{-z} dz = \frac{1}{2i \sin \pi s} \int_C e^{\pi i s} z^{s-1} e^{-z} dz$$
$$= -\frac{1}{2i \sin \pi s} \int_C (-z)^{s-1} e^{-z} dz,$$

となる。この積分表示はハンケル (Hankel) の積分表示と呼ばれ、この表示よってガンマ関数の定義域が複素数全体に拡張される。とはいえ、 $\operatorname{Re} s \leq 0$ となると、経路 C_r の積分が無視できない (場合によっては発散する) ので、定義域が複素数全体に拡張されたことは客観的に説明しておく必要があるだろう。

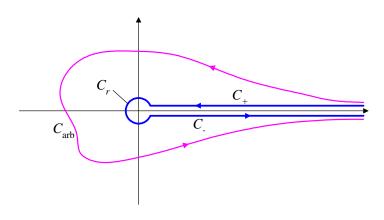


図 1.3: ハンケルの積分表示の積分路

ハンケルの積分表示によってガンマ関数の定義域が複素数全体に拡張されることを説明しよう。積分表示における被積分関数はs がゼロ以下の整数である場合,原点が極となるが,それ以外の複素平面全体は常に正則である。つまり,積分路C は図 1.3 に描かれている $C_{\rm arb}$ のように, $z=+\infty$ の実軸上から開始し,複素平面を第 I 象限,第 II 象限,第 II 象限,第 II 象限,第 IV 象限の順に通り, $z=+\infty$ の実軸上まで続く任意の単純曲線(自分自身で交わらない曲線)としても積分値は不変である。甚だしい例として,原点を中心とする半径無限大の円周 C_R を積分路としても値は不変である。この記述が疑わしい場合には次のように考えればよい。積分路を $C+\bar{C}_R$ としよう。ただし, \bar{C}_R は C_R を逆向きにたどることを意味する。その積分路は,極を 1 つも囲まない閉曲線であるので,留数の定理により,

$$\int_{C+\bar{C}_R} (-z)^{s-1} e^{-z} dz = 0,$$

である。この式は、

$$\int_C (-z)^{s-1} e^{-z} dz = \int_{C_R} (-z)^{s-1} e^{-z} dz,$$

のように書くこともできる。よって、ハンケルの積分表示は積分路を円周 C_R としてもよいことが示された。

原点を中心とする半径 $R~(\to \infty)$ の円周 $z=Re^{i\theta}$ を積分路として, ハンケルの積分表示を書くと

$$\Gamma(s) = \frac{e^{\pi i z} R^s}{2 \sin \pi s} \int_0^{2\pi} e^{i s \theta} e^{-Re^{i \theta}} d\theta,$$

となる。この積分に対して部分積分を適用すると,

$$\begin{split} \Gamma(s) &= \frac{e^{\pi i s} R^s}{2 \sin \pi s} \left(\left[\frac{e^{i s \theta} e^{-Re^{i \theta}}}{i s} \right]_0^{2\pi} + \frac{R}{s} \int_0^{2\pi} e^{i (s+1) \theta} e^{-Re^{i \theta}} \mathrm{d}\theta \right) \\ &= \frac{e^{\pi i s} R^s}{2 \sin \pi s} \frac{e^{-R} (e^{2\pi i s} - 1)}{i s} + \frac{1}{s} \frac{e^{\pi i s} R^{s+1}}{2 \sin \pi s} \int_0^{2\pi} e^{i (s+1) \theta} e^{-Re^{i \theta}} \mathrm{d}\theta, \end{split}$$

となる。ここで, $R \to \infty$ であることに注意すると, s に関わらず $R^s e^{-R} \to 0$ となるため, 第 1 項がゼロとなるので, 上の積分は

$$\begin{split} & \Gamma(s) = \frac{1}{s} \frac{e^{\pi i s} R^{s+1}}{2 \sin \pi s} \int_0^{2\pi} e^{i(s+1)\theta} e^{-Re^{i\theta}} \mathrm{d}\theta \\ & = \frac{1}{s} \frac{e^{\pi i (s+1)} R^{s+1}}{2 \sin \pi (s+1)} \int_0^{2\pi} e^{i(s+1)\theta} e^{-Re^{i\theta}} \mathrm{d}\theta = \frac{\Gamma(s+1)}{s}, \end{split}$$

のように変形される。この関係式はsに対する条件を設けずに導かれた関係式でありながら、ワイエルストラスの無限乗積から導かれる法則と一致している。 前にも述べたように、積分路Cは図 1.3に示すような任意の経路を設定できる。このハンケルの積分表示によって、ガンマ関数の性質が任意の複素数sに対して成立させることができた。すなわち、ハンケルの積分表示によってガンマ関数の定義域を複素数全体に拡張することができたということである。

1.7 スターリングの公式

ガンマ関数 $\Gamma(z+1)$ を漸近展開として近似しよう。漸近展開とは, $z\to\infty$ の極限での近似である。漸近展開するにあたり、ガンマ関数 $\Gamma(z+1)$ が積分表示:

$$\Gamma(z+1) = \int_0^\infty x^z e^{-x} \mathrm{d}x,$$

によって定義されることに注意しよう。このような指数関数を含む積分は鞍点法と呼ばれる手法で評価できる。本節では鞍点法によってガンマ関数を漸近展開する。

基本形として、鞍点法は指数関数を含む関数の積分:

$$I(z) = \int_{L} g(x) e^{-z f(x)} dx,$$

の評価に用いる。複素関数における鞍点法ではこの積分経路の選び方にも特定の規則があるが、ここではガンマ関数の評価に必要な情報のみの説明にとどめよう。鞍点法では、 $z \gg 1$ の条件を前提とし、 $f'(x_0) = 0$ となる $x = x_0$ を中心に積分を評価する。この手法が

鞍点法と呼ばれるのは、 $f'(x_0) = 0$ に注目していることによる。関数 f(x) を正則な複素関数とし、変数を $x \equiv \alpha + i\beta$ とすると、コーシー・リーマンの定理により、

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\right) f(x) = 0,$$

が成立する。これは, f(x) が実軸に沿って上に凸ならば, 虚軸に沿って下に凸であることを意味する。例えば図 1.4 のような関数を想像すればよいだろう。その図は複素数 $x=\alpha+i\beta$ の関数 $f(\alpha,\beta)$ を描いている²。正則な複素関数の導関数がゼロ, すなわち, $f'(x_0)=0$ となる点 x_0 は, $f(x_0)$ が山の頂上ではなく, 鞍のような反り返った場所 (鞍点) である。 鞍点

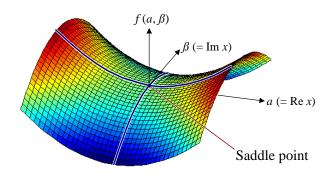


図 1.4: 複素関数の鞍点

を中心とした展開手法であることから、この手法は鞍点法と呼ばれるのだ。この条件では、 関数 f(x) と g(x) は

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \cdots$$

$$g(x) = g(x_0) + g'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}g''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}g'''(x_0)(x - x_0)^3 + \cdots$$

のようにテイラー展開できる。これを積分 I(z) に代入すると、

$$I(z) \simeq \int_{L} g(x_0) e^{-z (f(x_0) + f''(x_0) (x - x_0)^2/2)} dx$$
$$= g(x_0) e^{-z f(x_0)} \int_{L} e^{-z f''(x_0) (x - x_0)^2/2} dx,$$

のように近似できる。このような形になるので $f'(x_0) = 0$ を条件とすることが有利に働く。積分路が実軸上の区間 [a,b] $(a < x_0 < b)$ とすると、

$$I(z) \simeq g(x_0) e^{-z f(x_0)} \int_a^b e^{-z f''(x_0) (x - x_0)^2/2} dx$$

$$\simeq g(x_0) e^{-z f(x_0)} \int_{-\infty}^\infty e^{-z f''(x_0) (x - x_0)^2/2} dx$$

$$= g(x_0) e^{-z f(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{z |f''(x_0)|}},$$

のように近似できる。この数式変形において、第 1 行目から第 2 行目で積分区間が無限に拡大されているのは、 $z\gg 1$ としたとき、積分区間 [a,b] の外で指数関数が無視できる程度まで小さくなるからである。積分区間の外側の寄与が無視できることは、

$$\int_{-\infty}^{-x} e^{-\kappa \xi^2/2} d\xi \simeq \frac{1}{\kappa x} e^{-\kappa x^2/2} \left(1 - \frac{1}{\kappa x^2} + \frac{3}{\kappa^2 x^4} - \cdots \right),$$

なる漸近近似を考えれば理解できるだろう。 関数 $e^{-\kappa\xi^2/2}$ を区間 $(-\infty,\infty)$ で積分した結果は $\sqrt{2\pi/\kappa}$ であるので, $\kappa x^2=10$ とすればこの積分は無限積分の 0.08 %程度の非常に小さな寄与になる。また, $\kappa x^2=20$ であれば, 積分の寄与はさらにその 200 分の 1 程度になる。上に書いた I(z) に関して言えば, $z|(b-x_0)$ $f''(x_0)|\gg 1$ であれば無視できると考えてよい。

上の説明によってガンマ関数 $\Gamma(z+1)$ が漸近近似できたと思ってよい。ガンマ関数の近似のためには、積分表示に対して $x\equiv zu$ なる変数 u に変数置換すればよい。その変数置換によって積分表示は、

$$\Gamma(z+1) = z^{z+1} \int_0^\infty u^z e^{-zu} du = z^{z+1} \int_0^\infty e^{-z (u - \log u)} du,$$

のように書き換えられる。この場合、上の説明と対応させると、 $f(u)=u-\log u$ 、g(u)=1 とすればよい。関数 f(u) の 1 階の導関数が f'(u)=1-1/u であるので鞍点法における中心点は u=1 とすればよい。その中心点において、f(1)=1、f''(1)=1 である。これを上の式に代入すると、

$$\Gamma(z+1) \simeq \sqrt{2\pi} \, z^{z+1/2} \, e^{-z},$$

が導出される。この数式はスターリングの公式と呼ばれる近似式であり、z が大きいときの近似が良好である。この公式は、z=10 で 10 進 2 桁程度、z=100 で 3 桁程度の精度を示す。

スターリングの公式の精度を向上する方法はいくつもあるが、そのうちでも直接的な手法で精度を向上しよう。その手法として、 $f(x) = u - \log u$ の高次近似を利用する。関数 f(u) を展開すると、

$$f(u) = 1 + \frac{(u-1)^2}{2} - \frac{(u-1)^3}{3} + \frac{(u-1)^4}{4} - \frac{(u-1)^5}{5} + \cdots$$

のように書くことができる。この近似式を上の式に代入すると、

$$\Gamma(z+1) \simeq z^{z+1} e^{-z} \int_0^\infty e^{-z(u-1)^2/2} e^{z[(u-1)^3/3 - (u-1)^4/4 + (u-1)^5/5 - \cdots]} du$$

$$= z^{z+1} e^{-z} \int_{-1}^\infty e^{-z\xi^2/2} e^{z(\xi^3/3 - \xi^4/4 + \xi^5/5 - \cdots)} d\xi$$

$$= z^{z+1} e^{-z} \int_{-\infty}^\infty e^{-z\xi^2/2} e^{z(\xi^3/3 - \xi^4/4 + \xi^5/5 - \cdots)} d\xi,$$

が得られる。ここで,第2行目への変形には $\xi\equiv u-1$ の置き換えを適用し,第3行目への変形には $z\gg 1$ であることを利用した。さらに, $e^{z\,(\xi^3/3-\cdots)}$ に対して,マクローリン展開をする。その展開は面倒であるが,最終的に1/zの2次の近似までに必要とする項だけを抽出すると.

$$\begin{split} &\Gamma(z+1) \simeq z^{z+1} e^{-z} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \, e^{-\xi^2/2} \\ &\qquad \times \left(1 + \frac{z\xi^3}{3} - \frac{z\xi^4}{4} + \frac{z\xi^5}{5} - \frac{z\xi^6}{6} \right. \\ &\qquad \qquad + \frac{z^2\xi^6}{9} - \frac{z^2\xi^7}{6} + \frac{47z^2\xi^8}{240} + \frac{z^3\xi^9}{27} - \frac{z^3\xi^{10}}{12} + \frac{z^4\xi^{12}}{81} \right), \end{split}$$

のようになる。必要な精度が $1/z^2$ の次数にも関わらず, この計算過程のように, ξ^{12} の項まで抽出しなければならない。右辺の積分を実行するにあたり, 積分公式:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2m} e^{-x^2/2\sigma^2} dx = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1) \cdot \sqrt{2\pi} \sigma^{2m},$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2m+1} e^{-x^2/2\sigma^2} dx = 0,$$

を利用すればよい。ここで,mはゼロ以上の整数とする。なお,この公式の証明は省略する。この公式によると,被積分関数において括弧の中が ξ の奇数次の項の積分はゼロである。偶数次についても公式を適用すると,

$$\Gamma(z+1) \simeq \sqrt{2\pi} z^{z+1/2} e^{-z} \left(1 + \frac{1}{12z} + \frac{1}{288z^2} \right),$$

が得られる。得られた 2次の近似式は, z=10 で 10 進 5 桁, z=100 で 8 桁の精度となる。ゼロ次近似に比べ, 近似能力が格段に向上している。しかし, 上の導出過程を見ればわかるとおり, 2 次近似のために ξ の 12 次の項まで展開しなければならない。さらに, 3 次近似となると ξ の 18 次の項まで必要となり, 数式変形が非常に面倒である。ガンマ関数の近似精度を狙うなら, 鞍点法は有効でなく, オイラー・マクローリンの和公式を使った方がよい。導出は省略するが, オイラー・マクローリンの和公式によってガンマ関数を展開すると,

$$\Gamma(z+1) = \sqrt{2\pi} z^{z+1/2} e^{-z} \left(1 + \frac{1}{12z} + \frac{1}{288z^2} - \frac{139}{51840z^3} - \frac{571}{2488320z^4} + \frac{163879}{209018880z^5} + \cdots \right), \quad (1.12)$$

のようになる。オイラー・マクローリンの公式は階乗を展開するために用いているので、本来、変数が自然数であるという前提である。しかし、ガンマ関数は階乗の定義域を複素数全体になるように解析接続した関数であるので、オイラーマクローリンの公式で得られた数式の変数を単純に複素数に読み替えれば、ガンマ関数を与えるはずである。

ガンマ関数の漸近展開 (1.12) は、上に示した真数 (linear scale) よりも対数の方が近似精度がよい。導出を省略するが、対数での漸近展開は、

$$\log \Gamma(z+1) = \frac{1}{2} \log 2\pi + \left(z + \frac{1}{2}\right) \log z - z$$

$$+ \frac{1}{12z} - \frac{1}{360z^3} + \frac{1}{1260z^5} - \frac{1}{1560z^7}$$

$$+ \frac{1}{1188z^9} - \frac{691}{360360z^{11}} + \frac{1}{156z^{13}} - \cdots, \tag{1.13}$$

のように書ける。漸近展開 (1.12) と比べると, (1.13) では級数が 1/z の奇数次から構成されているので, 少ない項で高い精度が狙える。しかも, z=10 程度を対象とする場合, 13 次まで計算しても級数は収束してくれる。

1.8 不完全ガンマ関数

ガンマ関数の積分による定義 (1.1) は無限積分である。この積分の積分域を有界とした 関数は不完全ガンマ関数と呼ばれる。不完全ガンマ関数は誤差積分へ応用できるため, 本 節で紹介する。

1.8.1 積分による定義と級数展開

ガンマ関数の積分による定義式における積分域を有界として得られる関数は不完全ガンマ関数と呼ばれる。不完全ガンマ関数は.

$$\gamma(a,x) = \int_0^x e^{-t} t^{a-1} \, \mathrm{d}t, \tag{1.14a}$$

$$\Gamma(a,x) = \int_{x}^{\infty} e^{-t} t^{a-1} dt, \qquad (1.14b)$$

のように定義される。この定義式から容易にわかるように, $\gamma(a,x) + \Gamma(a,x) = \Gamma(a)$ が成立する。このような簡単な関係があるので, わざわざ 2 種類も関数を定義しなくてもよさそうだが. 慣習的にこのような記号の使い分けをするようである。

不完全ガンマ関数の第 1 変数 a が正の整数であるとき、積分を完全に実行することができ、

$$\gamma(n,x) = (n-1)! \left(1 - e^{-x} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!}\right), \tag{1.15a}$$

$$\Gamma(n,x) = (n-1)! e^{-x} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!},$$
(1.15b)

が成立する。この関係式を得るには、部分積分を繰り返せばよい。後者の関数について積分を実行すると.

$$\Gamma(n,x) = -\left[e^t t^{n-1}\right]_x^{\infty} + (n-1) \int_x^{\infty} e^{-t} t^{n-2} dt$$
$$= e^{-x} x^{n-1} + (n-1) \Gamma(n-1,x),$$

のように計算できる。右辺の第2項についても同様の操作を, さらに得られた最終項についても同様の操作を繰り返していくと,

RHS =
$$e^x \left[x^{n-1} + (n-1)x^{n-2} + (n-1)(n-2)x^{n-3} + \cdots + (n-1)(n-2) \cdots 3 \cdot 2x + (n-1)! \right]$$

= $(n-1)! e^x \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!}$,

が得られる。したがって、級数展開 (1.15b) が導出された。級数展開 (1.15b) は $\gamma(n,x)$ + $\Gamma(n,x)=(n-1)!$ から容易に得られる。

不完全ガンマ関数の第1変数が正の整数ではない場合.

$$\gamma(a,x) = x^a \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k! (a+k)},$$
(1.16)

$$\Gamma(a,x) = x^{a-1}e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(a-k) x^k}$$

$$= x^{a-1}e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Gamma(k-a+1)}{\Gamma(-a+1) x^k},$$
(1.17)

が成立する。前者は被積分関数に含まれる e^{-t} を級数展開し、

$$\gamma(a,x) = \int_0^x \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k t^{a+k-1}}{k!} dt,$$

とすれば容易に得られる。後者については, (1.15b) の導出を参考にして,

$$\Gamma(a,x) = e^{-x} \left[x^{a-1} + (a-1)x^{a-2} + (a-1)(a-2)x^{a-3} + (a-1)(a-2)(a-3)x^{a-4} + \cdots \right]$$
$$= e^{-x}x^{a-1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(a-k)x^k},$$

のように計算できるので、第1行目の等式が導かれる。第1変数が正の整数であれば、総和は有限項で収まるのであるが、そうでない場合、総和は無限級数となる。第2行目への等式を導出するには、オイラーの反射公式:

$$\Gamma(a) \Gamma(1-a) = \frac{\pi}{\sin \pi a},$$

$$\Gamma(a-k) \Gamma(k-a+1) = \frac{\pi}{\sin \pi (a-k)} = \frac{(-1)^k \pi}{\sin \pi a},$$

に注意すればよい。その結果, (1.17) が導出される。

1.8.2 指数積分

不完全ガンマ関数がそのままの形で物理学で取り扱われることは珍しい。しかし、指数 積分のように形を変えて登場することがある。指数積分とは、

$$E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} \, \mathrm{d}t,\tag{1.18}$$

によって定義される。この関数をxの級数として展開してみよう。まず、指数関数が、

$$E_1(x) = \Gamma(0, x) = \lim_{a \to 0} \left[\Gamma(a) - \gamma(a, x) \right],$$

なる関係を満たすことに注意する。残念ながら、この関係式は指数積分の計算には直接使うことができない。なぜなら、 $\Gamma(a)$ は $a\to 0$ の極限で発散するからである。不完全ガンマ関数 $\gamma(a,x)$ の級数展開 (1.16) を用いると、

$$E_1(x) = \lim_{a \to 0} \left[\Gamma(a) - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{a+k}}{k! (a+k)} \right]$$
$$= \lim_{a \to 0} \left[\frac{a\Gamma(a) - x^a}{a} \right] - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k \cdot k!},$$

のように計算できる。右辺の第1項に関して,

$$\lim_{a \to 0} a\Gamma(a) = 0! = 1, \qquad \lim_{a \to 0} x^a = 1,$$

であるので、第1項の分子はゼロである。分母もゼロであるので、第1項はロピタルの定理を用いて評価できる。ロピタルの定理を適用するため、 $a\Gamma(a)$ の導関数を計算すると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}a\Gamma(a) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\Gamma(a+1) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}e^{\log\Gamma(a+1)}$$
$$= \Gamma(a+1) \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\log\Gamma(a+1) = \Gamma(a+1) \cdot \psi(a+1),$$

となる。ここで, $\psi(a+1)$ は第 1.4 節で取り扱ったディガンマ関数である。また, x^a の a についての導関数は $x^a \log x$ である。したがって, ディガンマ関数のマクローリン展開 (1.8) に注意すると指数積分は,

$$E_1(x) = -\gamma - \log x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1} x^k}{k \cdot k!},$$
(1.19)

のように級数展開される。本書で既に取り上げているが, γ はオイラー定数である。この級数展開を利用して指数積分 $E_1(x)$ を計算すると図 1.5 のような曲線を描く。 このグラフに示すように, 指数積分 $E_1(x)$ は変数 x の増加とともに急激にゼロに近づく。それは, 被積分関数が e^{-t}/t が急激にゼロに近づくので, 積分区間の開始点を増加させると積分結果も急激に減少するからである。級数展開 (1.19) から, この関数が正の変数 x に対して常に正になることがわかりづらいのだが, 指数積分の定義から, この関数は常に正の値になる。

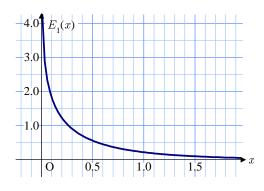


図 1.5: 指数積分

正弦積分と余弦積分 指数積分との関連として、正弦積分と余弦積分と呼ばれる積分:

$$\operatorname{si}(x) = -\int_{x}^{\infty} \frac{\sin t}{t} dt, \quad \operatorname{Ci}(x) = -\int_{x}^{\infty} \frac{\cos t}{t} dt,$$

を考えてみよう。まず, 正弦積分について考えよう。この積分は, sinc 関数と呼ばれる関数の積分である。積分を実行すると,

$$si(x) = -\frac{1}{2i} \int_{x}^{\infty} \frac{e^{it} - e^{-it}}{t} dt = -\frac{1}{2i} \left[\int_{-ix}^{-i\infty} \frac{e^{-u}}{u} du - \int_{ix}^{i\infty} \frac{e^{-u}}{u} du \right]$$
$$= -\frac{1}{2i} \left[\int_{-ix}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du - \int_{ix}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du \right] = \frac{1}{2i} \left[E_1(ix) - E_1(-ix) \right],$$

が得られる。ここで、正弦関数を指数関数に分離したうちの第 1 項には $u \equiv -it$,第 2 項には u = it なる置き換えを適用した。積分区間の終点として書かれた $\pm i\infty$ は $Re^{\pm\pi i/2}$ (ただし, $R \to \infty$) である。さらに,第 1 行目の積分区間の終点 $\pm i\infty$ が,第 2 行目では ∞ に変わっている。それは誤植ではなく, $\pm i\infty$ から ∞ への積分がゼロであるからである。つまり,

$$\int_{-i\tau}^{-i\infty} \frac{e^{-u}}{u} du = \int_{-i\tau}^{-i\infty} \frac{e^{-u}}{u} du + \int_{-i\infty}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du = \int_{-i\tau}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du$$

が成立していることを利用している。では、本当に $-i\infty$ から ∞ への積分がゼロになるのか? それは次のようにして証明することができる。

積分路 C を図 1.6 に示すように、-iR から R まで、原点を中心とした半径 R の円弧であるとする。積分路はこの曲線である必要はないのだが、任意の曲線でよいので、まず、この曲線を積分路としておく。 つまり、積分変数 u は、 $u \equiv Re^{i\theta}$ と書くことができ、積分範囲は $-\pi/2 \le \theta \le 0$ となる。その条件で積分を実行すると、

$$\left| \int_C \frac{e^{-u}}{u} du \right| = \left| i \int_{-\pi/2}^0 e^{-Re^{i\theta}} d\theta \right| = \left| \int_{-\pi/2}^0 e^{-R\cos\theta - iR\sin\theta} d\theta \right|$$
$$\leq \int_{-\pi/2}^0 \left| e^{-R\cos\theta - iR\sin\theta} \right| d\theta = \int_{-\pi/2}^0 e^{-R\cos\theta} d\theta,$$

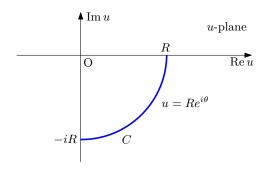


図 1.6: 無限遠の円弧上の積分路

のように計算できる。この計算結果に対して $R\to\infty$ の極限をとると, 右辺はゼロになる。したがって, 正弦積分 $\mathrm{si}(x)$ の評価における $-i\infty$ から ∞ への積分はゼロである。また, 被積分関数は原点を除く複素数平面全体で正則であるので, 原点を周回しない限り, 積分路を任意にとっても積分はゼロである。もう一方, $i\infty$ から ∞ への積分も同様の考察によってゼロになることが示せる。

余弦積分も同様の操作を用いれば指数積分との関係が導出できる。導出過程を省略するが、その結果として、

$$Ci(x) = -\frac{1}{2} [E_1(ix) + E_1(-ix)],$$

が導かれる。指数積分の級数展開(1.19)を代入すると、正弦積分と余弦積分は、

$$si(x) = -\frac{\pi}{2} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1) \cdot (2k+1)!},$$
(1.20a)

$$Ci(x) = \gamma + \log x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k}}{2k \cdot (2k)!},$$
 (1.20b)

なる級数で表すことができる。正弦積分の級数展開 (1.20a) の第 2 項が sinc 関数を区間 [0,x] で積分した結果である 3 ので、sinc 関数を $[0,\infty)$ で積分すると $\pi/2$ であることが導かれる。 この sinc 関数の積分は、 $(e^{ix}-e^{-ix})/2ix$ を留数定理を用いて評価した結果と一致する。一方、余弦積分については、級数展開の総和の範囲が k=1 が始点であることに注意を要する。余弦積分は積分区間の始点 x をゼロに近づけると、 $\gamma+\log x$ で発散する。これらの級数展開で計算すると、正弦積分と余弦積分は図 1.7 のような曲線を描く。変数の増加とともに被積分関数の振幅が小さくなるので、双方の積分は積分区間の始点 x が増加すると振幅が小さくなっている。

対数積分 指数積分はさらに、対数積分と呼ばれる積分にも発展できる。対数積分とは、

 $^{^3}$ 被積分関数 $\sin t/t$ を級数展開して、区間 [0,x] で積分すると第 2 項と同一の結果が得られる。

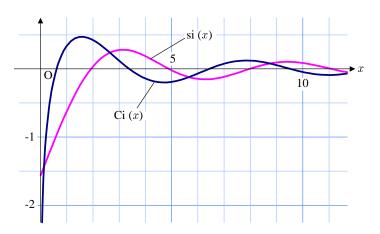


図 1.7: 正弦積分と余弦積分

のように対数の逆数を被積分関数とする積分である。この積分は, $u \equiv e^{-t}$ なる置き換えによって,

$$\lim x = \int_{-\infty}^{-\log x} \frac{e^{-t}}{t} \, \mathrm{d}t,$$

のように書き換えられるので.

$$\operatorname{li} x = -E_1(-\log x),$$
 (1.22)

なる等式が成立する。つまり、対数積分が指数積分を用いて計算できることが示されたのだ。この関数の計算は、概して指数関数の級数展開 (1.19) を用いて計算できるのだが、x=0,1 では注意を要する。まず、x=0 のとき $\log x$ が定義できない。さらに、x=1 の場合、 $\log x=0$ となり、級数展開 (1.19) に含まれる対数関数が定義できないのだ。そこで、定義式 (1.21) を見返してみると、 $\mathrm{li}(0)=0$, $\mathrm{li}(1)=-\infty$ とするのが妥当である。他の場合については級数展開を利用して対数積分を計算すると、図 1.8 に示す曲線を描くことがわかる。対数積分は、数論において、素数の個数を表現する数式として応用されることがある。

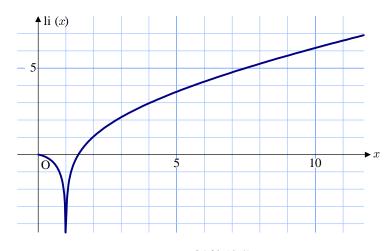


図 1.8: 対数積分

1.8.3 高次の指数積分

本節で用いた指数積分は $E_1(x)$ のように添え字をともなっていたことに疑問を持った読者がいることだろう。実は、この表記は1次の指数積分であることを意味している。つまり、2次や3次の指数積分なる関数が定義されているのだ。一般的なn次の指数積分は、

$$E_n(x) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt}}{t^n} \, \mathrm{d}t, \tag{1.23}$$

のように定義される。定義式がこれまでに用いた $E_1(x)$ の定義式と違うように見えるが, $u \equiv xt$ の置き換えを適用すると、これまでと同一の定義式になる。また、指数積分は隣り合う次数との間に、

$$E_{n+1}(x) = \frac{e^{-x} - x E_n(x)}{n},$$
(1.24)

なる漸化式が成立する。この漸化式は定義式 (1.23) を部分積分すれば証明できる。部分積分を実行すると,

$$E_n(x) = \frac{e^{-x}}{x} - \frac{n}{x} \int_1^x \frac{e^{-xt}}{t^{n+1}} dt,$$

のように計算できる。右辺の第 2 項が $-nE_{n+1}(x)/x$ であるので、上で述べた漸化式が得られる。漸化式に x=0 を代入すると、 $n\neq 1$ のとき、 $E_n(x)=1/(n-1)$ であることがわかる。

第2章 ゼータ関数

調和級数 $1+1/2+1/3+\cdots$ が発散することは古くから知られ、14 世紀にはオレームがその発散性を証明した。それに対し、自然数のべき乗の逆数による無限級数、すなわち、 $\zeta(s)\equiv 1+1/2^s+1/3^s+\cdots$ は収束する。そのため、その級数はゼータ関数と定義される。本章では、調和級数から説明をはじめゼータ関数を導入する。さらに、ゼータ関数の性質について議論する。

2.1 調和級数

自然数の逆数は $1, 1/2, 1/3, \ldots$ のように、順次小さくなり、その値はゼロに向かって収束していく。自然数の逆数を加算した級数、いわゆる調和級数は、加算する項の数を無限大にしたとき収束するのだろうか?調和級数は、記号を用いて、

$$H_n \equiv \sum_{k=1}^n \frac{1}{k},$$

によって定義される。この級数の隣り合う項との差は, $H_n-H_{n-1}=1/n$ であり, $n\to\infty$ とすればこの差はゼロに収束するので, 調和級数はある有限の値に収束すると信じられていた。実際に調和級数を計算してみると, $H_{100}=5.18738$, $H_{1000}=7.48547$ のように値がゆっくりと上昇する。この上昇の緩さから, 調和級数が発散すると言っても疑わしく聞こえるかもしれない。しかし、調和級数は発散するのである。

調和級数が発散することは、14世紀にオレームによって証明された。オレームの証明に したがって調和級数の発散を示してみよう。調和級数を次のように書いてみると調和級数 の発散が理解できる。

$$H_4 = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4}$$

$$> 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 1 + \frac{2}{2},$$

$$H_8 = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \frac{1}{5} + \frac{1}{6} + \frac{1}{7} + \frac{1}{8}$$

$$> 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} = 1 + \frac{3}{2}.$$

この関係を一般化すると,

$$H_{2^n} > 1 + \frac{n}{2},$$

と書くことができる。この関係式において $n \to \infty$ とすれば右辺が発散するので、調和級数が発散することが示されるのである。

調和級数の項を部分的に抜き出し、分母が偶数だけ、または、奇数だけの項のみで構成される級数もやはり発散する。調和級数の項を部分的に抜き出した級数が発散することは、

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{6} + \frac{1}{8} + \dots = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \dots \right) = \infty,$$

$$1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \frac{1}{7} + \frac{1}{9} + \dots > \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{6} + \frac{1}{8} + \frac{1}{10} + \dots \right) = \infty,$$

と書けば証明できる。つまり、調和級数は項を半分に間引いた程度では収束する級数をつくるることはできない。同様に、分母が3の倍数になるものだけ、さらに、分母が1000の倍数になるものだけ間引いて抜き出したとしても、やはり、その級数は発散する。

総和計算の項数 n に対する調和級数 H_n は下表のようになる。その結果によると、調和級数 H_n は $\log n$ と同じくらいの速さで上昇している。しかも、 $\gamma_n \equiv H_n - \log n$ を計算してみると下表のように一定の値に収束しそうである。

表 2.1: 調和級数と対数関数の関係

n	H_n	γ_n
10	2.9289682	0.6263831
100	5.1873775	0.5822073
1000	7.4854708	0.5777155
10000	9.7876060	0.5772656
100000	12.0901461	0.5772206
1000000	14.3927267	0.5772161
10000000	16.6953113	0.5772157

調和級数 H_n と対数関数 $\log x$ と差,すなわち, γ_n を調べてみよう。その関係を調べるには図 2.1 に示す幾何学的関係に注目すればよい。この図は,関数 f(x)=1/x の定積分を長方形の面積で近似した場合を表している。図 2.1 (a) は,濃い網掛けの長方形の面積が関数の積分値より少なくなるように配置した図である。一方,図 2.1 (b) は,濃い網掛けの長方形の面積が関数の積分値より大きくなるように配置した図である。

図 2.1 のどちらも, 濃い網掛けと薄い網掛けの長方形の面積の和は H_n (図では n=8 としている) である。そのうち, 関数 1/x の積分の見積もり量に含むのは濃い網掛け部のみであり, 薄い網掛け部は除外される。したがって, 関数 1/x を区間 [1,n] で積分した結果は,

$$\sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k+1} < \log n < \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k},$$

2.1. 調和級数 29

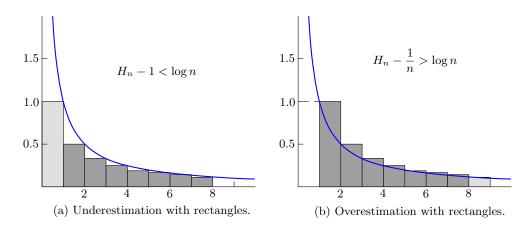


図 2.1: 調和級数と対数関数の関係

なる不等式で記述できるが、これを調和級数の記号 H_n を用いて書き換えると、

$$H_n - 1 < \log n < H_n - \frac{1}{n},$$

となる。さらに、この不等式から H_n を減じて -1 倍すると、 $1/n < \gamma_n < 1$ が得られる。しかし、これだけでは γ_n が収束するとはいえない。なぜなら、数列 $a_n = (2 + (-1)^n)/4$ のように $1/n < a_n < 1$ を満足しているが、収束せずに振動している場合も考えられるからである。そこで、 γ_n の階差を評価してみよう。

$$\gamma_n - \gamma_{n-1} = H_n - H_{n-1} + \log(n-1) - \log n$$

= $\frac{1}{n} + \log\left(1 - \frac{1}{n}\right)$.

この階差を評価するには, $x \neq 0$ に対して $x > \log(1-x)$ が成立することに注意すればよい。この関係式の x を -1/n で置き換えれば、

$$\gamma_n - \gamma_{n-1} < 0,$$

であることが導かれる。したがって, γ_n は単調減少の数列である。単調減少の数列 γ_n が $n\to\infty$ の条件で $0<\gamma_n<1$ となるということは, γ が区間 (0,1) の中のどこかの点に収束 することを意味している。その極限値は,

$$\gamma \equiv \lim_{n \to \infty} \left(\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} - \log n \right), \tag{2.1}$$

のように記述される定数となる。定数 γ は**オイラー定数**を呼ばれ, $\gamma \simeq 0.577216$ である。この関係式を利用すると, n が十分に大きければ, 調和級数は $H_n \simeq \log n + \gamma$ なる近似式で評価できる。

2.1.1 素数の逆数和

調和級数を構成する項の部分集合として, しかも分母が素数であるもので構成した級数:

$$P_n = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \frac{1}{7} + \frac{1}{11} + \dots + \frac{1}{p_n},$$

は収束するだろうか。素数は自然数の集合に対してまばらに存在する印象がある。しか も、そのような級数は有限数の項で完結しないだろうか。

実は、素数の逆数による級数は無限項まで存在する。つまり、素数が無限に存在するということなのだが、その事実は古代ギリシャでも知られていた。古代ギリシャのユークリッドが次のようにして、素数が無限に存在することを証明している。

証明 素数が有限個 (n m) であることを仮定し、すべての素数を $p_1, p_2, p_3, \ldots, p_n$ と書く。すべての素数の積に 1 を加えた自然数 q, すなわち、

$$q = p_1 p_2 p_3 \cdots p_n + 1$$

を考える。自然数 q は, p_1 から p_n のどの素数で割っても, 必ず, 1 が余る。すなわち, p_1 から p_n がすべての素数であるという仮定に矛盾する。つまり, 素数は無限に存在する。¶

さて、表 2.2 によって素数の逆数による級数を調べてみよう。その表には、与えられた上限数 (upper limit) を超えない素数の個数 n と、最大の素数 p_{n-1} と、それら n 個の素数の逆数からなる級数の値 S_n を記載している。素数の逆数による級数は調和級数に比べ、かなりゆっくりと上昇する。上限数を百万としたときの級数にしても、その値は 2.887 程度にしかなっていない。これくらい上昇が遅いと、この級数はある数値に収束しそうな気がするのだが、驚くことにこの級数も発散するのである。

表 2.2: 素数の逆数による級数

Upper limit	n	p_{n-1}	S_n
10	4	7	1.17619048
100	25	97	1.80281720
1000	168	997	2.19808013
10000	1229	9973	2.48305998
100000	9592	99991	2.70527218
1000000	78498	999983	2.88732810
10000000	664579	9999991	3.04144938

2.1. 調和級数 31

素数の逆数による級数は、オイラーがゼータ関数を研究することによって発散することを発見した。一方、20世紀にエルデシュがわかりやすい証明によって、素数の逆数による級数が発散することを示しているのでその方法を紹介する。エルデシュの証明は背理法によるものである。つまり、素数の逆数による級数が収束すると仮定した上でその矛盾を暴くことによって級数の発散を証明するのである。

証明 素数の逆数による級数が収束するということは、ある任意の正の数 ε が与えられたとき、

$$\frac{1}{p_{n+1}} + \frac{1}{p_{n+2}} + \frac{1}{p_{n+3}} + \dots < \varepsilon,$$

を満たす整数 n が存在する。この ε は,任意の正の数であるのでどんな値であってもよい。どんなに小さい ε を設定しても,必ず,上の不等式を満たす n が存在するということによって級数の収束を約束しているのである。まず,素数の逆数の級数が収束することを仮定し, ε はどのような正の数であってもよいので, $\varepsilon=1/2$ としてみよう。さらに,上の不等式の両辺に自然数 N を乗じると,不等式は,

$$\frac{N}{p_{n+1}} + \frac{N}{p_{n+2}} + \frac{N}{p_{n+3}} + \dots < \frac{N}{2},$$

となる。ここで、1 から N までの自然数のうち、 p_n 以下の素数だけで因数分解できる自然数の個数を N_1 個とする。逆に、少なくとも p_{n+1} 以上の約数をもつ自然数の個数を N_2 個とする。言うまでもなく、 $N=N_1+N_2$ でなければならない。ここで、上の不等式の各項の小数部を切り捨てると、その不等式は、

$$\left\lfloor \frac{N}{p_{n+1}} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{N}{p_{n+2}} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{N}{p_{n+3}} \right\rfloor + \dots < \frac{N}{2},$$

なる形に書き換えられる。小数部を切り捨てることによって、左辺はより小さな値になるので、不等式としては成立したままである。ところで、 $\lfloor N/p_{n+1} \rfloor$ は、1 から N までの自然数のうち, p_{n+1} を約数とする自然数の個数である。そう考えると、この不等式は、

$$N_2 \le \left| \frac{N}{p_{n+1}} \right| + \left| \frac{N}{p_{n+2}} \right| + \left| \frac{N}{p_{n+3}} \right| + \dots < \frac{N}{2},$$

と書けるはずである。すなわち, $N_2 < N/2$ である。一方, p_n 以下の素数のみで因数分解できる自然数 ν は、

$$\nu = p_1^{e_1} p_2^{e_2} \cdots p_n^{e_n} \cdot m^2,$$

のように書くことができる。ただし、指数 e_1, e_2, \ldots, e_n は 0 または 1 であり、m はやはり p_n 以下の素数のみで因数分解できる自然数である。この式は、自然

数 ν を因数分解したとき、素数の偶数乗となっている因子をすべて m^2 に放り込み、残りの因子を $p_1^{e_1}p_2^{e_2}\cdots p_n^{e_n}$ として並べたと思えばよい。例えば、11 以下の素数のみで因数分解できる自然数 $2\,683\,296$ は、

$$2683296 = 2^5 \cdot 3^2 \cdot 7 \cdot 11^3 = 2^1 \cdot 3^0 \cdot 5^0 \cdot 7^1 \cdot 11^1 \cdot (2^2 \cdot 3^1 \cdot 11^1)^2,$$

となるので、この場合、 $[e_1,e_2,e_3,e_4,e_5]=[1,0,0,1,1]$ 、m=132 である。 さて、 p_n 以下の素数で因数分解した場合、指数 $[e_1,e_2,\ldots,e_n]$ の組み合わせは 2^n 通り存在し、m の選び方はたかだか \sqrt{N} 通りである。よって、 p_n 以下の素数のみで分解できる自然数の個数 N_1 は、 $N_1 \leq 2^n \sqrt{N}$ となる。ここで、 $N>2^{2(n+1)}$ となるように N を選べば、 $N_1 < N/2$ となる。つまり、 $N_1 + N_2 < N$ となり、自然数の個数に矛盾が生じる。この矛盾が生じた理由は、N 以下の自然数のうち p_{n+1} 以上の素数を約数とする自然数の個数を $N_2 < N/2$ のように限定してしまったことである。これにより、不等式:

$$\frac{1}{p_{n+1}} + \frac{1}{p_{n+2}} + \frac{1}{p_{n+3}} + \dots < \frac{1}{2},$$

を満足するnは存在しないことになる。したがって、素数の逆数による級数は発散する。 \P

2.1.2 交代調和級数

自然数の逆数を順次加算した級数、いわゆる調和級数が発散することは既に述べた。調和級数に加算する第n項は1/nであるので、加算する項の増加ともに加算する項はゼロに近づいていく。それにも関わらず調和級数は発散するのである。しかし、加算する項の符号を交互に入れ替え、

$$\hat{H}_n \equiv \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots + (-1)^n \frac{1}{n},$$

のように計算される級数は収束する。このように自然数の逆数を符号を交互に入れ替えながら加算した結果を交代調和級数と呼ぶ。交代調和級数の偶数番目の値 \hat{H}_{2n} に注目したとき, $\hat{H}_{2n}=\hat{H}_{2n-1}+1/2n$ である。また, 2n+1 番目の値が,

$$\hat{H}_{2n+1} = \hat{H}_{2n} - \frac{1}{2n+1} = H_{2n-1} + \frac{1}{2n(2n+1)},$$

であるので、交代調和級数は、

$$\hat{H}_{2n-1} < \hat{H}_{2n+1} < \hat{H}_{2n},$$

2.1. 調和級数 33

なる関係を満たす。第2n+1番目の値をはさむ2つの値の差は1/2nである。この差はnが上昇するとゼロに近づいていくため,交代調和級数の極限値は特定の値に追い詰められ,収束するのである。交代調和級数が収束する先の数値は,

$$\hat{H}_{\infty} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots = \log 2,$$

である。この関係式は、対数関数のマクローリン級数 $\log(1+x)=x-x^2/2+x^3/3-x^4/4+\cdots$ に x=1 を代入して得られる。

交代調和級数の収束は、収束の中でも条件収束に分類される。条件収束を簡単に説明しよう。一般的に議論するため、数列 a_n を考えよう。この数列による級数:

$$S_n = \sum_{k=1}^n a_n,$$

が収束するとき,数列 a_n の絶対値による級数 $\sum |a_n|$ も収束できる場合がある。そのとき,級数 S_n は絶対収束するという。それに対して,絶対値による級数が収束せず, S_n が収束する場合, S_n は条件収束するという。交代調和級数の場合に置き換えると,絶対値による級数が調和級数である。既に見てきたように調和級数は発散し,交代調和級数が収束する。したがって,交代調和級数は収束の中でも,条件収束するということである。

交代調和級数のように条件収束する級数には不可思議な性質がある。条件収束する級数は,総和の順序を入れ替えると結果が変化する場合があるのだ。交代調和級数を次のように順序を入れ替えてみよう。

$$\hat{H}_{\infty} = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \frac{1}{6} + \frac{1}{7} - \frac{1}{8} + \cdots$$

$$= 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{4} + \frac{1}{3} - \frac{1}{6} - \frac{1}{8} + \frac{1}{5} - \frac{1}{10} - \frac{1}{12} + \cdots$$

この数式は、単に加算する項の順序を入れ替えただけであるが、さらに計算を進めると、

$$\begin{split} \hat{H}_{\infty} &= \left(1 - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4} + \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{6}\right) - \frac{1}{8} + \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{10}\right) - \frac{1}{12} + \cdots \\ &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \frac{1}{6} + \cdots\right) \\ &= \frac{\log 2}{2}, \end{split}$$

が得られる。もともと $\hat{H}_{\infty} = \log 2$ のはずだったのに, 加算の順序を入れ替えるとその半分の値になってしまった。条件収束する数列は, 加算する項の順序を入れ替えて異なる和に収束させるからくりが可能なのである。

2.2 バーゼル問題

調和級数だけでなく、素数の逆数による級数までもが発散することがわかった。次に、自然数の自乗の逆数和:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{4^2} + \cdots,$$

について考えてみよう。この無限級数は.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} < 1 + \int_{1}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{x^2} = 2,$$

であることから、ある特定の値に収束することが容易に予想される。この予想はある驚くべき事実を意味している。それは、自然数の部分集合としての素数の列 $2,3,5,7,11,13,17,\dots$ よりも、自乗数 $1,4,9,16,25,36,49,\dots$ の方が少ないということである。

自乗数の逆数和の極限値を特定する問題はバーゼル問題と呼ばれる。バーゼル問題は 1644 年に、モンゴリによって提起され、ヨハン・ベルヌーイもその問題に取り組んだが解決できなかった。ところが、1735 年、ヨハン・ベルヌーイの弟子であったオイラーが、自乗数の逆数和が $\pi^2/6$ であることを特定したのである。ここでは、フーリエ級数を利用したバーゼル問題の解法を示そう。

フーリエ変換を利用したバーゼル問題の解法を示すため、図 2.2 に示す周期 2π で振幅 $\pi/2$ の三角波を考えよう。この三角波 f(x) は、

$$f(x) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} + x. & (-\frac{\pi}{2} \le x < 0) \\ \frac{\pi}{2} - x. & (0 \le x < \frac{\pi}{2}) \end{cases}$$

によって定義され、それ以外のxでは周期性 $f(x+2\pi)=f(x)$ によって関数の値が決められる。このような周期性をもつ関数は、フーリエ級数展開できる。フーリエ級数展開とは、

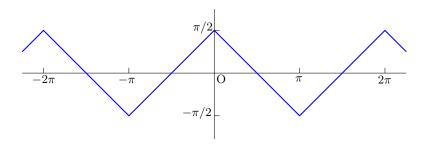


図 2.2: 周期 2π で振幅 $\pi/2$ の三角波

2.2. バーゼル問題 35

$$f(x) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \cos nx + B_n \sin nx),$$

のように整数倍波成分の三角関数の重ね合わせによって関数を表現する方法である。フーリエ級数展開に現れる展開係数 A_0, A_n, B_n は、

$$A_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, dx, \quad A_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, \cos nx \, dx,$$
$$B_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, \sin nx \, dx,$$

によって計算できる。この計算に関するヒントとして, f(x) が奇関数であれば $A_n=0$, 偶 関数であれば $B_n=0$ である。関数 f(x) として想定している三角波は偶関数であるので $B_n=0$ である。具体的に展開係数 A_n を定めると,

$$f(x) = 4 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\cos(2k+1)x}{\pi (2k+1)^2},$$

が得られる。この三角波は $f(0) = \pi/2$ となるはずなので、上のフーリエ変換に x = 0 を代入すると、

$$\frac{\pi}{2} = 4\left(\frac{1}{\pi} + \frac{1}{3^2\pi} + \frac{1}{5^2\pi} + \cdots\right),$$

が得られる。両辺に $\pi/4$ を乗じると、この関係式は、

$$\frac{\pi^2}{8} = 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \cdots,$$

のように書くことができる。この式をさらに変形すると、

$$\frac{\pi^2}{8} = \left(1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \cdots\right) - \left(\frac{1}{2^2} + \frac{1}{4^2} + \frac{1}{6^2} + \cdots\right)$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} - \frac{1}{2^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{3}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2},$$

となるので、ただちに

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6},$$

が得られる。すなわち、バーゼル問題が解けたことになる。

バーゼル問題の解は神秘的な事実を教えてくれる。つまり、自然数の自乗の逆数和が超越数、しかも、円周率に関係する値に収束するという事実である。ただし、自然数の自乗の逆数和の収束が遅いため、このバーゼル問題の解は円周率を求めるためには利用できない。しかしながら、さらに一般化して、自然数のs乗の逆数和がどのような数値に収束するのかという興味がわいてくる。それがゼータ関数の発端である。

2.3 ゼータ関数の導入

前節までに、調和級数が発散し、2次の調和級数が $\pi^2/6$ に収束することを示した。当然の流れとして、それを一般化し、s次の調和級数の振る舞いに興味がわいてくるだろう。その級数をsの依存性について定義した関数:

$$\zeta(s) = 1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \frac{1}{4^s} + \cdots,$$
 (2.2)

はゼータ関数と呼ばれる。本節では、新たに定義したゼータ関数の性質を調べる。

2.3.1 ゼータ関数の収束

新たに定義されたゼータ関数 $\zeta(s)$ は, s 次の調和級数であり, s=1 で発散することがわかっている。一方, s=2 の場合はバーゼル問題の解であるので, $\zeta(2)=\pi^2/6$ である。ここでは, ゼータ関数が収束するための変数 s の条件を調べてみよう。

変数 s に対して, $\zeta(s)$ が収束するかどうかを調べてみよう。その目的のため, 級数を n 項で打ち切った調和級数を.

$$H_n^{(s)} = 1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \frac{1}{4^s} + \dots + \frac{1}{n^s},$$

のように定義する。オレームの証明に倣って数式変形すると、

$$\begin{split} H_{2^{n}-1}^{(s)} < 1 + \left(\frac{1}{2^{s}} + \frac{1}{2^{s}}\right) + \left(\frac{1}{4^{s}} + \frac{1}{4^{s}} + \frac{1}{4^{s}} + \frac{1}{4^{s}}\right) \\ + \left(\frac{1}{2^{s(n-1)}} + \frac{1}{2^{s(n-1)}} + \dots + \frac{1}{2^{s(n-1)}}\right) \\ = 1 + \frac{2}{2^{s}} + \frac{4}{4^{s}} + \dots + \frac{2^{n-1}}{2^{s(n-1)}} \\ = \sum_{k=0}^{n-1} 2^{k(1-s)} = \frac{1 - 2^{n(1-s)}}{1 - 2^{1-s}}, \end{split}$$

となる。数列 $H_n^{(s)}$ は, $n \to \infty$ の極限で, s > 1 のとき,

$$H_{\infty}^{(s)} < \frac{1}{1 - 2^{1-s}},$$

なる不等式を満足する。数列 $H_n^{(s)}$ が n の増加に対して単調増加であることを考えると, $H_n^{(s)}$ は s>1 のときに特定の値に収束する。したがって, ゼータ関数 $\zeta(s)$ は, s>1 である任意の実数に対して定義できることが示された。

2.3.2 素数による表現

任意の次数の調和級数として定義されるゼータ関数は、素数を用いた数式表現が可能である。素数を用いた数式表現は、オイラーによって導出された。その表現は、素数が無限に存在することの証明になっている。

ゼータ関数を素数によって表現しよう。その導出は, s 次の調和級数としてのゼータ関数 $\zeta(s)$ の定義:

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s},$$

から始める。この定義式を別の形式で書き換えることができるかを, すべての自然数が素因数分解によって一意的に表現することに基づいて考えてみよう。素数を小さい順に並べ, p_0, p_1, p_2, \ldots のように番号付けをしたと仮定する。具体的に書くと,

$$p_0 = 2$$
, $p_1 = 3$, $p_2 = 5$, $p_3 = 7$, $p_4 = 11$, ...

となるわけであるが、これらの素数を用いるとあらゆる自然数は、

任意の自然数 =
$$p_0^{e_0} p_1^{e_1} p_2^{e_2} p_3^{e_3} p_4^{e_4} \cdots = \prod_{k=0}^{N-1} p_k^{e_k}$$
,

のように表現できる。ここで, N はあらゆる自然数に含まれる素数の総数である。後にこの総数が無限大であることが示されるのだが, ここでは N ということにしておこう。素因数分解の一意性より, すべての自然数は, 各素数に与えられた指数 e_0, e_1, e_2, \ldots の組み合わせで特定できる。ただし, これらの指数は 0 以上の整数である。したがって, ゼータ関数は

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \sum_{e_0, e_1, e_2, \dots} \prod_{k=0}^{N-1} \frac{1}{p_k^{se_k}}$$

$$= \prod_{k=0}^{N-1} \left(\sum_{e_k=0}^{\infty} \frac{1}{p_k^{se_k}} \right) = \prod_{k=0}^{N-1} \frac{1}{1 - p_k^{-s}}, \tag{2.3}$$

のように変形される。ところで、オレームの証明により $\zeta(1)$ が発散する事実があるのだが、 (2.3) によると、素数の数 N が有限であれば $\zeta(1)$ が有限の値となるので事実と矛盾してしまう。よって、素数が無限に存在することがゼータ関数からも導き出された。素数が無限に存在することを (2.3) に反映させると、ゼータ関数は、

$$\zeta(s) = \prod_{k=0}^{\infty} \frac{1}{1 - p_k^{-s}},\tag{2.4}$$

のように書かれる。素数による無限乗積によってゼータ関数を表現する方法は神秘的である。例として, $\zeta(2)$ の無限乗積表現を表 2.3 によって検証してみよう。その表には, 与えら

Upper limit	n	P_n
10	4	1.59505208
100	25	1.64194520
1000	168	1.64472519
10000	1229	1.64491792
100000	9592	1.64493275
1000000	78498	1.64493396
10000000	664579	1.64493406

表 2.3: 素数表現による $\zeta(2)$ の検証

れた上限値 (upper limit) を超えない素数の数nと、無限乗積をn段で打ち切ったときの積 P_n を記載している。この積 P_n が、上限数 (または、打ち切り段数n) の増加とともに真値 $\pi^2/6$ (= 1.64493407) に近づいていることが表 2.3 から確認できる。

素数によるゼータ関数の表現に関して, $\zeta(1)$ の対数を評価することによって素数の逆数による級数が発散することが示される。ゼータ関数の表現式 (2.4) の対数を計算すると,

$$\log \zeta(1) = -\sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{p_n} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{p_n} + \frac{1}{2p_n^2} + \frac{1}{3p_n^3} + \cdots \right)$$

$$< \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{p_n} + \frac{1}{p_n^2} + \frac{1}{p_n^3} + \cdots \right), \tag{2.5}$$

なる関係が得られる。ところで、素数のべき乗の逆数数の級数が、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n^s} = \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \frac{1}{5^s} + \dots < \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n^s},$$

であることに注意すると, (2.5) の右辺は

RHS of (2.5)
$$<\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n} + \sum_{s=2}^{\infty} \left(\sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n^s}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n} + \sum_{s=2}^{\infty} \left(\zeta(s) - 1\right),$$
 (2.6)

のように書き換えられる。前節でオレームの証明に倣って導いた関係式より、

$$\zeta(s) - 1 < \frac{1}{1 - 2^{1-s}} - 1 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2^{k(s-1)}} = \frac{1}{2^{s-1} - 1},$$

なる不等式が成立するのだが、ここでs > 2であることに注意すると、

$$\zeta(s) - 1 < \frac{1}{2^{s-1} - 1} < \frac{1}{2^{s-1} - 2^{s-2}} = \frac{1}{2^{s-2}},$$

のように不等式を変形することができる。この不等式を適用すると(2.6)の右辺は、

RHS of (2.6)
$$< \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n} + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{2^{s-2}}$$

= $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n} + 2$,

のようになる。この結果をまとめると、 $\zeta(1)$ の対数は、

$$\log \zeta(1) < \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{p_n} + 2, \tag{2.7}$$

なる不等式を満足する。しかしながら、オレームの証明したように $\zeta(1)$ が発散するので、それに矛盾しないためには右辺の第 1 項、すなわち、素数の逆数による級数が発散しなればならない。したがって、素数の逆数による級数が発散するという事実が証明された。

ここで、表 2.4 を用いて不等式 (2.7) を検証しておこう。その表には、与えられた上限数 (upper limit N) を超えない素数の数 n, そのような素数の最大値 p_{n-1} , 素数逆数の級数 S_n と、調和級数の対数 $\log H_N$ を記載している。不等式 (2.7) の導出には、かなり粗い評価をしているため S_n と H_N の差は 2 よりもかなり小さな値ではあるが、確かに不等式が成り立っていることが確認できる。

Upper limit N	n	p_{n-1}	S_n	$\log H_N$
10	4	7	1.1761905	1.07465021
100	25	97	1.8028172	1.64622789
1 000	168	997	2.1980801	2.01296392
10000	1229	9973	2.4830600	2.28111689
100000	9592	99991	2.7052722	2.49239075
1000000	78498	999983	2.8873281	2.66672299
10000000	664579	9999991	3.0414494	2.81512792

表 2.4: 素数逆数の級数と調和級数の対数

2.3.3 偶数ゼータ関数

ゼータ関数の変数が偶数である場合の値、いわゆる偶数ゼータ関数は具体的に関数値を記述できることが知られている。既にバーゼル問題を紹介し、 $\zeta(2)=\pi^2/6$ であることを示した。ゼータ関数の変数 s が 4 以上の偶数の場合、 $\zeta(s)$ はベルヌーイ数を用いて厳密な値で記述することができるのだ。ベルヌーイ数とは、

$$\frac{x}{e^x - 1} \equiv \sum_{m=0}^{\infty} B_m \frac{x^m}{m!},$$

の展開係数を与える数列 B_m として定義される。ベルヌーイ数はすべて有理数:

$$B_0 = 1$$
 $B_1 = -\frac{1}{2}$, $B_2 = \frac{1}{6}$, $B_4 = -\frac{1}{30}$, $B_6 = \frac{1}{42}$, ...

であり、しかも、第3項以降の奇数項はすべてゼロである。 導出過程を省略するが、ベルヌーイ数は、余接関数 (cotangent) のローラン級数展開:

$$\cot z = \frac{1}{z} + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{2^{2k} B_{2k}}{(2k)!} z^{2k-1},$$

の展開係数に現れる。ここで、余接関数の部分級数展開による表現から、

$$\cot x = \frac{1}{z} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2z}{z^2 - \pi^2 n^2}$$
$$= \frac{1}{z} - \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\pi^{2k} n^{2k}} z^{2k-1},$$

のような記述も可能である。この数式の第 1 行目の右辺が余接関数の部分分数展開である。この部分分数展開は,複素関数論のテキストなどに記載されている。さらに,第 2 行目は 2 項定理を用いてさらに展開した結果である。ここで,ベルヌーイ数を用いたローラン展開と z^{2k-1} の係数を比較すると.

$$\sum_{n=1} \infty \frac{1}{n^{2k}} = \frac{(-1)^{k-1} 2^{2k-1} \pi^{2k} B_{2k}}{(2k)!},$$

なる関係が得られる。この関係式は,

$$\zeta(2s) = \frac{(-1)^{s-1} 2^{2s-1} \pi^{2s} B_{2s}}{(2s)!},\tag{2.8}$$

と書き換えることができる。ここで,sは任意の自然数である。つまり,偶数ゼータ関数はベルヌーイ数を用いて厳密に記述できることになる。ベルヌーイ数との関係に基づき,偶数ゼータ関数の例をいくつか挙げると,

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \zeta(6) = \frac{\pi^6}{945}, \quad \zeta(8) = \frac{\pi^8}{9450}, \quad \dots$$

となる。確かに、 $\zeta(2)$ は、オイラーが発見したバーゼル問題の解と同一であることがわかる。

2.3.4 奇数ゼータ関数

既に示したように、偶数ゼータ関数 $\zeta(2k)$ はベルヌーイ数と円周率のべき乗によって厳密な値が求められる。それに対して、奇数ゼータ関数 $\zeta(2k+1)$ は、現在でも性質がほとんどわかっていない。唯一、 $\zeta(3)$ だけが 1978 年になってアペリーによって無理数であることが示された。それより以前から $\zeta(3)=1.20205\,690\cdots$ となることは知られてはいたが、

この極限値はアペリー定数と呼ばれている。アペリー定数を含め, 奇数ゼータ関数の値をいくつか書くと,

$$\zeta(3) = 1.20205 \cdots, \quad \zeta(5) = 1.03692 \cdots, \quad \zeta(7) = 1.00834 \cdots,$$

 $\zeta(9) = 1.00200 \cdots, \quad \dots$

となる。

厳密な正体がわからないとはいえ、 奇数ゼータ関数の級数表現はさまざまな形が知られている。本節では、 $\zeta(3)$ の級数表現の一例を導出してみよう。オイラー積による正弦関数の表現式:

$$\sin x = x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{\pi^2 n^2} \right),$$

の対数を計算すると,

$$\log(\sin x) = \log x + \sum_{n=1}^{\infty} \log\left(1 - \frac{x^2}{\pi^2 n^2}\right)$$

$$= \log x - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^{2k}}{\pi^{2k} n^{2k}} = \log x - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\zeta(2k)}{\pi^{2k}} x^{2k}, \tag{2.9}$$

が得られる。ところで、 $\sin x = e^{ix}(1 - e^{-2ix})/2i$ であることに注意すると左辺は、

$$\log(\sin x) = \log(1 - e^{-2ix}) + ix - \log 2 - \frac{i\pi}{2}$$

$$= -\sum_{k=1}^{\infty} e^{-2ikx} + ix - \log 2 - \frac{i\pi}{2},$$
(2.10)

のように変形される。しかし、 $\sin x = -e^{-ix}(1-e^{2ix})/2i$ と書くこともできるので、左辺は

$$\log(\sin x) = \log(1 - e^{2ix}) + ix - \log 2 + \frac{i\pi}{2}$$

$$= -\sum_{k=1}^{\infty} e^{2ikx} - ix - \log 2 + \frac{i\pi}{2},$$
(2.11)

のようにも変形できる。そこで、(2.20)と (2.21)の算術平均をとると、

$$\log(\sin x) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos 2kx}{k} - \log 2,$$
 (2.12)

なる関係式が得られる。この関係式の導出において、(2.10) と (2.11) は対数関数のテイラー級数によって表現されている。そのテイラー級数の収束半径は1であるので、(2.10) と (2.11) は収束半径ぎりぎりのきわどい場所でのテイラー級数となっている (x=0 のときには収束しないが)。また、この関係式もオイラーの式と呼ばれているそうなので、オイラーの業績には驚くばかりである。

次に (2.12) の両辺を区間 (0,x] で定積分を 2 回実行してみよう。形式的に書くと、

$$\int_0^x \int_0^x \log(\sin x) \, dx^2 = -\int_0^x \int_0^x \left(\sum_{k=1}^\infty \frac{\cos 2kx}{k} + \log 2\right) dx^2, \tag{2.13}$$

が成り立つはずである。それでは、左辺と右辺を個別に計算してみよう。まず、(2.9)の関係に注目すれば、左辺の積分は

LHS of (2.13) =
$$\int_0^x \int_0^x \left(\log x + \sum_{k=1}^\infty \frac{\zeta(2k)}{\pi^{2k}} x^{2k} \right) dx^2$$

= $\int_0^x \left(x \left(\log x - 1 \right) + \sum_{k=1}^\infty \frac{\zeta(2k)}{(2k+1)\pi^{2k}} x^{2k+1} \right) dx$
= $\frac{x^2}{2} \log x - \frac{3}{4} x^2 - \sum_{k=1}^\infty \frac{\zeta(2k)}{\pi^{2k} k (2k+1)(2k+2)} x^{2k+2},$ (2.14)

のように実行できる。一方, 右辺の積分は

RHS of (2.13) =
$$\int_0^x \int_0^x \left(-\sum_{k=1}^\infty \frac{\cos 2kx}{k} - \log 2 \right) dx^2$$

= $\int_0^x \left(-\sum_{k=1}^\infty \frac{\sin 2kx}{2k^2} - x \log 2 \right) dx$
= $\sum_{k=1}^\infty \frac{\cos 2kx - 1}{4k^3} - \frac{x^2}{2} \log 2$, (2.15)

のように計算される。当然、これらの積分は等しいはずなので等号で結ぶと、

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos 2kx - 1}{4k^3} = \frac{x^2}{2} \log 2x - \frac{3}{4}x^2 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\zeta(2k)}{\pi^{2k}k(2k+1)(2k+2)} x^{2k+2},\tag{2.16}$$

なる関係が得られる。面白いことに, (2.16) の左辺に $x=\pi/2$ を代入すると, $\zeta(3)$ が現れる。具体的にて計算してみると,

LHS of (2.16) =
$$-\frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{3^3} + \frac{1}{5^3} + \frac{1}{7^3} + \cdots\right) = -\frac{7}{16}\zeta(3),$$
 (2.17)

となる。この $x = \pi/2$ を (2.16) の右辺にも代入すると,

$$\zeta(3) = \frac{2\pi^2}{7} \left(-\log \pi + \frac{3}{2} + 4\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\zeta(2k)}{2k(2k+1)(2k+2)2^{2k}} \right),\tag{2.18}$$

が得られる。この結果は、面白いことに、 $\zeta(3)$ が偶数ゼータ関数 $\zeta(2k)$ の級数で表現されている。本章で既に説明したように、偶数ゼータ関数はベルヌーイ数を用いた厳密な関係式がわかっているので、級数 (2.18) を適用すれば $\zeta(3)$ を計算することができる。さらに面

白いことに、(2.16) をさらに 2 回積分し、 $x=\pi/2$ を代入すれば $\zeta(5)$ が現れる。結果だけを書くと、

$$\zeta(5) = \frac{2}{31} \left[\frac{\pi^4}{3} \left(\log \pi - \frac{25}{12} \right) + 4\pi^2 \zeta(3) - 16 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\pi^4 \zeta(2k)}{2k (2k+1)(2k+2)(2k+3)(2k+4) 2^{2k}} \right],$$

となる。このように (2.12) に対して積分を繰り返していくと, 奇数ゼータ関数が順次, 級数展開によって表現されていく。

2.4 定義域の拡張

これまでの議論では、ゼータ関数 $\zeta(s)$ は s>1 に対して定義された関数である。本節では、ゼータ関数の定義域を複素数全体に拡張し、その関数の性質を調べる。関数の定義域を拡張するには、関数論における解析接続という手法を用いる。まず、解析接続を説明し、ゼータ関数を解析接続するための準備した後に、ゼータ関数を解析接続する。

2.4.1 ゼータ関数の積分表示

ゼータ関数の解析接続のための出発点は、ガンマ関数 $\Gamma(s)$ である。既に紹介したように、ガンマ関数は変数が整数であるとき、 $\Gamma(n)=(n-1)!$ という性質がある。言い換えれば、整数しか対象にしなかった階乗という演算を実数全体、さらには、複素数全体に拡張した関数がガンマ関数である。ガンマ関数は、

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty t^{s-1} e^{-t} dt, \qquad (2.19)$$

のような積分によって与えられる。この積分を評価してみると, $\Gamma(1)=1$, $\Gamma(s+1)=s\Gamma(s)$ なる関係が導かれ, その結果, $\Gamma(n)=(n-1)!$ なる性質が結論づけられる。実数変数に対するガンマ関数は前章で示した図 1.2 のような曲線を描く関数である。この関数はゼロ以下の整数を極とすることが特徴である。

ガンマ関数の積分表示 (2.19) は, t = nx とおき, 新たな積分変数 x を用いた積分表示で表すと,

$$\Gamma(s) = n^s \int_0^\infty x^{s-1} e^{-nx} \mathrm{d}x,$$

のように書き換えられる。この積分表示を,

$$\frac{1}{n^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty x^{s-1} e^{-nx} \mathrm{d}x,$$

のように書き換え, n を整数と仮定し, 1 から無限大まで総和をとると,

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \sum_{n=1}^\infty x^{s-1} e^{-nx} dx = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx, \tag{2.20}$$

となる。右辺の被積分関数が $x^{s-2}\cdot x/(e^x-1)$ のようにベルヌーイ数の指数型母関数を含む。積分 (2.20) は, $\operatorname{Re} s>1$ の条件で収束する。その収束性を証明してみよう。その証明のために, $g(s)\equiv \Gamma(s)\,\zeta(s)$ と定義する。正の実数 x と任意の複素数 s が与えられたとき, $|x^s|=|x^{\operatorname{Re} s}e^{i\operatorname{Im} s\cdot \log x}|=x^{\operatorname{Re} s}$ であることに注意し,g(s) を評価するため,

$$g(s) = \int_0^1 \frac{u^{x-1}}{e^x - 1} dx + \int_1^\infty \frac{x^{z-1}}{e^x - 1} dx,$$
 (2.21)

のように書いてみよう。この式の右辺の第 2 項はどのような s に対しても有限の値に収束する。なぜなら, $x \ge 1$ のとき $e^x - 1 > e^x/2$ であることから,

$$\left| \int_1^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} \mathrm{d}x \right| < 2 \int_1^\infty x^{\operatorname{Re} s - 1} e^{-x} \mathrm{d}x,$$

が成立するからである。ここで、 $\operatorname{Re} s \leq 1$ であれば $x^{\operatorname{Re} s - 1} \leq 1$ であるので、

$$\left| \int_1^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx \right| < 2 \int_1^\infty e^{-x} dx = 2, \qquad (\operatorname{Re} s \le 1)$$

となる。一方、Res > 1 であれば、

$$\left| \int_{1}^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^{x} - 1} dx \right| < 2 \int_{0}^{\infty} x^{\operatorname{Re} s - 1} e^{-x} dx$$

$$\leq 2 \int_{0}^{\infty} x^{\lceil \operatorname{Re} s \rceil - 1} e^{-x} dx = (\lceil \operatorname{Re} s \rceil - 1)! \qquad (\operatorname{Re} s > 1)$$

となる。ここで, $\lceil x \rceil$ は x 以上の整数の最小値である。よって, s とは無関係に (2.21) の右辺の第 2 項が有限の値であることが示された。

第1項については、 $x < e^x - 1 < (e - 1)x$ であることに注意すると、

$$\frac{1}{e-1} \int_0^1 x^{\operatorname{Re} s - 2} dx < \int_0^1 \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx < \int_0^1 x^{\operatorname{Re} s - 2} dx,$$

なる関係が導かれる。左辺と右辺の積分を実行すると、この関係は

$$\frac{1}{(e-1)(\operatorname{Re} s - 1)} < \int_0^1 \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx < \frac{1}{\operatorname{Re} s - 1},$$

のように計算される。これより、(2.21) の第 1 項は $\mathrm{Re}\,s>1$ のとき有限の値に収束することが示される。したがって、積分 g(s) も $\mathrm{Re}\,s>1$ のとき有限の値に収束する。

2.4.2 部分積分による解析接続

前項で示したように、ゼータ関数 $\zeta(s)$ の積分表示は $\mathrm{Re}\,s>1$ のときに収束する。この 収束域を広げ、ゼータ関数の定義域を拡大するために解析接続を適用しよう。タイトルに 示すように、本項では部分積分を適用しながらゼータ関数を解析接続を進めていく。 関数 論のテキストには、この議論が非常に簡単に書かれているのだが、解析接続の準備段階と してベルヌーイ数の指数型母関数 $f(x)=x/(e^x-1)$ の高階導関数と x べき乗の積、すな わち、 $x^s f^{(n)}(x)$ の積分の収束性を調べる必要がある。その結果を利用して、ゼータ関数の 積分表示に部分積分を適用しながら解析接続を進めるのである。

準備段階 上に書いたように、解析接続の準備段階として、 $x^s f^{(n)}(x)$ を積分した場合の収束性を調べる。積分範囲は $[0,\infty)$ とするのだが、

$$\int_0^\infty x^s f^{(n)}(x) \, \mathrm{d}x = \int_0^1 x^s f^{(n)}(x) \, \mathrm{d}x + \int_1^\infty x^s f^{(n)}(x) \, \mathrm{d}x, \tag{2.22}$$

のように、2 項に分けて書いておく。この積分が、n=0 の場合に $\operatorname{Re} s>1$ の条件で収束することは前項で示されている。指数型母関数 f(x) を x について微分した結果:

$$f'(x) = \frac{e^x - 1 - xe^x}{(e^x - 1)^2},$$

を用いて, n=1 における積分 (2.22) の第 2 項を評価してみよう。前項でも利用した $x \ge 1$ における不等式 $1/(e^x-1) < 2e^{-x}$ に注意すると,

$$|f'(x)| < 4(e^{-x} + e^{-2x} + xe^{-x}), \quad (x \ge 1)$$

が成立する。これを (2.22) の第2項に代入すると、

$$\left| \int_1^\infty x^s f'(x) \, \mathrm{d}x \right| < 4 \left(\left| \int_1^\infty x^s e^{-x} \, \mathrm{d}x \right| + \left| \int_1^\infty x^s e^{-2x} \, \mathrm{d}x \right| + \left| \int_1^\infty x^{s+1} e^{-x} \, \mathrm{d}x \right| \right),$$

となる。前項での収束性の評価によると、この式の右辺の第 1 項から第 3 項はすべて、任意の複素数 s に対して収束するので、この積分自体も任意の複素数 s に対して収束する。もう一方、(2.22)の第 1 項を評価するにはベルヌーイ数の指数型母関数のテイラー展開:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} x^k,$$

を利用するのが便利である。このテイラー展開をxについて微分すると、導関数:

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_{k+1}}{k!} x^k,$$

が得られる。ここで、ベルヌーイ数の漸近形:

$$B_{2m} = \frac{2(2m)!}{(2\pi)^{2m}}, \quad (m \to \infty)$$

に注意すると, f(x) と f'(x) はともに $|x| < 2\pi$ において収束することがわかる。すなわち, $0 \le x \le 1$ の範囲において f'(x) を上記のテイラー展開で代用してもよい。よって, 積分の第1項は

$$\int_0^1 x^s f'(x) \, \mathrm{d}x = \int_0^1 \sum_{k=0}^\infty \frac{B_{k+1}}{k!} x^{k+z} \, \mathrm{d}x = \left[\sum_{k=0}^\infty \frac{1}{k+z+1} \frac{B_{k+1}}{k!} x^{k+z+1} \right]_0^1$$

のように書くことができる。この右辺が収束する条件は、 $\operatorname{Re} z > -1$ であるので、結局、n=1 の場合に積分が収束するのは $\operatorname{Re} z > -1$ が条件である。

続いて, n=2,3,... に対して (2.22) の収束性を評価したいのであるが, これ以降, 具体的に $f^{(n)}(x)$ を書き下していっても収束性の評価は困難である。その代わりに, f(x) の導関数に対して成立する漸化式:

$$e^x \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f^{(k)}(x) - f^{(n)}(x) = 0, \quad (n = 2, 3, ...)$$
 (2.23)

を利用するとよい。この漸化式は, $(e^x-1) f(x) = x$ を微分していくことによって証明できる。まず, 第 1 回目の微分で

$$e^{x} (f(x) + f'(x)) - f'(x) = 1,$$

が得られ,第2回目の微分で

$$e^{x} (f(x) + 2f'(x) + f''(x)) - f''(x) = 0,$$

が得られる。この関係式は、漸化式 (2.23) を満足する。そこで、任意の k に対して (2.23) が成立すると仮定し、その漸化式 (2.23) を微分してみる。すると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^x \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f^{(k)}(x) - f^{(n)}(x) \right)
= e^x \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left(f^{(k)}(x) + f^{(k+1)}(x) \right) - f^{(n+1)}(x)
= e^x f(x) + e^x \sum_{k=1}^n \left[\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1} \right] f^{(k)}(x) + e^x f^{(n+1)}(x) - f^{(m+1)}(x)
= e^x f(x) + e^x \sum_{k=1}^n \binom{n+1}{k} f^{(k)}(x) + e^x f^{(n+1)}(x) - f^{(m+1)}(x)
= e^x \sum_{k=1}^n \binom{n+1}{k} f^{(k)}(x) - f^{(m+1)}(x),$$

となり、k+1 に対しても漸化式 (2.23) が成立する。したがって、漸化式 (2.23) の正当性 が帰納的に証明された。よって、n 階の導関数は、

$$f^{(n)}(x) = \frac{e^x}{e^x - 1} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} f^{(k)}(x),$$

のように書くことができる。この結果に対して、積分(2.22)の第2項を書くと、

$$\left| \int_{1}^{\infty} x^{s} f^{(n)}(x) \, dx \right| \leq \frac{e^{x}}{e^{x} - 1} \sum_{k=0}^{n-1} {n \choose k} \left| \int_{1}^{\infty} x^{s} f^{(k)}(x) \, dx \right|$$
$$< 2 \sum_{k=0}^{n-1} {n \choose k} \left| \int_{1}^{\infty} x^{s} f^{(k)}(x) \, dx \right|,$$

のような不等式で表現できる。例えば、n=2の場合にこの不等式を展開すると、

$$\left| \int_{1}^{\infty} x^{s} f''(x) \, \mathrm{d}x \right| < 2 \left(\left| \int_{1}^{\infty} x^{s} f(x) \, \mathrm{d}x \right| + \left| \int_{1}^{\infty} x^{s} f'(x) \, \mathrm{d}x \right| \right),$$

のように書かれる。既に示したように n=0,1 のとき,任意の複素数 s に対して積分 (2.22) が収束することがわかっているので,その事実をこの不等号に適用すると,n=2 に対しても積分 (2.22) は任意の z に対して収束することになる。この操作を繰り返していくと,任意の自然数 n について,積分 (2.22) の第 2 項は任意複素数の s に対して収束することが結論できる。

積分 (2.22) の第 1 項については、 先ほどと同様にテイラー展開を使ってみよう。 その場合、 (2.22) の第 1 項は

$$\int_0^1 x^s f^{(n)}(x) \, \mathrm{d}x = \int_0^1 \sum_{k=0}^\infty \frac{B_{k+n}}{k!} x^{k+s} = \sum_{k=0}^\infty \left[\frac{1}{k+s+1} \frac{B_{k+n}}{k!} x^{k+s+1} \right]_0^1,$$

のようになる。念のため、この級数の収束半径を調べてみよう。級数の収束半径は、各項の大きさの変化を調べてみればよい。各項に含まれているベルヌーイ数は第 2 項以降の奇数項がすべてゼロであるので、k+n=2m (つまり、偶数) という条件のもとで、テイラー級数の第 k 項と第 k+2 項を比べてみよう。

第
$$k$$
 項 = $\frac{2(2m)!}{(k+s+1)(2\pi)^{2m} k!} x^{k+s+1}$,
第 $k+2$ 項 = $\frac{2(2m+2)!}{(k+s+3)(2\pi)^{2m+2} (k+2)!} x^{k+s+3}$.

これらの項の比を計算すると,

$$\frac{\mathfrak{B}\,k+2\,\mathfrak{I}}{\mathfrak{B}\,k\,\mathfrak{I}} = \frac{(k+s+3)(k+n+1)(k+n+2)}{(k+s+1)(k+1)(k+2)} \frac{x^2}{(2\pi)^2} \simeq \frac{x^2}{(2\pi)^2}, \quad (k\gg n)$$

となるのだが、級数が収束する条件はこの比率が1より小さくなることなので、 $|x| < 2\pi$ がこの級数の収束半径である。積分(2.22)の第1項の積分範囲[0,1]は、この級数の収束半径

の内側なので、級数展開による積分の評価が可能である。 また, $B_{2m+1}=0$ (m=1,2,...) であることに注意すると、(2.22) の第 1 項が収束する条件は、

Re
$$s > -1$$
, $(n = 0, 1, 2, 4, 6, ...)$
Re $s > -2$, $(n = 3, 5, 7, ...)$

となる。既に評価したように (2.22) の第 2 項は s に関わらず収束するので、この条件は積分 (2.22) 全体が収束する条件である。

部分積分 準備が整ったのでゼータ関数の積分表示に部分積分を適用しながら解析接続をしていこう。前節で、ゼータ関数が

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx, \qquad (2.24)$$

なる積分表示されることを学んだ。この積分表示に対して、ベルヌーイ数の指数型母関数 を f(x) と書き、 $g(s) \equiv \Gamma(s) \zeta(s)$ を評価してみよう。その積分 g(z) は、

$$g(s) = \int_0^\infty x^{s-2} f(x) \, \mathrm{d}x, \tag{2.25}$$

であるが、準備段階で得た知識により、g(s) は $\operatorname{Re} s>1$ のときに収束する。この積分に部分積分を適用すると、

$$g(s) = \left[\frac{x^{s-1}}{s-1} f(x) \right]_0^{\infty} - \frac{1}{s-1} \int_0^{\infty} x^{s-1} f'(x) \, \mathrm{d}x, \tag{2.26}$$

が得られる。ここで、 $x\to\infty$ の極限において $f(x)\simeq xe^{-x}$ であり、 $f(0)=B_0$ であることに注意すれば、この結果の第1項は $\operatorname{Re} z>1$ のときにゼロとなり、 $\operatorname{Re} s\le 1$ の条件で発散することがわかる。一方、第2項の積分は準備段階での知識により、 $\operatorname{Re} s>0$ の条件で収束する。つまり、積分 (2.25) の収束条件が $\operatorname{Re} s>1$ であったのは、(2.26) の第1項があるためである。そこで、第1項を省略すれば g(s) の収束条件を $\operatorname{Re} s>0$ まで拡張することができる。第1項を省略したとしても、 $\operatorname{Re} s>1$ の条件では、もともと、第1項がゼロであったので (2.26) は (2.25) と等しいはずである。言い換えると、(2.26) の第1項を省略することによって、 $\operatorname{Re} s>1$ であった g(s) の定義域が $\operatorname{Re} s>0$ となるように解析接続されたことを意味する。ただし、第2項は分母に s-1 が含まれるため、g(s) は s=1 を 1 位の極とすることがわかる。そのときの留数は、

Res_{s=1}
$$g(s) = \lim_{s \to 1} (s - 1) g(s)$$

= $-\int_0^\infty f'(x) dx = f(0) = B_0$,

のように計算できる。被積分関数がベルヌーイ数の指数型母関数であるので, g(s) の留数にベルヌーイ数が姿を見せている。

続いて、(2.26) に部分積分を適用すると、さらに g(s) の定義式が広がることが予想できるだろう。実際に適用してみると、

$$g(s) = -\left[\frac{x^{s-1}}{s(s-1)}f'(x)\right]_0^\infty + \frac{1}{s(s-1)}\int_0^\infty x^s f''(x) \,\mathrm{d}x,\tag{2.27}$$

が得られる。この場合についても, $x\to\infty$ の極限において $f'(x)\simeq -xe^{-x}$ であり, $f'(0)=B_1$ であるので, (2.27) の第 1 項は $\operatorname{Re} z>0$ の条件でゼロとなる。一方, (2.27) の第 2 項に含まれる積分は, 準備段階での知識より, $\operatorname{Re} s>-1$ の条件で収束する。前段落と同様に, (2.27) の第 1 項を省略した量を $\operatorname{Re} s>-1$ への解析接続としよう。すると, 第 2 項の積分が $\operatorname{Re} s>-1$ で正則であるので, g(s) は s=1,0 を 1 位の極とする関数である。ここで, s=0 における留数を計算すると,

Res_{s=0}
$$g(s) = \lim_{s \to 0} s g(s)$$

= $-\int_0^\infty f''(x) dx = -f'(0) = -B_1$,

となる。準備段階で得た知識に注意して同様に部分積分を適用していくと、積分 g(s) の定義域を拡大することができる。部分積分をn 回繰り返した結果を書くと、

$$g(s) = (-1)^n \prod_{k=1}^n \frac{1}{s+k-2} \int_0^\infty x^{s+n-2} f^{(n)}(x) \, \mathrm{d}x, \quad (\text{Re } s > 1-n)$$
 (2.28)

となる。この操作を無限に繰り返せば g(s) の定義域を複素数全体に拡張することができる。その結果, g(s) は $s=1,0,-1,-2,\dots$ を 1 位の極とする関数になる。上と同様の方法で s=-n における留数を計算すると,

Res
$$g(s) = \frac{B_{n+1}}{(n+1)!},$$

となる。積分 g(s) は、上に述べた 1 位の極以外の複素数全体で正則な関数となる。

ワイエルストラスの無限乗積の公式によると、 $1/\Gamma(s)$ は $s=0,-1,-2,\ldots$ を 1 位の零点とする関数であるので、 $\zeta(s)=g(s)/\Gamma(s)$ であるゼータ関数は、 $s=-1,-2,-3,\ldots$ が除去可能な特異点である。したがって、ゼータ関数 $\zeta(s)$ は、z=0 を 1 位の極とし、それ以外の複素数全体で正則な関数であることが結論できる。それでは、それらの除去可能な特異点におけるゼータ関数の値を求めてみよう。そのためにはガンマ関数の留数を計算しておくとよい。ガンマ関数の留数の評価にはワイエルストラスの無限乗積の公式を使用することもできるが、

$$\Gamma(s) = \lim_{m \to \infty} \frac{m^s m!}{s(s+1)\cdots(s+m)},$$

なるオイラーの無限乗積の公式の方が取り扱いやすい。この公式を用いて s=-n における $\Gamma(s)$ の留数を計算すると,

$$\operatorname{Res}_{s=-n} \Gamma(s) = \lim_{s \to -n} (s+n)\Gamma(s)$$

$$= \lim_{s \to -n} \lim_{m \to \infty} \frac{(s+n) \, m^s m!}{s \, (s+1) \cdots (s+n-1)(s+n)(s+n+1) \cdots (s+m)}$$

$$= \lim_{m \to \infty} \frac{(-1)^n m^{-n} m!}{n! \, (m-n)!}$$

$$= \frac{(-1)^n}{n!} \lim_{m \to \infty} \left(1 + \frac{1}{m}\right) \left(1 + \frac{2}{m}\right) \cdots \left(1 + \frac{n-1}{m}\right)$$

$$= \frac{(-1)^n}{n!},$$

が得られる。いや、実は $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$ という性質に注目すれば、オイラーの無限乗積の公式を知らなくても留数を得ることができる。具体的に書くと、

$$\operatorname{Res}_{s=-n} \Gamma(s) = \lim_{s \to -n} (s+n) \Gamma(s)
= \lim_{s \to -n} (s+n) \Gamma(s+n+1-(n+1))
= \lim_{s \to 1} (s-1) \Gamma(s-(n+1))
= \lim_{s \to 1} \frac{(s-1) \Gamma(s)}{(s-1)(s-2) \cdots (s-n-1)} = \frac{(-1)^n}{n!}$$

となる。ところで, g(s) と $\Gamma(s)$ の双方について s=-n が 1 位の極であるので,

$$\zeta(-n) = \lim_{z \to \infty} \frac{g(s)}{\Gamma(s)} = \frac{\underset{s=-n}{\text{Res }} g(s)}{\underset{s=-n}{\text{Res }} \Gamma(s)} = \frac{(-1)^n B_{n+1}}{n+1}, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

が得られる。さらに、第3項以降のベルヌーイ数の奇数項がゼロであることに注意すると、

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2}, \quad \zeta(-2m+1) = -\frac{B_{2m}}{2m}, \quad \zeta(-2m) = 0, \quad (m = 1, 2, 3, \ldots)$$

と書くことができる。または、単純に

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2}, \quad \zeta(-n) = -\frac{B_{n+1}}{n+1}, \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

と書いてもよいだろう。この式に示すように、負の偶数のゼータ関数は、必ず、ゼロになる。そのため、負の偶数はゼータ関数の自明な零点と呼ばれる。一方、 $\Gamma(s)$ が s=1 で正則なため、積分 g(s) の 1 位の極だった s=1 は $\zeta(s)$ の 1 位の極として引き継がれる。その極におけるゼータ関数の留数は、

$$\operatorname{Res}_{s=1} \zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(1)} \operatorname{Res}_{s=1} g(z) = 1,$$

となる。しかも, s=1 はゼータ関数の唯一の極である。

2.4.3 複素数での積分表示

既に導出したように、ゼータ関数は

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{z^{s-1}}{e^z - 1} dz,$$

のような積分表示ができる。しかし、この積分表示は ${\rm Re}\,s>1$ の条件で収束するだけである。前節では、この積分表示に対して部分積分を繰り返すことによって定義域を拡張した。本節では積分表示を複素積分に拡張することによって解析接続を試みる。

積分路として図 2.3 に示す C を設定する。この積分路は,実軸上を $+\infty$ からゼロに向かう C_+ ,原点の周りを半径 r で 1 回転する C_r と,実軸上のゼロから $+\infty$ に向かう C_- によって構成されている。もう少し正確に言うと,積分路 C_+ は微小量の虚部を含み第 I 象限内を動き,積分路 C_- は微小量の虚部を含み第 I 象限内を動く。まず,Res>1 の条件を仮定しよう。さらに, $r\to 0$ とすると,経路 C_r にそった積分は,

$$\int_{C_r} \frac{z^{s-1}}{e^z - 1} dz = \lim_{r \to 0} ir^s \int_0^{2\pi} \frac{e^{is\theta}}{e^{re^{i\theta}} - 1} d\theta = \lim_{r \to 0} ir^{s-1} \int_0^{2\pi} e^{i(s-1)\theta} dz$$
$$= \lim_{r \to 0} \frac{2ir^{s-1}e^{\pi i(s-1)}\sin\pi(s-1)}{s-1} = 0, \quad (\text{Re } s > 1)$$

となるので、ゼロになることがわかる。経路 C_+ に沿った積分は

$$\frac{1}{\Gamma(s)} \int_{C_{+}} \frac{x^{s-1}}{e^{z} - 1} dz = -\zeta(s), \quad (\text{Re } s > 1)$$

である。さらに、経路 C_- に沿った積分については、積分変数 z が原点の周りを角度 2π だけ回った後であることを考えると、

$$\frac{1}{\Gamma(s)} \int_{C_{-}} \frac{z^{s-1}}{e^{z} - 1} dz = \int_{0}^{\infty} \frac{(ze^{2\pi i})^{s-1}}{e^{z} - 1} dz$$

$$= e^{2\pi i(s-1)} \int_{0}^{\infty} \frac{z^{s-1}}{e^{z} - 1} dz = e^{2\pi i(s-1)} \zeta(s), \quad (\text{Re } s > 1)$$

と書くことができる。したがって, $\zeta(s)$ は,

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \frac{1}{e^{2\pi i(s-1)} - 1} \int_C \frac{z^{s-1}}{e^z - 1} dz$$

$$= \frac{e^{\pi i(s-1)}}{2i\Gamma(s)\sin\pi(s-1)} \int_C \frac{z^{s-1}}{e^z - 1} dz$$

$$= -\frac{1}{2i\Gamma(s)\sin\pi s} \int_C \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz = -\frac{\Gamma(1-s)}{2\pi i} \int_C \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz, \qquad (2.29)$$

のように表現できる。この数式変形において, $\Gamma(s)\Gamma(1-s)=\pi/\sin\pi s$ なる関係を利用した。この関係式は $\mathrm{Re}\,s>1$ の条件のもとで計算したのだが, この関係が $\mathrm{Re}\,s\leq1$ でも成立すると仮定しよう。その仮定がゼータ関数の解析接続となる。

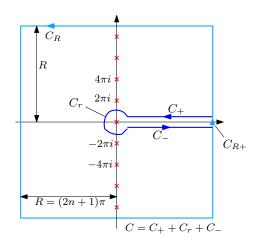


図 2.3: ゼータ関数を計算する積分路

積分表示 (2.29) が $\mathrm{Re}\,s \leq 1$ でも成立するとの仮定が解析接続になっていることを示そう。ゼータ関数の変数が負の整数 z=-n であるなら,積分路を図 2.3 に示すような $C+C_{R+}$ に設定することができる。追加した積分路 C_{R+} は無限遠の正の実軸を第 IV 象限から第 IV 象限にまたぐ微小経路である。この微小経路は長さが限りなくゼロに近いため,この微小経路に沿った積分はゼロとなる。そのため,

$$\zeta(s) = \frac{\Gamma(1-s)}{2\pi i} \int_C \frac{(-z)^{-n-1}}{e^z - 1} dz = \frac{\Gamma(1-s)}{2\pi i} \int_{C+C_{r+}} \frac{(-z)^{-n-1}}{e^z - 1} dz,$$

が成立するため、経路 $C+C_r$ に沿った周回積分によってゼータ関数を評価できる。補足しておくと、この経路が周回経路として成り立つのはゼータ関数の変数が整数の場合に限られる。なぜなら、被積分関数の分子 $(-z)^{s-1}$ は、z が原点の周りを 1 回転すると $(-z)^{s-1}e^{2\pi i(s-1)}$ となり、これが回転前と同一の値にならなければ経路 C_{R+} をひと続きの経路とはみなすことができないからである。その条件はs が整数の場合に限って満たされる。ここで考えているのは、s=-n であるので経路 $C+C_{R+}$ は周回経路として成立しているので、この経路の積分に留数定理を使用できる。被積分関数が、

$$\frac{(-z)^{-n-1}}{e^z - 1} = (-1)^{n+1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} z^{k-n-2},$$

のようにベルヌーイ数を用いて展開でき、留数がローラン展開したときの -1 次の係数であることから、極 z=0 における被積分関数の留数は、

$$\operatorname{Res}_{z=0} \frac{(-z)^{-n-1}}{e^z - 1} = \frac{(-1)^{n+1} B_{n+1}}{(n+1)!},$$

であることがわかる。さらに, $\Gamma(1+n)=n!$ であることに注意し, 経路 $C+C_{R+}$ の周回積分に留数定理を適用すると,

$$\zeta(-n) = \frac{(-1)^n B_{n+1}}{n+1},$$

が導かれる。ただし、 B_3 以降のベルヌーイ数の奇数項がゼロであることに注意すると、

$$\zeta(0) = -\frac{1}{2}, \quad \zeta(-2m+1) = -\frac{B_{2m}}{2m}, \quad \zeta(-2m) = 0, \quad (m = 1, 2, 3, \ldots)$$

なる結果を得る。この結果に示すとおり、負の偶数のゼータ関数は、必ず、ゼロとなる。 ゼータ関数の自明な零点に関するこのような結果は前節で解析接続した際にも得られた。

それでは、整数以外の $\operatorname{Re} s < 1$ の場合における経路 C での積分の評価について述べる。上で説明したように、s が整数でなければ経路 $C + C_{R+}$ が周回経路とならないため、任意の s に対して、経路 $C + C_{R+}$ を積分経路とすることはできない。そこで、図 2.3 に示す左回りの積分路 C_R を考えよう。この積分路は、複素平面における 4 点: R+iR, -R+iR, -R-iR, R-iR を頂点とする正方形であり、しかも、 $R=(2n+1)\pi$ であるとする。その積分路が与えられ、 $\operatorname{Re} s < 1$ の条件では、 $R \to \infty$ の極限で、 C_R に沿った積分はゼロとなる。それは次のようにして証明できる。

Proof まず, $z = x \pm i(2n+1)\pi$ とし, $0 < \alpha < 1$ を用いると,

$$\left| \int_{z=x\pm iR} \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz \right| < \int_{-R}^{R} \frac{z^{\operatorname{Re} s - 1}}{e^x + 1} dx < \int_{-R}^{R} z^{\operatorname{Re} s - 1} dx < \int_{-R}^{R} z^{\operatorname{Re} s - 1} dx < \int_{-R}^{R} \frac{1}{R^{1 - \operatorname{Re} s}} dz = \frac{2}{R^{-\operatorname{Re} s}},$$

となるので、 $\operatorname{Re} s < 0$ のとき、この積分はゼロになる。つまり、積分路 C_R のうち、実軸と平行な積分路における積分は $\operatorname{Re} s < 0$ の条件でゼロになる。次に z = R + iy とすると、

$$\left| \int_{z=R+iy} \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz \right| < \int_{-R}^{R} \frac{(\sqrt{2}R)^{\text{Re } s - 1}}{e^R - 1} dy,$$

となる。この積分は, $R\to\infty$ の極限では s と無関係にゼロになるので, 複素平面の第 I 象限と第 IV 象限を通る虚軸に平行な積分路での積分は必ずゼロになる。もう一方, z=-R+iy における積分は,

$$\left| \int_{z=R-iy} \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz \right| < \int_{-R}^{R} \frac{(\sqrt{2}R)^{\operatorname{Re} s - 1}}{e^{-R}e^{iy} - 1} dy,$$

となるので, $R \to \infty$ の極限では, $\operatorname{Re} s < 1$ の場合にゼロとなる。したがって, 積分路 C_R における積分は, $\operatorname{Re} s < 1$ の場合にゼロとなる。¶

積分路 C_R での積分が $\operatorname{Re} s < 1$ の場合にゼロになる事実より、積分路 C における積分は、

$$\int_C \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz = -\int_{C_D + C^{-1}} \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} dz, \quad (\operatorname{Re} s < 1)$$

と書くことができる。ここで, C^{-1} は経路 C を逆方向にたどる経路を意味する。ところで, 被積分関数は $z=2\pi in$ $(n=0,\pm 1,\pm 2,\ldots)$ で 1 位の極をもつ。その極における留数を計算すると,

$$\operatorname{Res}_{z=2\pi in} \frac{(-z)^{s-1}}{e^z - 1} = \lim_{z \to 2\pi in} \frac{(z - 2\pi in)(-z)^{s-1}}{e^z - 1}$$
$$= \lim_{z \to 0} \frac{z(-z - 2\pi in)^{s-1}}{e^z - 1} = (2\pi)^{s-1} n^{s-1} e^{-\pi i(s-1)/2},$$

となる。積分経路 $C_R + C^{-1}$ が z = 0 以外の極をすべて取り囲んでいることに注目すれば、留数定理によって、

$$\int_{C} \frac{(-z)^{s-1}}{e^{z} - 1} dz = -2\pi i \sum_{n = -\infty}^{\infty} (2\pi)^{s-1} n^{s-1} e^{-\pi i (s-1)/2}$$

$$= -2\pi i \cdot (2\pi)^{s-1} \sum_{n = 1}^{\infty} n^{s-1} e^{-\pi i (s-1)/2} \left(1 + e^{\pi i (s-1)} \right)$$

$$= -2\pi i \cdot 2 (2\pi)^{s-1} \cos \frac{\pi (s-1)}{2} \sum_{n = 1}^{\infty} \frac{1}{n^{1-s}}$$

$$= -2\pi i \cdot 2 (2\pi)^{s-1} \zeta (1-s) \sin \frac{\pi s}{2},$$

が得られる。この数式変形の第 1 行目に含まれる Σ' は n=0 を取り除いた総和を意味する。得られた結果を複素平面におけるゼータ関数の積分表示に代入すれば、

$$\zeta(s) = 2^s \pi^{s-1} \Gamma(1-s) \zeta(1-s) \sin \frac{\pi s}{2}, \quad (\text{Re } s < 1)$$
 (2.30)

なる関数等式が得られる。この関数等式は、経路 C_R における積分がゼロであること、すなわち、 $\operatorname{Re} s < 1$ の条件において導出された関係式であるので、(2.30) にはその条件を書いておいた。この条件を考慮すると、(2.30) は必ず正則であることがわかる。ここで、s = -2m $(m = 1, 2, \ldots)$ とおいて負の偶数のゼータ関数を求めるならば、 $\sin(-\pi m) = 0$ であり、 $\Gamma(1+2m)$ も $\zeta(1+2m)$ も正則であるので、 $\zeta(-2m) = 0$ であることが導かれる。これは、ゼータ関数の自明な零点を与える結果であり、前節、および、本節の負の整数に限定した場合の解析においても同一の性質が得られている。

次に、s=-2m+1 とおいて負の奇数のゼータ関数を求めてみよう。その場合、 $\sin(-m+1/2)\pi=(-1)^m$ 、 $\Gamma(2m)=(2m-1)!$ であり、さらに、

$$\zeta(2m) = \frac{(-1)^{m-1}s^{2m-1}\pi^{2m}B_{2m}}{(2m)!},$$

であるので, $\zeta(-2m+1) = -B_{2m}/2m$ が得られる。これも前節で導いた結果と同じである。つまり, 図 2.3 に示す経路 C のように積分路を選び, 積分 (2.29) によってゼータ関数を定義すれば, ゼータ関数の定義域を複素数全体に拡張することができる。また, 積分路

C は必ずしも図 2.3 のように設定する必要はなく、無限遠の実軸上から開始し、正の実軸と積分路自身を交わることなく、また、極の上を通過することなく、z=0 を左回りに周回し、無限遠の正の実軸上に戻る経路であればどのような経路でもよい。

解析接続によって、ゼータ関数の定義域を複素数全体に拡張することができた。実数変数に対してゼータ関数を図 2.4 にグラフ表示しておこう。既に明らかにしたように、ゼータ関数 $\zeta(z)$ は z=1 で発散し、負の偶数をゼロ点とする。 変数が正の無限大に向かって

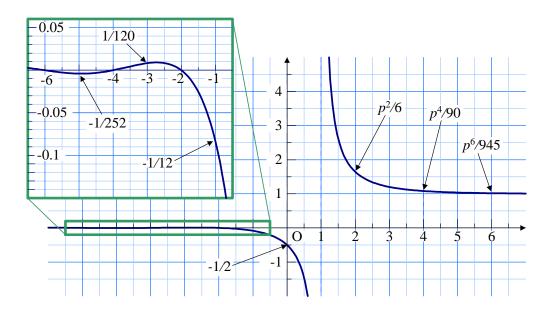


図 2.4: ゼータ関数

増加すると、ゼータ関数は1に近づく。一方、変数が負の値になると、x 軸の上下を振動する。このグラフでは、負の変数に対してゼータ関数はゼロに近い値となっているが、さらに変数が小さくなると、振幅が階乗の速さで増大しながら振動する。変数が負の無限大に向かって減少したときゼータ関数の振幅が増大することは、 $\zeta(-n) = -B_{n+1}/(n+1)$ から容易に理解できるだろう。

2.4.4 負整数のゼータ関数

本節では, 負整数のよるゼータ関数を強引にべき級数と関連付けてみよう。あまりにも強引であるので, 数学的な厳密さを伴っていないことを勘弁してほしい。厳密さを伴っていないが, 多少まじめに議論してみたいので本文に書くことにした。

負整数のゼータ関数は、その関数の元来の定義によると、 $\zeta(-n) \equiv 1 + 2^n + 3^n + 4^n + \cdots$ である。このような収束しない級数でゼータ関数を定義することはナンセンスであるが、本節はこのまま議論を進めていきたい。ここで、負整数のゼータ関数に現れる各項を係数

とするべき級数 (通常母関数):

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} k^n x^{k-1} = 1 + 2^n x + 3^n x^2 + 4^n x^3 + \cdots$$
 (2.31)

を考えてみよう。パラメータnがゼロのとき、この関数は、

$$f_0(x) = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \dots = \frac{1}{1 - x},$$

であることがわかる。これから始めて、一般の $f_n(x)$ を表記してみよう。次の関数 $f_1(x)$ は、

$$f_1(x) = 1 + 2x + 3x^2 + 4x^3 + 5x^4 + \cdots$$

となることから, $f_0(x)$ の 1 階微分, すなわち, $f_1(x) = f'_0(x)$ であることがわかる。または, $f_1(x) = (xf_0(x))'$ と考えても同じ結果が得られる。この後すぐにわかるが, $f_1(x) = (xf_0(x))'$ と考えたほうが都合がよい。したがって,

$$f_1(x) = 1 + 2x + 3x^2 + 4x^3 + \dots = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{x}{1-x} = \frac{1}{(1-x)^2},$$

が得られる。階数を増加させるには, $f_2(x)=(xf_1(x))'$ とすればよい。つまり, 2 階の関数は,

$$f_2(x) = 1 + 2^2x + 3^2x^2 + 4^2x^3 + \dots = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{x}{(1-x)^2} = \frac{1+x}{(1-x)^3},$$

が得られる。ここまでくれば、一般的に階数を 1 階上昇させるには $f_{n+1}(x) = (xf_n(x))'$ と すればよいことは明らかだろう。とりあえず、 3 階の母関数を計算してみると、

$$f_3(x) = 1 + 2^3 x + 3^3 x^2 + 4^3 x^3 + \dots = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{x(1+x)}{(1-x)^3} = \frac{1+4x+x^2}{(1-x)^4},$$

のようになる。これから階数を上昇させるには計算が楽ではないようだ。上で計算した 3 階までの母関数を見ると, n-1 階の母関数は分子が x の n 次式で分母が $(1-x)^{n+2}$ と推測できる。つまり, n-1 階の母関数は,

$$f_{n+1}(x) = \frac{1}{(1-x)^{n+2}} \sum_{k=0}^{n} A_{n,k} x^{k}, \qquad (2.32)$$

と書ける。この式に対して, $f_n(x) = (xf_{n-1}(x))'$ の関係を用いて, 階数を上昇させると,

$$f_{n+2}(x) = \frac{1}{(1-x)^{n+3}} \left[(1-x) \sum_{k=0}^{n} A_{nk} x^k + (n+2) \sum_{k=0}^{n} A_{nk} x^{k+1} \right]$$
$$= \frac{1}{(1-x)^{n+3}} \left\{ A_{n0} + \sum_{k=0}^{n} \left[(k+1) A_{nk} + (n-k+1) A_{n,k-1} \right] x^k + A_{nn} x^{n+1} \right\},$$

のように計算できる。この計算結果における x^k の係数を $A_{n+1,k}$ とすると、その係数は、

$$A_{nk} = (n - k + 1)A_{n-1,k-1} + (k+1)A_{n-1,k}, \quad A_{n0} = A_{nn} = 1,$$
 (2.33)

なる漸化式で与えられる。この式のうち, $A_{n0} = A_{nn} = 1$ は, $f_1(x) = 1/(1-x)^2$ である事実から得られる $A_{00} = 1$ から派生している。上に示した漸化式を用いて 7 階の母関数まで計算すると, 表 2.5 が得られる。この表によると, 展開係数に左右の対称性:

$$A_{nk} = A_{n,n-k}, \tag{2.34}$$

が成立しているように見える。その対称性がn階の展開係数で成立すると仮定して,n+1階の展開係数を計算すると,

$$A_{n+1,(n+1)-k} = (k+1)A_{n,n-k} + (n+1-k+1)A_{n,n-k+1}$$
$$= (k+1)A_{n,k} + ((n+1)-k+1)A_{n,k-1} = A_{n+1,k},$$

となるので, n+1 階の展開係数も対称性が成立する。したがって, 展開係数はいかなる階数においても左右対称である。

$n \backslash k$	0	1	2	3	4	5	6	7
0	1							
1	1	1						
2	1	4	1					
3	1	11	11	1				
4	1	26	66	26	1			
5	1	57	302	302	57	1		
6	1	120	1191	2416	1191	120	1	
7	1	247	4293	15619	15619	4293	247	1

表 2.5: 母関数の展開係数

展開係数 A_{nk} は, k について和をとると (n+1)! に等しい事実がある。この事実は, 次のように数式展開すると証明できる。展開係数 A_{nk} の総和を, 漸化式に注意して変形すると,

$$\sum_{k=0}^{n} A_{nk} = A_{n0} + \sum_{k=1}^{n-1} A_{nk} + A_{nn}$$

$$= A_{n-1,0} + \sum_{k=1}^{n-1} \left[(n-k+1)A_{n-1,k-1} + (k+1)A_{n-1,k} \right] + A_{n-1,n-1}$$

$$= \sum_{k=0}^{n-1} (k+1)A_{n-1,k} + \sum_{k=1}^{n} (n-k+1)A_{n-1,k-1} = (n+1)\sum_{k=0}^{n-1} A_{n-1,k},$$

のように, $A_{n-1,k}$ の総和の n+1 倍になっている。第 0 階の展開係数 A_{0k} の k についての和が 1 であることから、

$$\sum_{k=0}^{n} A_{nk} = (n+1)! \tag{2.35}$$

であることが導かれる。

展開係数 A_{nk} の性質がいくつかわかったので, $f_n(x)$ とゼータ関数の関係を調べよう。単純に考えれば、x=1 とすれば、

$$f_n(1) = 1 + 2^n + 3^n + 4^n + \cdots$$

となるので、ゼータ関数 $\zeta(-n)$ そのものであるが、取り扱うには注意が必要である。なぜなら、

$$f_n(x) = \frac{1}{(1-x)^{n+1}} \sum_{k=0}^{n-1} A_{n-1,k} x^k,$$

であるので、x=1 では $f_n(x)$ が発散するからである。発散を回避するため、代わりに x=-1 を代入しよう。そのときの関数値を $\varphi(-n)\equiv f_n(-1)$ と定義すると、

$$\varphi(-n) = 1 - 2^n + 3^n - 4^n + \dots = \frac{1}{2^{n+1}} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k A_{n-1,k},$$

のように書くことができる。 さらに, $\varphi(-n) = (1-2^{n+1})\zeta(-n)$ であることに注意すれば,

$$\zeta(-n) = \frac{\varphi(-n)}{1 - 2^{n+1}} = \frac{1}{2^{n+1}(1 - 2^{n+1})} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k A_{n-1,k},$$

が導出される。展開係数 A_{nk} が k についての対称性があることから, n が偶数 (n=2m) のとき, この式は確実にゼロになるので, $\zeta(-2m)=0$ となる。これは, 前に導出した結果 と合致している。さらに, 表 2.5 を上の式に適用すると,

$$\zeta(-1) = -\frac{1}{12}, \quad \zeta(-3) = \frac{1}{120}, \quad \zeta(-5) = -\frac{1}{252},$$

$$\zeta(-7) = \frac{1}{240}, \quad \zeta(-9) = -\frac{1}{132},$$

が得られる。これも, 前に解析接続によって導出した結果 $\zeta(-2m+1) = B_{2m}/2m$ と合致する。また, $\zeta(0)$ については,

$$\varphi(0) = f_0(-1) = \frac{1}{1-x} \Big|_{x=-1} = \frac{1}{2},$$

によって $\zeta(0) = -1/2$ を導くことができる。これも解析接続によって導出した結果と合致する。

本節で展開した手法は、オイラーがゼータ関数の拡張に用いた方法である。級数の収束性を無視した方法であるが、解析接続を用いて拡張した結果と一致している。本節で新たに検証したゼータ関数を、元来の定義形式と併せて値を記述すると、

$$1+1+1+1+1+\dots = -1/2,$$

 $1+2+3+4+5+\dots = -1/12,$

$$1 + 2^{2} + 3^{2} + 4^{2} + 5^{2} + \dots = 0,$$

$$1 + 2^{3} + 3^{3} + 4^{3} + 5^{3} + \dots = 1/120,$$

$$1 + 2^{4} + 3^{4} + 4^{4} + 5^{4} + \dots = 0,$$

$$1 + 2^{5} + 3^{5} + 4^{5} + 5^{5} + \dots = -1/252,$$

のようになる。しかし、本当にこれらの左辺と右辺が等号で結ばれると考えてはいけない。 読者が気づいているように、この関係式を得るまでの数式変形に、非常に怪しい操作を実行しているのだ。例えば、 $\zeta(-1)$ の場合、数学的テクニックとして $1+2x+3x^2+4x^3+\cdots=1/(1-x)$ の関係を用いるのはよいとして、x=1 ではなく x=-1 とするのが怪しいのである。確かに、x=1 では左辺の級数が収束しない。かと言って、x=-1 でも収束するわけではない。級数 $1+2x+3x^2+4x^3+\cdots$ は |x|<1 が収束条件である。つまり、この級数が関数として有効な定義域は |x|<1 である。そんな収束条件が厳しい級数を、定義域が複素数全体に渡るように解析接続した関数が 1/(1-x) なのである。その関数は、x=1 を極とする(つまり、x=1 で正則ではない)ため x=1 でなく x=-1 を用いて議論したのである。つまり、数式変形の途中から議論の対象は $1+2x+3x^2+4x^3+\cdots$ でなく、それを解析接続した 1/(1-x) にすり替わっていたのである。したがって、最終的に得られる関係式の左辺は $\zeta(-1)$ であり、決して $1+2+3+4+\cdots$ ではないのである。言い換えると、結果として得られる関係式は、 $\zeta(-1)=-1/12$ であることに間違いないのだが、 $1+2+3+4+\cdots=1/12$ は正しくない。そのような、収束条件を満たさない数式と、それを解析接続した関数とを等号で結ぶことはかなり乱暴なことである。

不思議なことに、物理学の世界で上記の不可思議な数式が成立すると解釈できることがある。その例として、カシミール効果がある。カシミール効果とは、帯電していない2枚の金属板を微小距離隔てて平行配置したときに、それらの間に引力が発生する現象である。その現象は、量子論的なゼロ点エネルギーに起因する。あらゆる可能な組み合わせについてゼロ点エネルギーが総和が $1+2^3+3^3+4^3+\cdots$ のように3乗数の無限和となる。この無限和を $\zeta(-3)=1/120$ で置き換えて金属板間に作用する力を計算すると、実験結果と一致する1。

¹この現象を紹介した文献は多いのだが、ゼータ関数との関係を説明している文献として、黒川信重、"オイラー探検 無限大の滝と 12 連峰、" 丸善、2012、が挙げられる。

第3章 ベッセル関数

ベッセル関数は、物理学や工学で頻繁に使われる関数である。ベッセル関数は電磁気学において円筒座標系の波動方程式の解であるので、電磁解析で頻繁に取り扱われる。特に、導波管を取り扱った電波伝搬の解析はベッセル関数が必要不可欠である。ベッセル関数は電磁波解析のために調べられた関数のような気がするが、実はそうではなかった。歴史的には惑星の軌道計算の目的で導入されたことがベッセル関数の発端なのだ。本章では、歴史にしたがって惑星軌道計算からベッセル関数を導入し、その後、ベッセル関数の性質を調べる。

3.1 ベッセル関数の導入

現在の物理学や工学における応用分野から予想もつかないが、ベッセル関数はケプラーの法則を解析するために導入された。ケプラーの法則とは、惑星の公転運動がしたがう物理法則である。本節は、歴史にならい、ケプラーの法則からベッセル関数を導入する。

3.1.1 ケプラーの法則

本節では、ケプラーの法則の解析をする手段としてベッセル関数を導入する。ケプラーの法則は、惑星の運動がしたがう法則であり、次の3つの法則で構成される。

楕円軌道の法則 惑星は、太陽を一つの焦点とする楕円軌道上を運動する。

面積速度一定の法則 惑星は、太陽とを結ぶ線分が単位時間に描く面積が一定であるよう に運動する。

調和の法則 惑星の公転周期の2乗は,軌道長半径の3乗に比例する。

これらの法則の中で, 楕円軌道の法則と, 面積速度一定の法則を本節で取り扱う。ケプラーの法則は, 膨大な観測結果から導かれた法則であるが, ニュートン力学に基づいて証明す

ることができる。本書ではその証明を省略するので、興味のある読者は詳しくは物理学の 教科書を参照するとよい。

面積速度一定の法則に関して、惑星のように公転する天体が描く面積とは図 3.1 に示す面積 S を考えればよい。この図は原点 O を太陽とする天体の公転軌道を太い曲線で描いている。この軌道は原点 O を焦点の 1 つとする楕円軌道であり、長半径を 1 としている。離心率を e としたとき、太陽の位置は楕円軌道の中心から e だけずれた位置にあり、楕円の短半径は $\sqrt{1-e^2}$ となる。天体が反時計回りに公転していると仮定し、現在位置を P とする。近日点を A としたとき、天体が描く面積 S とは楕円軌道における扇形 OAP の面積である。面積速度一定の法則とは、面積 S が時間経過に対して一定の比率で増加するように天体が運動するという意味である。

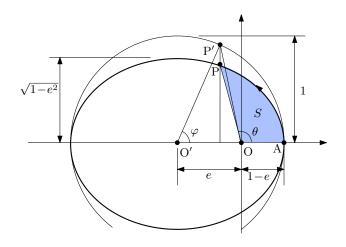


図 3.1: 公転する天体が描く面積

天体の位置を表すには、太陽からみた近日点との離角 (真近点角) θ よりも図 3.1 に示す離心近点角 φ を用いるほうが便利である。この図には、楕円軌道の短軸方向を $(1-e^2)^{-1/2}$ 倍した円を楕円軌道と中心が一致するように描き、天体の現在位置 P を短軸方向に $(1-e^2)^{-1/2}$ 倍した位置に点 P' をとっている。楕円軌道の中心 O' からみた点 P' の近日点との離角を離心近点角 φ と定義する。このとき、扇形 O'AP' の面積は $\varphi/2$ である。三角形 O'OP' の面積が $e\sin\varphi/2$ であるので、領域 OAP' の面積は $\varphi-e\sin\varphi$ である。よって、天体が描く面積 S は、 $S=(\varphi-e\sin\varphi)/2$ なる関係を満たす。したがって、単位時間あたりの面積増加率 (面積速度) を $\omega/2$ とすれば、面積速度一定の法則は、

$$\varphi - e\sin\varphi = \omega t,\tag{3.1}$$

なる数式で表される。この方程式を φ について解けば、惑星の位置を計算できる。実際の天体軌道計算において、この方程式はニュートン法などの数値解法によって解かれる。一方、この方程式の解析的な解を求める試みによって、ベッセル関数が導入される。次節でベッセル関数を導入する。

3.1.2 ベッセル関数

歴史にならい,ケプラーの法則を解く過程,すなわち,楕円軌道の中心から見たときの近日点との離角 φ を時間 t の関数で表す過程でベッセル関数を導入しよう。方程式 (3.1) を解く鍵は, ωt が 2π だけ増加すれば, φ も 2π だけ増加することである。この事実は, $(1-e\cos\varphi)^{-1}$ が φ についての周期関数であるので, ωt についての周期関数でもあることを意味する。

ケプラーの法則 (3.1) について、簡単のため $\tau \equiv \omega t$ を定義しよう。このとき、ケプラーの法則は $\varphi - e \sin \varphi = \tau$ のように書くことができる。この数式の両辺を τ について微分すると、

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}\tau} = \frac{1}{1 - e\cos\varphi},$$

となる。この数式の右辺は、上で述べたように、 $\tau \equiv \omega t$ の周期関数でもある。したがって、右辺はフーリエ級数:

$$\frac{1}{1 - e\cos\varphi} = A_0 + 2\sum_{k=1}^{\infty} \left(A_k\cos k\tau + B_k\sin k\tau\right),\tag{3.2}$$

で表現することができる。ここで、左辺の関数が φ について偶関数であることから、 τ についても偶関数であるので、展開係数 B_k はすべてゼロである。また、展開係数 A_k は、

$$A_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos k\tau}{1 - e\cos\varphi} d\tau = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\pi} \frac{\cos k\tau}{1 - e\cos\varphi} d\tau,$$

によって計算される。特に、 $\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}\tau=(1-e\cos\varphi)^{-1}$ を利用すれば、 $A_0=1$ であることがわかる。つまり、フーリエ変換 (3.2) は、

$$\frac{1}{1 - e\cos\varphi} = \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}\tau} = 1 + 2\sum_{k=1}^{\infty} A_k \cos k\tau,$$

と書き換えることができる。この数式を積分すれば、

$$\varphi = \tau + 2\sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_k}{k} \sin k\tau, \tag{3.3}$$

が得られる。なお、前に書いた面積速度 ω と時刻 t との関係で、 $\tau = \omega t$ である。

フーリエ級数の展開係数 A_k は, 波数 k と離心率 e に依存するので, A_k を k をパラメータとする $x \equiv ke$ の関数 $J_k(x)$ として定義しよう。つまり, 展開係数は,

$$J_k(x) = A_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos k\tau}{1 - e \cos \varphi} d\tau = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos k(\varphi - e \sin \varphi) d\varphi,$$

のように計算できる。改めて書くと、関数 $J_k(x)$ は、

$$J_k(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(k\varphi - e\sin x) d\varphi, \qquad (3.4)$$

なる積分形式で定義できる。定義された関数 $J_k(x)$ において, x=ke であるから, ケプラーの法則の解は、

$$\varphi = \tau + 2\sum_{k=1}^{\infty} \frac{J_k(ke)}{k} \sin k\tau, \tag{3.5}$$

のように記述できるということだ。ところで, $J_k(x)$ の性質を探るため, 定義式から 1 階微分と 2 階微分を計算すると.

$$J'_k(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \sin(k\varphi - x\sin\varphi) \sin\varphi \,d\varphi$$
$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} (k - x\cos\varphi) \cos(k\varphi - x\sin\varphi) \cos\varphi \,d\varphi,$$
$$J''_k(x) = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(k\varphi - x\sin\varphi) \sin\varphi \,d\varphi,$$

となる。なお、1 階微分の右辺への数式変形には部分積分の公式を用いた。これらの微分から、

$$x^{2} \frac{\mathrm{d}^{2} J_{k}}{\mathrm{d}x^{2}} + x \frac{\mathrm{d}J_{k}}{\mathrm{d}x} + (x^{2} - k^{2}) J_{k} = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\pi} (kx \cos \varphi - k^{2}) \cos(k\varphi - x \sin \varphi) \,\mathrm{d}\varphi$$
$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{k\pi} \cos \eta \,\mathrm{d}\eta = 0,$$

が得られる。ここで, $\eta \equiv k\varphi - x\sin\varphi$ なる置き換えを適用した。この計算結果から, 関数 $J_k(x)$ が微分方程式:

$$\frac{\mathrm{d}^2 J_k}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}J_k}{\mathrm{d}x} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) J_k = 0, \tag{3.6}$$

の解であることが導かれる。この方程式は、ベッセルの微分方程式と呼ばれる。ケプラーの方程式の解を得るには、パラメータ ν は整数で十分であるが、一時的に、パラメータ ν を任意の実数としておこう。

具体的にベッセルの微分方程式の解を得るため、その解をべき級数で表現する場合を考えよう。微分方程式の解 $J_k(x)$ が、

$$J_k(x) = z^{\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} a_m z^m,$$

であると仮定する。ここで、最低次数を表す α と展開係数 a_m が未知数である。この関数の 1 階微分と 2 階微分が、

$$J'_{k}(z) = (\alpha + m)a_{m}z^{\alpha+m-1},$$

$$J''_{k}(z) = (\alpha + m)(\alpha + m - 1)a_{m}z^{\alpha+m-2}.$$

であることは容易に計算できる。これらをベッセルの微分方程式に代入すると,

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left[(\alpha + m)^2 - \nu^2 \right] a_m z^{\alpha + m - 2} + \sum_{m=0}^{\infty} a_m z^{\alpha + m} = 0,$$

が得られる。この方程式を足がかりにして未知数を求めていこう。

まず、最低次 $(\alpha-2$ 次)の係数がゼロとなる要請によって、 $\alpha^2-\nu^2=0$ なる方程式が得られる。つまり、最低次数は $\alpha=\pm\nu$ でなければならない¹。続いて、 $\alpha-1$ 次の係数がゼロである要請を方程式として書くと、

$$[(\alpha+1)^2 - \nu^2] a_1 = (2\nu+1)a_1 = 0,$$

のようになる。任意の ν についてこの方程式が成立するためには, $a_1=0$ でなければならない。

任意の次数の係数は、係数がゼロになる要請から、

$$a_m = -\frac{a_{m-2}}{2m\nu + m^2},$$

なる漸化式にしたがう。上で示したように $a_1 = 0$ であることから $a_1 = a_3 = a_5 = \cdots = 0$, すなわち, 奇数番目の係数はすべてゼロである。そのため, 偶数番目の係数のみに限定して漸化式を書き換えると.

$$a_{2m} = -\frac{a_{2(m-1)}}{4m(\nu+m)},$$

となる。第0番目の係数を a_0 としたとき、この漸化式を順次適用していくと、

$$a_{2m} = \frac{(-1)^m \Gamma(\nu+1) a_0}{2^{2m} m! \Gamma(m+\nu+1)},$$

が得られる。この係数に関して, $1/a_0 \equiv 2^{\nu} \Gamma(\nu+1)$ とおくと²,

$$a_{2m} = \frac{(-1)^m}{2^{2m+\nu}m!\,\Gamma(m+\nu+1)},$$

が得られる。この展開係数を級数展開の数式に代入すると, 関数 $J_{\nu}(z)$ は,

$$J_{\nu}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu + m + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu}, \tag{3.7}$$

のように書くことができる。また、次数 ν が正の整数nである場合、

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! (n+m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n},$$
(3.8)

と書くことができる。この関数は**ベッセル関数**, または, 第1種ベッセル関数と呼ばれる。 関数の添え字 ν とnはベッセル関数の次数である。級数 (3.8) を用いてベッセル関数を計算すると, 図 3.2 が得られる。ベッセル関数は三角関数のように振動する関数であるが, 変

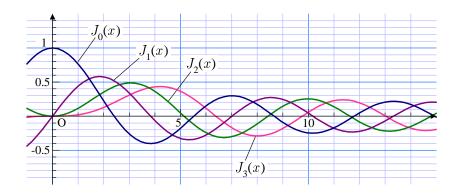


図 3.2: ベッセル関数

数 x によって振幅が変化し、周期関数ではない。しかし、後に示すように振幅は \sqrt{x} に反比例し、 $x \to \infty$ の極限で三角関数に近づく³。

級数 (3.7) と (3.8) は収束半径が無限大であるので,原理的にはいかなる x を代入しても級数は収束する。しかし,パラメータ ν や変数 x の絶対値が大きくなると,途中計算で現れる項が大きな数となり,現実の計算では計算機の桁数制限から正しい結果が得られない場合がある。そのような場合にも正確に計算するには,後の節で説明するテクニックが必要となる。

ベッセル関数の定義をし、その関数を級数展開できたところで、最初の話に立ち戻ろう。 ベッセル関数はケプラーの法則の解として惑星の離心近点角 φ を計算するために導入された。上で導入したベッセル関数を用い、離心近点角 φ は、

$$\varphi = \omega t + 2\sum_{k=1}^{\infty} \frac{J_k(ke)}{k} \sin k\omega t, \qquad (3.9)$$

のように記述できる。前に書いたように、 ω は平均近点角の増加率である。平均近点角の増加率は、惑星の公転周期が T であれば $\omega \equiv 2\pi/T$ で定義される。

ハレー彗星の公転運動 前に述べたように、天体の公転運動の解析には、ベッセル関数を展開係数とするフーリエ級数によって計算できる。その一例として、ハレー彗星の公転運動を計算すると図 3.3 のようになる。この図は近日点通過を現在としたときの時刻と位置の関係を、半年間隔で表している。ハレー彗星の軌道は、離心率が e=0.967 のように扁平した軌道を描くため、この図を描くためにはフーリエ級数は 500 倍波までの周波数を必要とした。これくらい離心率が大きい軌道は、展開係数を決めるベッセル関数がテイラー展

 $^{^1}$ この条件に関して, $\alpha \neq \pm \nu$ であっても $a_\alpha = 0$ であれば最低次数がゼロとなるのであれば, 係数をゼロとする要請を満足するが, α 次が最低次数であるという仮定に反する。

 $^{^2}$ 積分表現 (3.4) に x=0 を代入すると, $J_k(0)$ の k 次の展開係数が $1/2^k k!$ であることがわかる。その結果に基づき, $1/a_0 \equiv 2^\nu \Gamma(\nu+1)$ とおいた。

³ベッセルの微分方程式が $\rightarrow \infty$ の極限で f'' + f = 0 となることから容易に予想できる。

開 (3.8) だけでは十分に収束できないので、後の節で説明するテクニックを用いて計算した。 次回のハレー彗星の接近は 2061 年 7 月である。西暦 2013 年現在、ハレー彗星は海王

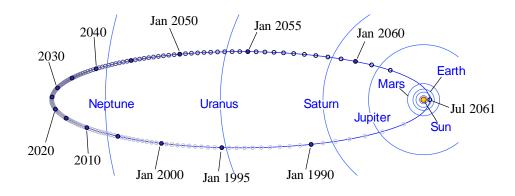


図 3.3: ハレー彗星の公転運動

星軌道の外側に存在する。離心率 0.967 のハレー彗星は遠日点における太陽までの距離が近日点の約 55 倍にもなる。面積速度一定の法則から,近日点での公転速度は遠日点の 55 倍の速さになるため,図に示すように,太陽への最接近の直前については,1年で木星の位置から近日点まで 1年の短期間で一気に到来する。逆に,公転周期のほぼ半分にあたる 35 年間を海王星の軌道の外をゆっくりと公転していることが図 3.3 からわかる。

3.1.3 負の次数のベッセル関数

ケプラーの法則の解法として導入した際, 第 1 種ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ の次数 ν は非負整数で十分だった。しかし, ベッセルの方程式の解として級数展開する仮定で ν を任意の実数とすることが可能であることを示した。そのとき, 第 1 種ベッセル関数は (3.7) で表現できる。

ベッセル関数の次数が任意の実数とすることに関して, 負の次数について考察しよう。 既に示したように、ベッセルの微分方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right) f = 0,$$

であるので、実は、次数 ν の符号反転に対してベッセルの微分方程式は同一の方程式なのである。つまり、 $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ は同一の方程式から得られる2つの独立した解なのである。それは、ベッセルの微分方程式が2階の微分方程式であることに起因する。

関数の独立性について説明しておこう。関数 $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ が独立であることは、方程式 $a_0J_{\nu}(x)+a_1J_{-\nu}(x)=0$ が任意の x に対して満足するために $a_0=a_1=0$ 以外の解が存

在しないことを意味する。これは, $a_0 \neq 0$ であれば, $J_{\nu}(x) = -(a_1/a_0) J_{-\nu}(x)$ と書くこともできるので, $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ が定数倍の関係にあれば独立でないということだ。

次数を符号反転した2つのベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ が独立であることは、級数展開:

$$J_{\nu}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu},$$

から明らかである。まず, $J_{\nu}(x)$ の最低次は x^{ν} の項である。一方, $J_{-\nu}(x)$ の最低次は $x^{-\nu}$ の項である。つまり, $J_{\nu}(x)$ には存在しない次数の項が $J_{-\nu}(x)$ に含まれるのである。これは, 任意の x に対して, $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ が定数倍の関係で表せないことを意味する。よって, $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ は独立であるのだ。

例外として、ベッセル関数の次数 ν を負の整数 $\nu \equiv -n$ としたとき、2 つの解 $J_n(x)$ と $J_{-n}(x)$ が独立した解ではない。その事実を示そう。負の次数のベッセル関数の取り扱いには注意が必要である。なぜなら、ガンマ関数がゼロと負の整数を 1 位の極とするからである。そのため、-n 次のベッセル関数は、

$$J_{-n}(x) \equiv \lim_{\nu \to -n} J_{\nu}(x) = \lim_{\nu \to -n} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu + m + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu},$$

のような極限で定義すればよい。ガンマ関数がゼロと負の整数を1位の極とするので、

$$\lim_{\nu \to -n} \frac{1}{\Gamma(\nu + m + 1)} = 0, \qquad (m \le n - 1)$$

が成立する。つまり、(3.1.3) において、 $m \le n-1$ の寄与がゼロであるので、負の次数の第 1 種ベッセル関数は、

$$J_{-n}(x) = \sum_{m=n}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! (m-n)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n}$$
$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n}}{(m+n)! m!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n},$$

のように計算できる。この計算結果は,

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x), (3.10)$$

なる関係が成立することを意味している。したがって、整数次数のベッセル関数について、 $J_n(x)$ と $J_{-n}(x)$ が独立した 2 つの関数ではない。しかし、ベッセルの微分方程式が 2 階の微分方程式であるので、独立したもう 1 つの解があるはずである。もう 1 つの独立した解の選び方については後の節で説明する。

3.2 ベッセル関数の漸化式

ベッセル関数は, $J_{\nu}(x)$ という記号のように, 変数 x だけでなく次数 ν にも依存する関数である。ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ は, あたかも, ν を添え字にした数列のように, 隣り合う次数間を漸化式で関係づけることができる。本節ではベッセル関数の次数間で成立する漸化式について説明する。

3.2.1 ベッセル関数の母関数

数列の性質を調べるときに、その数列をテイラー級数などの展開係数としたときにどの 関数に収束するかを調べることがある。その収束先の関数を母関数と呼ぶ。ベッセル関数 $J_n(x)$ の場合、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n = e^{(x/2)(t-1/t)}, \tag{3.11}$$

が成立する。この数式は、ベッセル関数の母関数が $e^{(x/2)(t-1/t)}$ であることを意味する。言い換えると、ベッセル関数 $J_n(x)$ は、関数 $e^{x(t-1/t)/2}$ をローラン展開したときの n 次の係数である。

上に示した (3.11) を証明しよう。計算が多少技巧的であるので、計算途中を省略せずに 証明していく。ベッセル関数 $J_n(x)$ を展開係数とするローラン展開は、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n = \sum_{n=-\infty}^{-1} J_n(x) t^n + \sum_{n=-\infty}^{-1} J_n(x) t^n$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} J_{-n}(x) t^{-n} + \sum_{n=-\infty}^{-1} J_n(x) t^n$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n J_n(x) t^{-n} + \sum_{n=-\infty}^{-1} J_n(x) t^n,$$

のように計算できる。最下行への数式変形については, $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)$ なる関係を用いた。さらにベッセル関数を級数展開すると,

$$RHS = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m}}{m! (n+m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} t^{-n} + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! (n+m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} t^n$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{m! k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{k+m} t^{m-k} + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=m}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k+m} t^{k-m}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{m! k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{k+m} t^{m-k} + \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=k}^{\infty} \frac{(-1)^k}{m! k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+k} t^{m-k},$$

のように数式変形を進行できる。第2行目の数式変形は $k \equiv m+n$ とした。第3行目への数式変形は、第2項の総和対象である添え字 m と k を交換した。ここで、添え字 m を横軸

に、添え字kを縦軸にとると、第1項の総和の範囲は図に示す上三角形となり、第2項の総和の範囲は下三角形となる。 つまり、第2項と第2項の和で、添え字mとkがゼロ以上の整数をすべて網羅することになる。 したがって、右辺は、

RHS =
$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{m! \, k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{k+m} t^{m-k}$$

= $\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{xt}{2}\right)^m \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{x}{2t}\right)^k$
= $e^{xt/2} \cdot e^{-x/2t} = e^{(x/2)(t-1/t)}$,

のように変形される。この計算結果として、ベッセル関数の母関数を特定することができた。整数次のベッセル関数はこの性質を利用して、 $e^{(x/2)(t-1/t)}$ のローラン展開のn次の係数を $J_n(x)$ と定義する文献 4 もある。

母関数から導出される性質 1 ベッセル関数の母関数に t=1 を代入すると興味深い関係式が得られる。その数式を書いてみると、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) = 1, \tag{3.12}$$

が得られる。つまり、すべての整数次のベッセル関数を加算すると、その和はxに依存しない定数となる。また、 $J_{-n}(x)=(-1)^nJ_n(x)$ なる関係式を利用すると、この関係式は、

$$J_0(x) + 2\sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) = 1,$$
 (3.13)

のように書き換えることができる。

母関数から導出される性質 2 ベッセル関数の母関数を t について微分すると、興味深い関係式が得られる。両辺を t について微分すると、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n J_n(x) t^{n-1} = \frac{x}{2} \left(1 + \frac{1}{t^2} \right) e^{(x/2)(1-1/t)},$$

が得られる。この数式の右辺に再び母関数が現れているので、級数展開すると、

RHS =
$$\frac{x}{2} \left(1 + \frac{1}{t^2} \right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n$$

= $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{x}{2} \left(J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) \right) t^{n-1}$,

 $^{^4}$ J. B. Arfken, H. B. Weber, "特殊関数," 権平健一郎, 神原武志, 小山直人 訳, 講談社, 基礎物理数学 Vol. 3, 第 4 版, pp.43–46, 2001.

のように計算される。この計算結果は、

$$J_{n-1}(x) + J_{n+1}(x) = \frac{2n}{r} J_n(x), \tag{3.14}$$

なる漸化式が成立することを示唆している。この漸化式は、数値計算において有用な公式である。前節で述べたように、級数展開でベッセル関数を計算する場合、次数が大きなベッセル関数は計算機の演算桁の影響で正確な計算が困難になる。それを回避するには、 $J_0(x)$ と $J_1(x)$ を計算しておき、この漸化式を繰り返して $J_n(x)$ を計算するのである。

3.2.2 ベッセル関数の漸化式

漸化式 (3.14) は、整数次以外でも成立する。級数展開を用いて $J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x)$ を計算すればその事実を証明できる。計算してみると、

$$\begin{split} J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(\nu+m)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(\nu+m+2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu+1} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(\nu+m)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m-1)! \, \Gamma(\nu+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu-1} + \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(\nu+m)} - \frac{(-1)^m}{(m-1)! \, \Gamma(\nu+m+1)}\right] \left(\frac{x}{2}\right)^{2m\nu-1} \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu-1} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \, \nu}{m! \, \Gamma(\nu+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \, \nu}{m! \, \Gamma(\nu+m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1}, \end{split}$$

が得られる。この結果から、

$$J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{r} J_{\nu}(x), \tag{3.15}$$

が得られ、整数以外の任意の次数 ν についても、(3.14)と同様の漸化式が成立することが示された。この漸化式は、整数次の場合と同様に、大きな次数のベッセル関数を計算する際に利用するのが有効である。

上の漸化式に類似した関係式が、ベッセル関数の級数展開を微分することによって得る ことができる。これについても計算すると、

$$J_{\nu}'(x) = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (2m+\nu)}{m! \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu}$$

$$\begin{split} &= \frac{\nu}{2\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m (2m+\nu)}{m! \, \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu} \\ &= \frac{1}{2\Gamma(\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(m+\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m-1)! \, \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(m+\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(m-1)! \, \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(m+\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu-1} - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(m+\nu)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu+1}, \end{split}$$

のように数式変形できる。この計算結果から、

$$J_{\nu-1}(x) - J_{\nu+1}(x) = 2J_{\nu}'(x), \tag{3.16}$$

なる漸化式が得られる。この関係式は、むしろ、(3.15) との和や差をとると興味深い関係式になる。和と差をとって2分の1倍すると、

$$J_{\nu-1}(x) = -\frac{\nu}{x} J_{\nu}'(x) + J_{\nu}'(x), \qquad (3.17a)$$

$$J_{\nu+1}(x) = \frac{\tilde{\nu}}{x} J_{\nu}'(x) - J_{\nu}'(x), \tag{3.17b}$$

が得られる。さらに、(3.17a) の両辺に x^{ν} を乗じた積は、

$$x^{\nu} J_{\nu-1}(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} x^{\nu} J_{\nu}(x), \tag{3.18}$$

である。この関係式の両辺を積分すると、

$$\int x^{\nu} J_{\nu-1}(x) \, \mathrm{d}x = x^{\nu} J_{\nu}(x) + C, \tag{3.19}$$

なる積分公式が得られる。ただし、Cは積分定数である。

3.3 積分表現

ケプラーの法則からベッセル関数を導入した際に, 既に, ベッセル関数を積分形式で表現できることを示した。本節では, ベッセル関数の母関数を利用して整数次のベッセル関数の積分表現を得る。さらに, 積分を複素積分に拡張し, 非整数次のベッセル関数の積分表現にも言及する。

3.3. 積分表現 73

3.3.1 整数次ベッセル関数

ベッセル関数の母関数を利用すると、ベッセル関数の積分表現を得ることができる。既に示したように、ベッセル関数 $J_n(x)$ は関数 $e^{(x/2)(t-1/t)}$ のローラン展開の展開係数である。つまり、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n = e^{(x/2)(t-1/t)},$$

が成立する。この数式に対して, $t \equiv e^{i\varphi}$ を代入すると,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) e^{in\varphi} = e^{(x/2)(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})} = e^{ix\sin\varphi}$$
$$= \cos(x\sin\varphi) + i\sin(x\sin\varphi),$$

なる関係式が得られる。一方、左辺をその表記どおりに計算すると、

LHS =
$$J_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(J_n(x) e^{in\varphi} + J_{-n}(x) e^{-in\varphi} \right)$$

= $J_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} J_n(x) \left[e^{in\varphi} + (-1)^n e^{-in\varphi} \right]$
= $J_0(x) + 2i \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n-1}(x) \sin(2n-1)\varphi + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) \cos 2n\varphi$,

のように変形できる。この母関数の実部と虚部を個別に取り出すと,

$$\cos(x\sin\varphi) = J_0(x) + 2\sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x)\cos 2n\varphi,$$

$$\sin(x\sin\varphi) = 2\sum_{n=1}^{\infty} J_{2n-1}(x)\sin(2n-1)\varphi,$$

なる等式が得られる。ここで、三角関数の直交性:

$$\int_0^{\pi} \cos n\varphi \cos m\varphi \, d\varphi = \frac{\pi}{2} \delta_{nm}, \qquad \int_0^{\pi} \sin n\varphi \sin m\varphi \, d\varphi = \frac{\pi}{2} \delta_{nm},$$

を利用すると, 上の等式は,

$$\int_0^{\pi} \cos(x \sin \varphi) \cos n\varphi \, d\varphi = \begin{cases} \pi J_n(x)/2, & (n = \text{even}) \\ 0, & (n = \text{odd}) \end{cases}$$

$$\int_0^{\pi} dx \, dx \, dx \, dx = \begin{cases} 0, & (n = \text{even}) \end{cases}$$

$$\int_0^{\pi} \sin(x \sin \varphi) \sin n\varphi \, d\varphi = \begin{cases} 0, & (n = \text{even}) \\ \pi J_n(x)/2, & (n = \text{odd}) \end{cases}$$

なる関係式に書き換えられる。これらの関係式は、パラメータnが偶数か奇数で場合分けをしている。しかし、これらの関係式の和ととると、

$$\int_0^{\pi} \left[\cos(x \sin \varphi) \cos n\varphi + \sin(x \sin \varphi) \sin n\varphi \right] d\varphi = \frac{\pi}{2} J_n(x),$$

のように場合分けを必要としない数式が得られる。この数式の左辺は, 三角関数の加法定理を用いて整理することができる。その結果.

$$J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(n\varphi - x\sin\varphi) \,d\varphi, \qquad (3.20)$$

なる積分公式が得られる。この積分公式は、ケプラーの法則からベッセル関数を導入する際に示した積分公式と一致する。この積分公式の被積分関数が偶関数であることに注意すると、

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n\varphi - x\sin\varphi) \,\mathrm{d}\varphi$$

であることが明らかである。さらに、この積分の被積分関数を $\sin(n\varphi - x\sin\varphi)$ に書き換えると、その関数が奇関数であるので、

$$0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(n\varphi - x\sin\varphi) \,\mathrm{d}\varphi$$

のような等式になる。前者の等式に、後者の等式の i 倍を加算すると、

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n\varphi - x\sin\varphi)} d\varphi,$$

なる形に書き換えられる。さらに、この被積分関数が周期 2π の周期関数であることから、

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(n\varphi - x\sin\varphi)} d\varphi, \qquad (3.21)$$

のように書き換えてもよい。

3.3.2 シュレーフリの積分表示

前節で導出した積分表現は整数次のベッセル関数しか与えない。本節で示されるが、前節の積分表現における次数nを非整数 ν に置き換えるだけでは不十分なのである。

非整数次のベッセル関数の積分表現を得るためには, 前節と同様に, ベッセル関数の母関数:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) t^n = e^{(x/2)(t-1/t)},$$

を用いる。この関数数に, t^{-n-1} を乗じた関数 $e^{(x/2)(t-1/t)}t^{-n-1}$ は,

$$e^{(x/2)(t-1/t)}t^{-n-1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(x) t^{m-n-1},$$

なる級数で表される。この関数は t=0 を極とする関数である。この級数表現から、母関数に t^{-n-1} を乗じた新たな関数の -1 次の展開係数 (すなわち、留数) は $J_n(x)$ である。したがって、留数定理によると、

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-n-1} dt,$$
 (3.22)

3.3. 積分表現 75

が成立する。ここで、積分変数を複素数に拡張した。しかも、積分路 C は、図 3.4 に示すように、被積分関数の極 t=0 を 1 回だけ反時計回りに周回する単純閉曲線である。

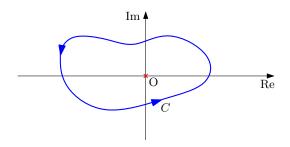


図 3.4: 整数次のベッセル関数を得るための積分経路

複素平面における経路積分 (3.22) について、次数 n を非整数 ν に書き換えた数式:

$$y(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu-1} dt, \qquad (3.23)$$

について考えてみよう。ベッセル関数の母関数は $e^{(x/2)(t-1/t)}$ は整数次のベッセル関数を展開係数とする関数であるので、被積分関数の留数は $J_{\nu}(x)$ とならない。だから、単純に n を ν に置き換えて (3.22) を書き直しただけでは J_{ν} の積分表現とはならない。

上で定義された y(x) がベッセル関数である可能性を考察しよう。仮に, $y(x) = J_{\nu}(x)$ であるならば, y(x) は ν 次のベッセルの微分方程式:

$$x^2y'' + xy + (x^2 - \nu^2)y = 0,$$

を満たすはずである。その可能性を考察するのだ。なお、数式中のプライム (′) は x についての微分を意味する。複素積分による y(x) の定義 (3.23) をベッセルの微分方程式の左辺に代入すると、

$$x^{2}y'' + xy' + (x^{2} - \nu^{2})y$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{C} \left\{ \left[\frac{x}{2} \left(t - \frac{1}{t} \right) \right]^{2} + \frac{x}{2} \left(t - \frac{1}{t} \right) + x^{2} - \nu^{2} \right\} e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu-1} dt,$$

が得られる。この積分がゼロになるかどうかを判定することは難しく思えるかもしれない。しかし、この積分の被積分関数は、

Integrad =
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{(x/2)(t-1/t)}t^{-\nu}\left[\nu + \frac{x}{2}\left(t + \frac{1}{t}\right)\right],$$

である。右辺を実際に計算すればこの関係式の正当性が検証できるはずである。この関係式を利用すると, y(x) をベッセルの微分方程式に代入した結果は,

$$x^{2}y'' + xy' + (x^{2} - \nu^{2})y$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \left[e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu} \left[\nu + \frac{x}{2} \left(t + \frac{1}{t} \right) \right] \right]_{t_{0}}^{t_{1}},$$

となる。ここで、 t_0 と t_1 は、それぞれ、積分路の始点と終点である。この数式の右辺は、外側のブラケット ([]) の内部の数式に $t=t_1$ を代入した結果と $t=t_0$ を代入した結果との差をとることを意味する。もともと周回積分だから $t_0=t_1$ となるので、この積分は必ずゼロになるのでは、と思ってはいけない。ブラケット内部の $t^{-\nu}$ がその期待を裏切るのだ。積分路の始点を $t_0=Re^{-\pi i}$ 、終点を $t_1=Re^{\pi i}$ としよう。確かに $t_0=t_1$ なのだが、t=0を1回まわる意味でこのような表現を用いる。すると、 $t_0^{-\nu}=R^{-\nu}e^{\pi i\nu}$ 、 $t_1^{-\nu}=R^{-\nu}e^{-\pi i\nu}$ となるため、 $t_0^{-\nu}$ の数が同一にならないのだ。つまり、 $t_0^{-\nu}$ とな無条件にベッセルの微分方程式を成立させることはないのである。

積分路の設定で y(x) がベッセルの微分方程式を成立させることができるかもしれないので、もう少し考察を続けよう。上で述べたように、積分路の始点と終点を、それぞれ、 $t_0=Re^{-\pi i},\,t_1=Re^{\pi i}$ としよう。ただし、現時点で R は複素数とする。なぜなら、R を正の実数とすると積分路の始点と終点が、必ず、負の実軸上に限定されるからである。そのように定義された t_0 と t_1 を代入すると、

$$x^{2}y'' + xy' + (x^{2} - \nu^{2})y$$

$$= \frac{\sin \pi \nu}{\pi} e^{(x/2)(-R+1/R)} \left[\nu - \frac{x}{2} \left(R + \frac{1}{R} \right) \right],$$

のように計算される。この数式の右辺は, $R\to\infty$ の極限でゼロとなる。一方, $R\to-\infty$ の極限で右辺は発散するので、積分路の設定によって結果が異なるのである。その結果として、図 3.5 に示す積分路をとれば y(x) は非整数次のベッセルの微分方程式を満足する。その積分経路は、始点と終点を負の実軸の無限遠にとり、t=0 を反時計回りに 1 回だけまわる経路であればどのような経路でもよい。したがって、(3.23) は ν 次のベッセル関数である。すなわち、ベッセル関数は、

$$J_{\nu}(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C} e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu-1} dt, \qquad (3.24)$$

なる積分で表される。この積分表示は**シュレーフリの積分表示**と呼ばれ、非整数次のベッセル関数を与えることができる。

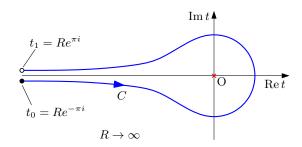


図 3.5: 関数 y(x) がベッセルの微分方程式を満足する積分路

シュレーフリの積分表示における積分路 C は、始点と終点が負の実軸上の無限遠に存在し、t=0 を反時計回りに1回だけ周回する経路であれば、どのような経路でもよい。積分

3.3. 積分表現 77

路の例として、図 3.6 に示す積分路を考えよう。 すなわち、実軸上を負の無限大から -1 までたどる経路 C_- と、t=0 の周りを半径 1 の円周に沿って t=-1 から 1 回転する経路 C_0 と、実軸上を -1 から負の無限大までたどる経路 C_+ を積分路とする。

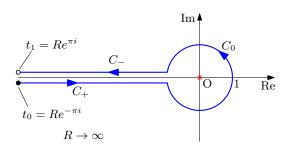


図 3.6: 非整数次のベッセル関数を得るための積分路

経路 C_0 に沿った積分では、積分変数を $t \equiv e^{i\varphi}$ とすればよい。新たな積分変数 φ の積分範囲は $[-\pi,\pi]$ となるので、

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{C_0} e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu-1} dt = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{(x/2)(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})} \cdot e^{-i\nu\varphi} d\varphi$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i(\nu\varphi - x\sin\varphi)} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(\nu\varphi - x\sin\varphi)} d\varphi$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} e^{i(\nu\varphi - x\sin\varphi)} d\varphi,$$

のように積分が計算できる。経路 C_- に沿った積分では、積分変数を $t\equiv e^{\xi-\pi i}$ とすればよい。その場合、新たな積分変数 ξ の積分範囲は、 $[\infty,0]$ となるので、

$$\begin{split} \frac{1}{2\pi i} \int_{C_{-}} e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu-1} \, \mathrm{d}t &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty}^{0} e^{(x/2)(-e^{\xi} + e^{-\xi})} \cdot e^{-\nu(\xi + \pi i)} \, \mathrm{d}\xi \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{0}^{\infty} e^{-x \sinh \xi - \nu \xi} \cdot e^{-\pi i \nu} \, \mathrm{d}\xi, \end{split}$$

のように積分が計算される。さらに、経路 C_+ に沿った積分では、積分変数を $t \equiv e^{\xi+\pi i}$ と すればよい。経路 C_- と比べて指数の虚部が $2\pi i$ だけ異なるのが大切である。それは t=0 を 1 回だけ周回していることを意味するからである。経路 C_+ において、積分変数 ξ の積分範囲は $[0,\infty]$ となるので、

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{C_{-}} e^{(x/2)(t-1/t)} t^{-\nu-1} dt = \frac{1}{2\pi i} \int_{0}^{\infty} e^{-x \sinh \xi - \nu \xi} \cdot e^{\pi i \nu} d\xi,$$

のように積分が計算される。これら3つの積分の和をとると、積分路Cに沿った積分となるので、ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ が得られる。結果を書くと、

$$J_{\nu}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} e^{i(\nu\varphi - x\sin\varphi)} d\varphi + \frac{\sin\pi\nu}{\pi} \int_{0}^{\infty} e^{-x\sinh\xi - \nu\xi} d\xi,$$

が得られる。右辺の第 2 項に $\sin \pi \nu$ なる因数を含むため、ベッセル関数の次数 ν が整数のとき、第 2 項はゼロとなる。

3.3.3 ポアソンの積分表示

ベッセル関数の級数展開から別の積分表現を得ることができる。その導出も多少, 技巧的なので、なるべく導出過程を省略せずに示そう。既に示したように、ベッセル関数は、

$$J_{\nu}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \, \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu},$$

なる級数に展開できる。この数式の左辺を調べるにあたり,

$$B(\nu + 1/2, m + 1/2) = \frac{\Gamma(\nu + 1/2) \Gamma(m + 1/2)}{\Gamma(m + \nu + 1)},$$

なるベータ関数を評価しよう。ガンマ関数とベータ関数は本書の第 1 で取り扱った。分子に含まれる $\Gamma(m+1/2)$ は, m がゼロ以上の整数であり, $\Gamma(1/2)=\pi^{1/2}$ であることを利用すると、

$$\Gamma(m+1/2) = \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2} \cdots \frac{2m-1}{2} \pi^{1/2}$$
$$= \frac{(2m)!}{2^m \cdot 2 \cdot 4 \cdot 6 \cdot (2m)} \pi^{1/2} = \frac{(2m)!}{2^{2m} m!} \pi^{1/2},$$

であることがわかる。この関係式を $B(\nu + 1/2, m + 1/2)$ に代入すると、

$$B(\nu + 1/2, m + 1/2) = \pi^{1/2} \Gamma(\nu + 1/2) \frac{(2m)!}{2^{2m} \, m! \, \Gamma(m + \nu + 1)},$$

が導かれる。この数式の右辺がベッセル関数の級数に含まれる項に類似していることから,ベッセル関数の級数はベータ関数を用いて記述できそうである。級数を書き直してみると,

$$J_{\nu}(x) = \frac{\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} B(\nu + 1/2, m + 1/2) x^{2m}, \tag{3.25}$$

が得られる。さらに、ベータ関数の積分表現 (本書の数式 (1.3)):

$$B(\nu + 1/2, m + 1/2) = 2 \int_0^{\pi/2} \sin^{2m} \varphi \cos^{2\nu} \varphi \, d\varphi,$$

に注意すると、上で導出した関係式 (3.25) は、

$$J_{\nu}(x) = \frac{2\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{0}^{\pi/2} \cos^{2\nu}\varphi \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m}}{(2m)!} (x \sin \varphi)^{2m} d\varphi,$$

のように変形できるのだが、総和記号の影響を受ける部分は余弦関数 (cosine) のマクローリン展開となっている。したがって、この数式は、

$$J_{\nu}(x) = \frac{2\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{0}^{\pi/2} \cos(x\sin\varphi) \cos^{2\nu}\varphi \,\mathrm{d}\varphi, \tag{3.26}$$

3.3. 積分表現 79

なる形に変形できる。導出した積分表現(3.26)をさらに変形すると、

$$J_{\nu}(x) = \frac{\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos(x \sin \varphi) \cos^{2\nu} \varphi \, \mathrm{d}\varphi$$
$$= \frac{\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{0}^{\pi} \cos(x \cos \varphi) \sin^{2\nu} \varphi \, \mathrm{d}\varphi$$
$$= \frac{\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{0}^{\pi} e^{\pm x \cos \varphi} \sin^{2\nu} \varphi \, \mathrm{d}\varphi$$
$$= \frac{\pi^{-1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{-1}^{1} e^{\pm ipx} (1 - p^{2})^{\nu - 1/2} \, \mathrm{d}p,$$

が得られる。第1行目では被積分関数が偶関数であることを利用した。第2行目では φ を $\pi/2-\varphi$ に置き換えた。第3行目では余弦関数を複素指数関数に変形し、その虚部がゼロであることを利用した。最終行では、 $\cos\varphi$ をpで置き換えた。この積分形式はポアソンの積分表示と呼ばれる。

ポアソンの積分表示から、半奇整数次のベッセル関数が初等関数で表現できることが導かれる。積分表示 (3.27) を見ると、 $\nu=1/2$ では数式が簡単になることがわかる。実際に計算してみると、

$$J_{1/2}(x) = \pi^{-1/2} \left(\frac{x}{2}\right)^{1/2} \int_{-1}^{1} e^{ipx} dp = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x,$$

が得られる。引き続き, $\nu = 3/2$ についてベッセル関数を計算すると,

$$J_{3/2}(x) = \pi^{-1/2} \left(\frac{x}{2}\right)^{3/2} \int_{-1}^{1} (1 - p^2) e^{ipx} dp = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\frac{\sin x}{x} - \cos x\right),$$

が得られる。なお、この計算では、

$$\int_{-1}^{1} e^{ipx} dp = \frac{2\sin x}{x},$$

$$\int_{-1}^{1} p^{2} e^{ipx} dp = \frac{2\sin x}{x} + \frac{4\cos x}{x^{2}} - \frac{4\sin x}{x^{3}},$$

を利用した。後者の積分は,前者をもとに部分積分を 2 回繰り返せば計算できる。ここで示したように, $J_{1/2}(x)$ と $J_{3/2}(x)$ が初等関数で表現できる。ベッセル関数の漸化式 $J_{\nu-1}+J_{\nu-1}=2\nu J_{\nu}(x)/x$ を考えれば,すべての半奇整数次のベッセル関数が初等関数で表現できることがわかる。例として,漸化式を用いて $J_{-1/2}(x)$ を計算すると,

$$J_{-1/2}(x) = \frac{J_{1/2}(x)}{x} - J_{3/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x,$$

が得られる。これらの計算結果は近似式でなく、厳密式である。半奇整数次のベッセル関数はこのように簡潔な形で記述できるのが特徴である。

3.4 ベッセル関数の応用

ベッセル関数は物理学や工学で頻繁に現れる関数であるので、その応用例は多い。本節では、ベッセル関数の応用例として、光波の回折現象と、円形導波管の内部における電磁界を取り扱う。

3.4.1 円形開口による回折

円形開口による光波の回折は、望遠鏡やカメラの分解能を求める計算に応用される。図 3.7 のように奥行き方向がz 軸になるように座標を定める。ここで、xy 平面に壁を設け、原 点を中心に半径 D/2 の穴を開ける。一方、z=L にスクリーンを設置する。スクリーンの 距離は、十分に大きく、 $L\gg D$ であるとする。

上記の設置条件のもとで、z軸方向に光の平面波を照射し、スクリーンに映る光について調べてみよう。つまり、スクリーン上の点 [x,y,L] における光の波動関数を計算する。電磁気学によると光の波動関数は電界 E(x,y,L) である。 スクリーン上の電界 E(x,y,L) は、

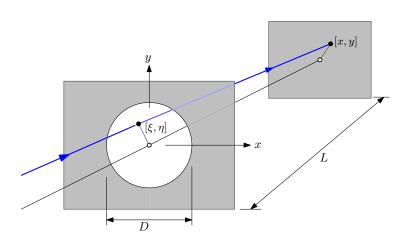


図 3.7: 円形開口を通過する光

波動力学におけるホイヘンスの原理によると、円形開口に含まれるあらゆる点を波源とみなしたときのスクリーン上の点における電界の総和である。照射された光波がz軸方向に伝播する平面波であるので、z=0の開口面の全体で波動関数の位相は一定である。つまり、開口面の任意の点 $[\xi,\eta,0]$ を通過する光の波動関数は、

$$E(\xi, \eta, 0) = E_0,$$

のような定数となる。ただし、 E_0 は複素数であり、開口全体にわたってその位相 (偏角) が一定である。ホイヘンスの原理を適用するのであれば、開口全体に同一位相の波源が均等

に配置されていると考えればよい。例えば、スクリーン上の点 [x,y,L] における電界のうち、開口上の点 $[\xi,\eta,0]$ の近傍の微小面積 $\mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta$ による寄与を $\mathrm{d}E$ とすると、

$$dE \propto E_0 e^{-ikl} d\xi d\eta$$
,

と書くことができる。ただし, l は波源からスクリーン上の点 [x,y,L] までの距離, k は波数と呼ばれる量 (波長を λ とすると $k\equiv 2\pi/\lambda$) である。距離 l は,

$$l = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 + L^2} = L\sqrt{1 + \frac{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2}{L^2}}$$
$$\simeq L + \frac{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2}{2L} \simeq L + \frac{r^2}{2L} - \frac{x\xi + y\eta}{L},$$

のように計算できる。ここで, $r^2=x^2+y^2$ とした。光が距離 l を伝播すると, 位相が kl だけ回転する。ただし, 光の波長を λ としたとき, $k\equiv 2\pi/\lambda$ なる波数を用いた。点 $[\xi,\eta,0]$ の近傍の微小面積からの寄与 dE は、

$$dE \propto E_0 \exp\left[-ik\left(L + \frac{r^2}{2L} - \frac{x\xi + y\eta}{L}\right)\right] d\xi d\eta$$

$$= \tilde{E}_0 \exp\frac{ik\left(x\xi + y\eta\right)}{L} d\xi d\eta$$

$$= \tilde{E}_0 \exp\frac{ikr\rho\left(\cos\theta\cos\varphi + \sin\theta\sin\varphi\right)}{L} d\varphi d\rho$$

$$= \tilde{E}_0 \exp ik\frac{r\rho\cos(\varphi - \theta)}{L} d\varphi d\rho,$$

となる。ただし、 \tilde{E}_0 は ξ や η に依存しない因数である。つまり、

$$\tilde{E}_0 \equiv E_0 \exp i \left[\phi - k \left(L + \frac{r^2}{2L} \right) \right],$$

として定義した。また、上に示したdEの計算に関して、第3行目への数式変形のため、

$$x = r \cos \theta$$
, $y = r \sin \theta$, $\xi = \rho \cos \varphi$, $\eta = \rho \sin \varphi$

とおいた。スクリーン上の点 [x,y,L] で観測される電界は、 $\mathrm{d}E$ を開口全体、すなわち、 $0 \le \rho < D/2$ 、 $0 < \le \varphi < 2\pi$ にわたって積分した値になる。比例係数を省略して計算すると、

$$E(x, y, L) \propto \int_0^{D/2} \rho \, d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \, \exp ik \frac{r\rho \, \cos \varphi}{L}$$
$$= 2\pi \int_0^{D/2} \rho \, d\rho J_0 \left(\frac{kr\rho}{L}\right)$$
$$= 2\pi \left[\frac{\rho L}{kr} J_1 \left(\frac{kr\rho}{L}\right)\right]_0^{D/2} = \frac{\pi DL}{kr} J_1 \left(\frac{krD}{2L}\right),$$

のように計算できる。なお、この計算にあたり、 $\theta=0$ に限定した。波動関数 $\Psi(x,y,L)$ はスクリーン上の原点 [0,0,L] について点対称であるので、 $\theta=0$ に限定することは一般性を失わない。第 2 行目への数式変形はベッセル関数の積分表示を利用した。さらに、第 3 行目への数式変形には、ベッセル関数の漸化式から得られる積分公式を利用した。さらに、波数と波長の関係 $k=2\pi/\lambda$ を利用して、k の代わりに λ を用いて数式を記述すると、

$$E(x, y, L) = \frac{\lambda DL}{2r} J_1\left(\frac{\pi r D}{\lambda L}\right),\,$$

なる結果が得られる。波動関数は E(x,y,L) は上で述べたように [0,0,L] について点対称であり、その振幅はその中心点からの距離 r に依存して 1 次の第 1 種ベッセル関数を用いて計算できる。

続いて、開口面に対して、光波が斜めに照射される場合を考えよう。 照射方向が z 軸方向と角度 α をなすとし、その照射方向の傾きは y 成分のみしかもたないとする。その場合、開口面の任意の点 $[\xi, \eta, 0]$ における波動関数 (電界) は、

$$E_{\alpha}(\xi, \eta, 0) = E_0 e^{i\eta \sin \alpha} \simeq E_0 e^{i\eta\alpha},$$

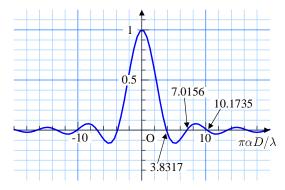
となる。ただし、照射角度 α が十分に小さいものとした。光波が開口面に対して垂直に照射された場合と異なり、開口面上での位相が η に依存するのだ。その条件のもとで、スクリーン上の点[x,y,L]における電界を計算すると、

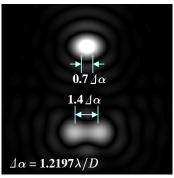
$$E_{\alpha} \propto \iint \exp ik \frac{x\xi + y\eta}{L} e^{i\eta\alpha} d\xi d\eta$$
$$= \iint \exp ik \frac{x\xi + (y + \alpha L)\eta}{L} d\xi d\eta$$

のように計算できる。この結果によると、電界 E_{α} は、E の変数を $y\mapsto y-\alpha L$ に置き換えた結果と一致する。つまり、 E_{α} は座標 $[0,-\alpha L,L]$ に最大値をもつ関数である。入射方向が z 軸と角度 α をなし、その傾きの方向が x 軸方向であるなら、スクリーン上の波動関数の最大値の位置は $[-\alpha L,0,L]$ となる。この事実を踏まえて、スクリーン上の半径 r を $r\equiv\alpha L$ とおいてみよう。これは、スクリーン上の半径を絶対的な長さでなく、光の入射方向に対する波動関数が最大となる位置を単位にした量で表したことを意味する。このような置き換えによって、波動関数は、

$$E \propto \frac{\lambda D}{2\alpha} J_1 \left(\frac{\pi \alpha D}{\lambda} \right),$$

のように書き換えることができる。この数式は、z軸方向に照射された光の波動関数 (電界) を表している。この関数をグラフに表示すると、図 3.8 (a) のように変動することがわかる。 グラフの横軸はスクリーン中央からの距離に対応する正規化表現である。その正規化表現とは、z軸と角度 α をなす方向に照射した光がスクリーン上で最大値をとる場所で正規化





- (a) Electric field vs. normalized radius.
- (b) Resolution of two adjoining points.

図 3.8: スクリーンに結像された接近する複数の点

している。 図 3.8 (a) によると、z 軸方向に照射された光の波動関数は、 $\pi\alpha D/\lambda=3.8317$ で最初の零点をもっている。別方向から入射した光があったとしても、その結像位置がその零点より内側であれば、z つの波動関数の重ね合わせは分離できない。つまり、z つの波動関数を分離するには、波動関数の結像位置が互いの零点より外側であることが条件となる。したがって、 $\pi \Delta\alpha D/\lambda=3.8317$ を関係で定義される $\Delta\alpha$ は波導関数を分離する角度の最小値という意味で分解能と呼ばれる。すなわち、分解能は $\Delta\alpha=1.2197\lambda/D$ となり、開口の直径に反比例する。この数式は、レンズの分解能を与える数式として利用される。例として、z つの接近する光の分解を図 3.8 (b) に示す。分解能の 0.7 倍しか離れていない z つの光は分解できず、z 1 つの光として結像されている。一方、分解能の 1.4 倍だけ離れた光は分解できている。

3.4.2 円筒内の電磁波

半径 a の円筒の内部の電磁場を取り扱おう。円筒は直線的に無限に延びていると仮定する。その場合,円筒の中心を z 軸とする円筒座標系で取り扱うのが便利である。電磁波の角周波数を ω としたとき,電場 E はヘルムホルツの微分方程式:

$$(\nabla^2 + k^2)\boldsymbol{E} = 0,$$

を満足する。ただし, k は波数であり, c を電波の伝播速度したとき, $k \equiv \omega/c$ である。上に記述したヘルムホルツの数式には、円筒座標の仮定は取り込まれていない。

円筒内の電磁波は、円筒の軸方向に電場成分をもたない TE 波と、軸方向に磁場成分をもたない TM 波に分類される。ここでは、TM 波のみを取り扱うことにする。上記のヘルムホルツの微分方程式を円筒座標として書き換えると、電場のz軸成分は、

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2\right)E_z(r,\theta,z) = 0,$$
(3.27)

なる形で書くことができる。この部便方程式を特にあたり、電場 E_z が、

$$E_z(r,\theta,z) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_z^{(n)}(r) \cdot e^{-i\gamma z} e^{in\theta}, \qquad (3.28)$$

であると仮定する。この仮定は次の物理的考察によるものである。第一に,電磁波が円筒内を伝播するとした。伝播方向 (z 軸方向) の波数成分を γ とした。現時点で, γ は未知数である。第二に,z 軸周りの角度 θ について,電場は周期関数になるはずである。なぜなら, θ が 2π 増加すると,観測点は z 軸を 1 周し,もとの場所に戻るからである。そのため, θ に依存する成分はフーリエ級数の形になる。電場のうち,第 n 成分 $E_z^{(n)}(r)$ について微分方程式を書き直すと,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} + k_0^2\right) E_z^{(n)}(r) = 0, \tag{3.29}$$

となる。ただし, $k_0^2 \equiv k^2 - \gamma^2$ とした。この微分方程式は, $q \equiv k_0 r$ なる正規化半径を用いると, 微分方程式は,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{q}\frac{\partial}{\partial q} + 1 - \frac{n^2}{q^2}\right)E_z^{(n)}(q) = 0, \tag{3.30}$$

のように書き換えられる。この微分方程式はベッセルの微分方程式である。したがって、電場の第n成分は、ベッセル関数を用いて、

$$E_z^{(n)}(r) = A_n J_n(k_0 r),$$

と表現できる。ところで、前に定義したように k_0 は、 $k_0^2 = k^2 - \gamma^2$ であり、未知数を含むパラメータである。ここで、境界条件を用いて未知数を求めておこう。取り扱う境界条件は、円筒の表面 (r=a) で、 $E_z=0$ となる条件である。この条件を満たすには、r=a に対応するベッセル関数の変数 k_0a がベッセル関数の零点でなければならない。既にグラフなどで確認したようにベッセル関数の零点は無数に存在する。ここで、 $J_n(q)$ の第 m 番目の零点の位置を q_{nm} としよう。零点 q_{nm} のいくつかは、表 3.1^5 に示す値をとる。零点 q_{nm} を用いると、未知数 γ に対する条件は、

$$k_0^2 a^2 = (k^2 - \gamma^2) a^2 = q_{nm}^2,$$

となる。この境界条件から, $k_0=q_{nm}/a$ となる。つまり, k_0 は飛び飛びの値で無数に存在することを意味する。そのため, 電場の第n 成分は, 無数に存在する解の重ね合わせとして,

$$E_z^{(n)}(r) = \sum_{m=0}^{\infty} A_{nm} J_n(q_{nm}r/a),$$

 $^{^5}$ J. B. Arfken, H. B. Weber, "特殊関数," 権平健一郎, 神原武志, 小山直人 訳, 講談社, 基礎物理数学 Vol. 3, 第 4 版, p.52, 2001.

3.5. ノイマン関数 85

$n \backslash m$	1	2	3	4	5
0	2.4048	5.5201	8.6537	11.7915	14.9309
1	3.8317	7.0156	10.1735	13.3237	16.4706
2	5.1356	8.4172	11.6198	14.7960	17.9598
3	6.3802	9.7610	13.0152	16.2235	19.4094
4	7.5883	11.0647	14.3725	17.6160	20.8269
5	8.7715	12.3386	15.7002	18.9801	22.2178

表 3.1: ベッセル関数 $J_n(q)$ の零点 q_{nm}

と書くべきだろう。この解を (3.28) に代入すると, 円筒内部の電場の z 軸成分:

$$E_z(r,\theta,z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} A_{nm} J_n(q_{nm}r/a),$$

が得られる。ただし、展開係数 A_{nm} は電界の第 n 成分における、第 m モードの振幅を意味する。伝送工学の分野では、この成分は TM_{nm} モードと呼ばれる。

ただし、ベッセルの微分方程式の解は、ベッセル関数だけでなく、次節で導入するノイマン関数も含まれる。しかし、円筒内部の問題ではノイマン関数が不要である。ノイマン関数が不要である理由は、ノイマン関数を導入した際に述べることにする。

3.5 ノイマン関数

前の節で、2階微分方程式であるベッセルの方程式には2つの独立な解が存在することを述べた。さらに、整数次でなければ $J_{\mu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ が独立であることも説明した。しかし、次数が整数である場合、 $J_{-n}(x)=(-1)^nJ_n(x)$ が成立するため、次数の符号反転をしたベッセル関数が必ずしも独立とはならないことを示した。本節では、 $J_{\mu}(x)$ と独立な関数として、ノイマン関数を紹介する。

3.5.1 ノイマン関数の定義

第1種ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ と独立な関数は、様々な方法で生成が可能であるが、その中でも整数次の関数 $J_{n}(x)$ についても独立性が保証できる関数を生成しよう。その例として、

$$Y_{\nu}(x) = \frac{J_{\nu}(x) \cos \pi \nu - J_{-\nu}(x)}{\sin \pi \nu},$$
(3.31)

なる関数を考える。まず、次数 ν が整数でなければ、関数 $Y_{\nu}(x)$ は $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ の 1 次結合にすぎない 6 ため、 $J_{\nu}(x)$ と独立である。一方、次数が整数の場合、この定義だけでは分

⁶しかも, $J_{\nu}(x)$ に付随する係数がゼロにならない。

子と分母がともにゼロになるため, $Y_n(x)$ が不定値となる。それを回避するため, 整数次数n の場合.

$$Y_n(x) = \lim_{\nu \to n} Y_{\nu}(x) = \lim_{\nu \to n} \frac{J_{\nu}(x) \cos \pi \nu - J_{-\nu}(x)}{\sin \pi \nu},$$
 (3.32)

のように、極限値表現で関数を定義する。整数次を含め、上のように定義される関数を**ノイマン関数**、または、第2種ベッセル関数と呼ぶ。

整数次の定義式のように、分子と分母がともにゼロとなる数式の極限値には、ロピタルの定理を利用するのがよい。ロピタルの定理を用いると、整数次のノイマン関数は、

$$Y_n(x) = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu} - (-1)^n \frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n}, \tag{3.33}$$

のように計算できる。ここで、 $\partial/\partial\nu$ はベッセル関数の次数 ν を変数とみなし、 ν について偏微分するための演算子である。この整数次の第 2 種ベッセル関数 $Y_n(x)$ が $J_n(x)$ と独立であることは後に示すことにしよう。

3.5.2 級数展開表現

本節ではノイマン関数を計算する手法として、級数展開による表現を導出しよう。ただし、非整数次の $Y_{\nu}(x)$ は (3.31) によって計算できるので、整数次の $Y_{n}(x)$ のみを取り扱うことにする。

整数次のノイマン関数 $Y_n(x)$ を計算するには、極限表現 (3.33) を用いる。その定義式の右辺を計算するため、 $J_{\nu}(x)$ を次数 ν について偏微分すると、

$$\frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu} = \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{(-1)^m \psi(m+\nu+1)}{m! \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu} + J_{\nu}(x) \log \frac{x}{2} \right],$$

となる。なお, $\psi(x)$ は第1章で紹介したディガンマ関数と呼ばれる関数であり,

$$\psi(x) \equiv \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \log \Gamma(x),$$

のように定義される。つまり、ディガンマ関数はガンマ関数の対数微分である。ガンマ関数に関するワイエルシュトラスの無限乗積の表現:

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = \lim_{n \to \infty} \frac{x(x+1)\cdots(x+n)}{n^x n!},$$

より、ディガンマ関数 $\psi(x)$ は、

$$\psi(x) = \lim_{n \to \infty} \left(\log n - \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{x+k} \right),\,$$

3.5. ノイマン関数 87

のように表される。特に、変数xが整数の場合には、

$$\psi(m+1) = \lim_{n \to \infty} \left(\log n - \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{m+k+1} \right)$$
$$= \lim_{n \to \infty} \left(\log n - \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} + \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{k} \right) = \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{k} - \gamma,$$

が成立する。ただし, γ はオイラーの定数 (= 0.57721 . . .) である。整数変数のディガンマ 関数に注意しながら, 偏微分 $\partial J_{\nu}/\partial \nu$ を $\nu \to n$ の極限をとると,

$$\frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu}\bigg|_{\nu=n} = \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{(-1)^m H_{m+n}}{m! (m+n)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} + J_n(x) \log \frac{x}{2} \right],$$

が得られる。ここで, H_n は調和級数:

$$H_n \equiv \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n},$$

である。一方、負の次数のベッセル関数 $J_{-\nu}$ の偏微分は、正の実数と同様に計算でき、

$$\frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} = \sum_{m=0}^{\infty} \left[-\frac{(-1)^m \psi(m-\nu+1)}{m! \Gamma(m-\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-\nu} + J_{-\nu}(x) \log \frac{x}{2} \right],$$

となる。しかし、この偏微分について $\nu \to n$ の極限を評価するには多少の注意が必要である。注意すべき点は、実際に計算してみるとわかる。極限をとると、

$$\frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \bigg|_{\nu=n} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1} \psi(m-n+1)}{m! \Gamma(m-n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n} + J_{-n}(x) \log \frac{x}{2}$$

$$= \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^{m+1} \psi(m-n+1)}{m! \Gamma(m-n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n}$$

$$+ \sum_{m=n}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1} \psi(m-n+1)}{m! \Gamma(m-n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n} + (-1)^n J_n(x) \log \frac{x}{2}$$

$$= \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^{m+1} \psi(m-n+1)}{m! \Gamma(m-n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n}$$

$$+ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m-n+1} \psi(m+1)}{(m+n)! \Gamma(m+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} + (-1)^n J_n(x) \log \frac{x}{2},$$

のように計算できる。この数式の右辺では、 $J_{-n}(x)=(-1)^nJ_n(x)$ なる関係を利用した。上で述べた注意すべき点とは、ガンマ関数の変数がゼロ以下の整数のときに発散することである。そのため、この数式変形では総和の範囲が、ガンマ関数の変数がゼロ以下の整数となる範囲(右辺の第 1 項)と、それ以外の範囲(右辺の第 2 項)に分割した。さらに計算を進めるにあたり、負の値を変数とするディガンマ関数について考察しなければならない。

ここで、ガンマ関数の反射公式 $\Gamma(x)$ $\Gamma(1-x)=\pi/\sin\pi x$ を考えよう。その式の両辺の対数をとると、 $\log \Gamma(x)+\Gamma(1-x)=\log\pi-\log(\sin\pi x)$ が得られる。この関係式を微分すると、

$$\psi(1-x) = \psi(x) + \pi \cot \pi x,$$

が得られ、さらに両辺に $\Gamma(1-x)$ の逆数を乗じると、

$$\frac{\psi(1-x)}{\Gamma(1-x)} = \frac{\psi(x)\sin \pi x}{\pi} + \Gamma(x)\cos \pi x,$$

なる関係が得られる。特に、変数xが整数ならば、

$$\frac{\psi(1-n)}{\Gamma(1-n)} = (n-1)! (-1)^n,$$

が成立する。このディガンマ関数の性質に注意しながら数式変形すると、

$$\frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \bigg|_{\nu=n} = \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^{m+1} (n-m-1)!}{m!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m-n+1} H_m}{(m+n)! \, m!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} + \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^n J_n(x) \log \frac{x}{2},$$

が得られる。ここまでに計算した導関数を(3.33)に代入すると、

$$Y_n(x) = \frac{2}{\pi} \left(\log \frac{x}{2} + \gamma \right) J_n(x) - \frac{1}{\pi} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(n-m-1)!}{m!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2m-n} - \frac{1}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (H_m + H_{m+n})}{m! (m+n)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2m+n},$$
(3.34)

が得られる。これがノイマン関数の級数展開表現である。右辺第 2 項が有限項の総和であり,第 3 項が任意の実数 x に対して収束する無限級数であるので,(3.34) は任意の実数 x に対して収束する。この級数展開を用いてノイマンを計算すると,図 3.9 に示す曲線を描く。図に示すように,ノイマン関数 $Y_n(x)$ は x=0 で発散する。しかし,x が大きくなると,第 1 種ベッセル関数と同様に,振動する関数である。

導出した級数展開 (3.34) から, x が小さいときの $Y_n(x)$ の振る舞いを調べてみよう。ベッセル関数の級数展開表現 (3.8) によると, x が小さいとき $J_n(x) \simeq (x/2)^n/n!$ が成立するので, $Y_n(x)$ の振る舞いは, m=0 の項のみを抽出すると,

$$Y_n(x) \simeq \frac{2}{\pi} \left(\log \frac{x}{2} + \gamma \right) \frac{1}{n!} \left(\frac{x}{2} \right)^n - \frac{(n-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2} \right)^{-n} - \frac{H_n}{\pi \cdot n!} \left(\frac{x}{2} \right)^n$$
$$\simeq \frac{2}{\pi \cdot n!} \left(\frac{x}{2} \right)^n \log \frac{x}{2} - \frac{(n-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2} \right)^{-n} \qquad (n \neq 0),$$

3.5. ノイマン関数 89

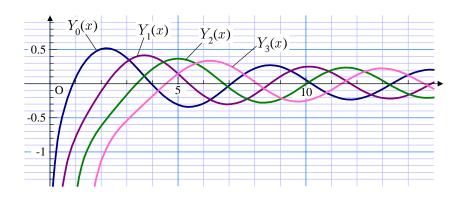


図 3.9: ノイマン関数

のように近似できる。この近似では、x が十分に小さければ $(x/2)^{-n}$ に比べ $(x/2)^n$ が無視できることを利用した。なお、この近似式は $n \neq 0$ のときに成立する。一方、n = 0 のとき、(3.34) の第 2 項がゼロであり、第 3 項の総和における m = 0 の項がゼロであるので、

$$Y_0(x) \simeq \frac{2}{\pi} \left(\log \frac{x}{2} + \gamma \right),$$

なる近似式が得られる。この結果から、x=0 の近傍で、 $Y_n(x)$ は対数関数の振る舞いをすることがわかる。この振る舞いが、ベッセル関数 $J_n(x)$ とは異なるので、任意の x について $Y_n(x)$ は $J_n(x)$ の定数倍で記述できない。したがって、 $Y_n(x)$ は $J_n(x)$ と独立な関数である。

3.5.3 ベッセルの微分方程式の解

続いて、ノイマン関数 $Y_{\nu}(x)$ がベッセルの微分方程式の解であることを示そう。まず、次数 ν が整数でなければ、 $Y_{\nu}(x)$ が $J_{\nu}(x)$ と $J_{-\nu}(x)$ の 1 次結合であるので明らかにベッセルの微分方程式の解である。

続いて、整数次数nのときについて、ノイマン関数がベッセル方程式の解になっていることを示そう。まず、ベッセル関数 $J_{+\nu}$ がベッセルの微分方程式の解であるので、

$$x^{2} \frac{\mathrm{d}^{2} J_{\pm \nu}}{\mathrm{d}x^{2}} + x \frac{\mathrm{d} J_{\pm \nu}}{\mathrm{d}x} + (x^{2} - \nu^{2}) J_{\pm \nu} = 0,$$

が成立する。この数式の両辺を ν で偏微分すると、

$$x^{2} \frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}x^{2}} \left(\frac{\partial J_{\pm \nu}}{\partial \nu} \right) + x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\frac{\partial J_{\pm \nu}}{\partial \nu} \right) + (x^{2} - \nu^{2}) \left(\frac{\partial J_{\pm \nu}}{\partial \nu} \right) = 2\nu J_{\pm \nu},$$

が得られる。この数式は、次数が ν と $-\nu$ の方程式をまとめて記述した方程式である。次数が ν の方程式から、次数が $-\nu$ の方程式を $\cos \pi \nu$ 倍した数式を減算して得られる差に対して $\nu \to n$ の極限をとると、

$$x^{2} \frac{\mathrm{d}^{2} Y_{n}}{\mathrm{d} x^{2}} + x \frac{\mathrm{d} Y_{n}}{\mathrm{d} x} + (x^{2} - \nu^{2}) Y_{n} = 2\nu \left(J_{n}(x) - (-1)^{n} J_{-n}(x) \right),$$

なる関係が導出できる。この関係式の右辺は、整数次のベッセル関数の関係によってゼロであることがわかる。したがって、整数次のノイマン関数もベッセルの微分方程式の解である。

これまでの考察によって、ベッセルの微分方程式の一般解は、ベッセル関数とノイマン 関数の1次結合:

$$f(x) = AJ_{\nu}(x) + BY_{\nu}(x),$$

であることが結論できる。展開係数 A と B は、問題に付随する境界条件に対応して決定される。

第 3.4.2 で取り扱った円筒内部の電磁場について、ノイマン関数が不要であることを述べた。それは、円筒中心 (r=0) におけるノイマン関数の振る舞いに起因する。既に確認したように、整数次のノイマン関数はゼロ近傍の変数では発散する。つまり、電磁場にノイマン関数の成分を含むと円筒の中央で場が発散するのである。物理の観測量として無限大を禁止する立場によって、ノイマン関数が円筒内部の電磁場の表現で不要だったのである。

3.5.4 ノイマン関数の漸化式

ノイマン関数もベッセル関数と同一の漸化式が成立する。本節ではその事実を示そう。 つまり、本節で証明する漸化式は、

$$Y_{\nu+1}(x) + Y_{\nu-1}(x) = \frac{2\nu}{r} Y_{\nu}(x), \tag{3.35a}$$

$$Y_{\nu+1}(x) - Y_{\nu-1}(x) = 2Y_{\nu}'(x), \tag{3.35b}$$

である。この公式があれば、ベッセル関数と同様に、低い次数の関数から高い次数の関数に変換できる。

まず, 次数 ν が整数でない場合を証明しよう。第 1 の漸化式について, ノイマン関数の定義式を用いると,

$$Y_{\nu+1}(x) + Y_{\nu-1}(x)$$

$$= \frac{(J_{\nu+1}(x) + J_{\nu-1}(x))\cos(\nu + 1)\pi - (-1)^{n+1}(J_{-\nu-1}(x) + J_{-\nu+1}(x))}{\sin(\nu + 1)\pi}$$

$$= \frac{2\nu}{x} \frac{-J_{\nu}(x)\cos\nu\pi + (-1)^{n}J_{-\nu}(x)}{-\sin\nu\pi} = \frac{2\nu}{x}Y_{\nu}(x),$$

のように証明できる。第1の漸化式も、同様に、ノイマン関数の定義式を用いると、

$$Y_{\nu+1}(x) - Y_{\nu-1}(x)$$

3.5. ノイマン関数 91

$$= \frac{(J_{\nu+1}(x) - J_{\nu-1}(x))\cos(\nu+1)\pi - (-1)^{n+1}(J_{-\nu-1}(x) - J_{-\nu+1}(x))}{\sin(\nu+1)\pi}$$
$$= \frac{-2J'_{\nu}(x)\cos\nu\pi + (-1)^nJ'_{-\nu}(x)}{-\sin\nu\pi} = 2Y'_{\nu}(x),$$

のようにただちに証明できる。この数式変形についても特に説明することはないだろう。

次数 ν が整数 $(\nu = n)$ の場合,極限による定義式を用いる。次数が整数でない場合に比べ、計算が多少、複雑になるが同様の計算で証明できる。まず、第1の漸化式は、

$$Y_{n}(x) + Y_{-n}(x)$$

$$= \left[\frac{\partial J_{\nu+1}}{\partial \nu} - (-1)^{n+1} \frac{\partial J_{-\nu-1}}{\partial \nu} + \frac{\partial J_{\nu-1}}{\partial \nu} - (-1)^{n-1} \frac{\partial J_{-\nu+1}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n}$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial \nu} (J_{\nu+1}(x) + J_{\nu-1}(x)) - (-1)^{n} \frac{\partial}{\partial \nu} (J_{-\nu-1}(x) + J_{-\nu+1}(x)) \right]_{\nu=n}$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{2\nu}{x} J_{\nu}(x) \right) - (-1)^{n} \frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{2\nu}{x} J_{-\nu}(x) \right) \right]_{\nu=n}$$

$$= \left[\frac{2}{x} J_{\nu}(x) + \frac{2\nu}{x} \frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu} - (-1)^{n} \frac{2}{x} J_{-\nu}(x) - (-1)^{n} \frac{2\nu}{x} \frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n}$$

$$= \frac{2n}{x} \left[\frac{\partial}{\partial \nu} (J_{\nu}(x) - (-1)^{n} J_{\nu}(x)) \right]_{\nu=n} = \frac{2n}{x} Y_{n}(x),$$

によって証明できる。第2の漸化式も同様に、極限による定義を用いれば、

$$Y_{n}(x) - Y_{-n}(x)$$

$$= \left[\frac{\partial J_{\nu+1}}{\partial \nu} - (-1)^{n+1} \frac{\partial J_{-\nu-1}}{\partial \nu} - \frac{\partial J_{\nu-1}}{\partial \nu} + (-1)^{n-1} \frac{\partial J_{-\nu+1}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n}$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial \nu} (J_{\nu+1}(x) - J_{\nu-1}(x)) + (-1)^{n} \frac{\partial}{\partial \nu} (J_{-\nu-1}(x) - J_{-\nu+1}(x)) \right]_{\nu=n}$$

$$= \left[\frac{\partial}{\partial \nu} 2J'_{\nu}(x) - (-1)^{n} \frac{\partial}{\partial \nu} 2J'_{-\nu}(x) \right]_{\nu=n}$$

$$= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[\frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu} - (-1)^{n} \frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n} = 2Y'_{n}(x),$$

のように証明できる。

さらに、ベッセル関数と同様、負の整数次のノイマン関数は、

$$Y_{-n}(x) = (-1)^n Y_n(x), (3.36)$$

なる関係で正の整数次のノイマン関数から計算できる。この関係式も,極限による定義式 を用いて.

$$Y_{-n}(x) = \left[\frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu} - (-1)^{-n} \frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=-n} = \left[-\frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} + (-1)^{-n} \frac{\partial J_{\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n}$$
$$= (-1)^n \left[\frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} - (-1)^n \frac{\partial J_{-\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n} = (-1)^n Y_n(x),$$

のように証明できる。

3.5.5 半奇整数次のノイマン関数

前に示したように、半奇整数次のベッセル関数 $J_{1/2}(x)$ などは三角関数を用いて簡潔な形で記述できる。ノイマン関数も半奇整数次の関数は三角関数を用いて簡潔に記述できる。その事実は、

$$Yn + 1/2(x) = \frac{J_{n+1/2}(x)\cos(n+1/2)\pi - J_{-n-1/2}(x)}{\sin(n+1/2)\pi} = (-1)^{n-1}J_{-n-1/2}(x),$$

によって容易に検証できる。前に計算した半奇整数次のベッセル関数を用いて、

$$Y_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x, \quad Y_{1/2}(x) = -\sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos x,$$
$$Y_{3/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\frac{\cos x}{x} - \sin x \right),$$

が得られる。これらの結果によると、 $\sqrt{2/\pi x}$ を包絡線と考えると、ノイマン関数はベッセル関数より位相が $\pi/2$ だけ遅れた関数である。

3.6 ハンケル関数

ベッセル微分方程式の解として, $J_{\nu}(x)$ と $Y_{\nu}(x)$ が独立な組合せとして習慣的に用いられる。これに対して,

$$H_{\nu}^{(1)}(x) = J_{\nu}(x) + iY_{\nu}(x),$$

$$H_{\nu}^{(2)}(x) = J_{\nu}(x) - iY_{\nu}(x),$$

を独立な組合せとすることがある。これらの関数は、それぞれ、第1種ハンケル関数と第2種ハンケル関数と呼ばれる。これまでに議論してきた $J_{\nu}(x)$ と $Y_{\nu}(x)$ が実数変数に対して

3.6. ハンケル関数 93

関数値が実数であったが、ハンケル関数は実数変数に対して一般的に複素数となる。その例として、ゼロ次の第 1 種ハンケル関数 $H_0^{(1)}(x)$ をグラフに描くと図 3.10 に示す曲線を描く。実部と虚部は、それぞれ、ベッセル関数 $J_0(x)$ とノイマン関数 $Y_0(x)$ である。このグラフには、参考のため、包絡線も描いておいた。変数 x の増加とともに、包絡線が小さくなっていくことが確認できる。後に示すが、この包絡線の大きさは漸近的に $x^{1/2}$ に反比例して減少する。また、このグラフを見ると、ベッセル関数が三角関数の余弦関数に、ノイマン関数が正弦関数に相当する対応があるようである。

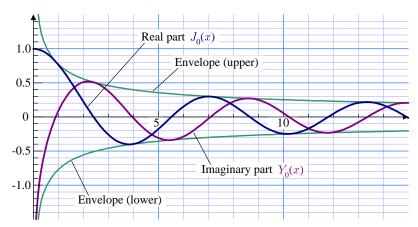


図 3.10: ゼロ次の第 1 種ハンケル関数 $H_0^{(1)}(x)$

物理学における波動解析の分野では、ベッセル関数の解として、むしろ、ハンケル関数を使用することが多い。その理由は、第1種ハンケル関数が-x方向に伝播する波動、第2種ハンケル関数が+x方向に伝播する波動に相当するからである。その性質はハンケル関数の漸近的な振る舞いを調べると明らかになる。

3.6.1 半奇整数次のハンケル関数

既に見たように、ベッセル関数とノイマン関数は半奇整数次では三角関数を用いて簡潔に厳密な関数表記が可能である。ハンケル関数は $H_{\nu}^{(1)}(x) = J_{\nu}(x) + iY_{\nu}(x)$ のように定義されているので、やはり、半奇整数次には厳密な関数表記が可能である。その例をいくつか記述すると、

$$\begin{split} H_{-1/2}^{(1)}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \, e^{ix}, \\ H_{1/2}^{(1)}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \, e^{i(x-\pi/2)}, \\ H_{3/2}^{(1)}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left(\frac{e^{i(x-\pi/2)}}{x} - e^{ix} \right), \end{split}$$

のようになる。

3.7 変形ベッセル関数

これまでに説明してきたベッセル関数とノイマン関数はベッセルの微分方程式の解である。ベッセルの微分方程式は、ヘルムホルツの波動方程式 $(\nabla^2 + k^2)\psi = 0$ を、円筒座標系で変数分離することによって得られる。ヘルムホルツの微分方程式に類似した微分方程式 $(\nabla^2 - k^2)\psi = 0$ は拡散方程式と呼ばれる。この拡散方程式を円筒座標系で変数分離するとベッセルの微分方程式に類似した形態の微分方程式が得られる。新たに得られた微分方程式は変形ベッセル微分方程式と呼ばれる。その方程式の解として、変形ベッセル関数を導入する。

3.7.1 変形ベッセル関数

本節の冒頭で述べたように、変形ベッセル微分方程式は拡散方程式 $(\nabla^2 - k^2)\psi = 0$ を円 筒座標系で変数分離することによって得られる。その導出はベクトル解析の公式を用いればよいとして、結果のみを書くと、

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} - \left(1 + \frac{\nu^2}{x^2}\right) f(x) = 0,$$

が得られる変形ベッセル微分方程式である。ベッセル微分方程式と同様に、この方程式も独立な解が 2 つあるはずである。そこで、変形ベッセル関数の解を $I_{\nu}(x)$ 、 $K_{\nu}(x)$ と書くことにしよう。

変形ベッセル関数の解は、変数を複素数に拡張すれば容易に見つけることができる。変数xをizとすればよいのだ。その置き換えによって変形ベッセル微分方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{z} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) f(iz) = 0,$$

なるベッセル微分方程式に書き換えられる。この性質に基づき, 解の一方を $I_{\nu}(x) \equiv i^{-\nu}J_{\nu}(x)$ のように定義しよう。すると, 変形ベッセル関数 $I_{\nu}(x)$ は,

$$I_{\nu}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu}, \tag{3.37}$$

のように級数展開できる。なお、定義に用いた因数 $i^{-\nu}$ は、実数の変数に対して関数が実数になるように設けられている。この級数展開は、収束半径が無限大である。この級数に

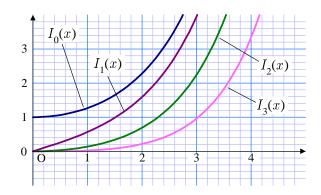


図 3.11: 第1種変形ベッセル関数

したがって計算すると, 第 1 種変形ベッセル関数 $I_{\nu}(x)$ は図 3.11 に示す曲線を描く関数であることがわかる。 負の次数における関数 $I_{-\nu}(x)$ は,

$$I_{-\nu}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m-\nu+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-\nu},$$

となる。次数が整数でなければ $I_{\nu}(x)$ と $I_{-\nu}(x)$ が互いに独立であるのだが、整数次数の場合、互いに独立とはならない。その事実は、

$$I_{-n}(x) = \sum_{m=0}^{n-1} \frac{1}{m! \Gamma(m-n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-\nu} + \sum_{m=n}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m-n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-n}$$
$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(m+n+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+n} = I_n(x),$$

によって証明される。この数式変形において、第1行目から第2行目は次の2つの操作を施した。第一に、ゼロ以下の整数変数について、 $1/\Gamma(x)$ がゼロであること。それによって、第1行目の第1項がゼロになる。第二に、添え字を $m \mapsto m + n$ のように置き換えた。その結果、 $I_{-n}(x) = I_n(x)$ なる関係が得られた。

既に示したようにベッセル関数は漸化式 (3.15) と (3.16) を満足する。変形ベッセル関数 も同様の漸化式を満足するので、その漸化式を導出しよう。まず、漸化式 (3.15) について、変数を ix とすると、漸化式は、

$$J_{\nu-1}(ix) + J_{\nu+1}(ix) = \frac{2\nu}{ix} J_{\nu},$$

と書くことができる。この数式の両辺に $i^{-\nu+1}$ を乗じると,

$$i^{-\nu+1}J_{\nu-1}(ix) + i^{-\nu+1}J_{\nu+1}(ix) = \frac{2\nu}{x}i^{-\nu}J_{\nu},$$

と書くことができる。ここで、変形ベッセル関数が $I_{\nu}(x) \equiv i^{-\nu}J_{\nu}(ix)$ のように定義されていることに注意すると、変形ベッセル関数の漸化式:

$$I_{\nu-1}(x) - I_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} I_{\nu}(x), \tag{3.38}$$

が得られる。一方, 漸化式 (3.16) について同様の数式変形を適用すると,

$$I_{\nu-1}(x) + I_{\nu+1}(x) = 2I_{\nu}'(x), \tag{3.39}$$

が得られる。これらの漸化式を繰り返し適用すると、次数の低い関数から次数の高い変形 ベッセル関数を求めることができるのである。さらに、得られた 2 つの漸化式の和に x^{ν} を乗じると、

$$x^{\nu}I_{\nu-1}(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^{\nu}I_{\nu}(x),\tag{3.40}$$

が得られる。これはベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ における公式と同一の形である。

変形ベッセル微分方程式も 2 つの独立な解をもつ方程式であり、非整数次では $I_{\nu}(x)$ と $I_{-\nu}(x)$ が互いに独立な 2 つの解である。しかし、整数次では既に示したように $I_n(x)=I_{-n}(x)$ が成立するので、新たに独立な関数を定義したほうがよい。様々な文献では、 $I_{\nu}(x)$ と独立な関数として、

$$K_{\nu}(x) \equiv \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_{\nu}(x)}{\sin \pi \nu},$$
 (3.41)

が定義される。ここで, $I_{\nu}(x) = i^{-\nu}J_{\nu}(ix)$ を代入すると,

$$K_{\nu}(x) = \frac{\pi}{2} \frac{i^{\nu} J_{-\nu}(ix) - i^{-\nu} J_{\nu}(ix)}{\sin \pi \nu} = \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} \frac{i^{-2\nu+1} J_{\nu}(ix) - i J_{-\nu}(ix)}{\sin \pi \nu}$$

$$= \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} \frac{e^{i(-\pi\nu+\pi/2)} J_{\nu}(ix) - i J_{-\nu}(ix)}{\sin \pi \nu}$$

$$= \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} \frac{J_{\nu}(ix) \sin \pi\nu + i J_{\nu}(ix) \cos \pi\nu - i J_{-\nu}(ix)}{\sin \pi\nu}$$

$$= \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} \left(J_{\nu} + i Y_{\nu}(ix)\right) = \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} H_{\nu}^{(1)}(ix),$$

のように変形できるので、変形ベッセル関数 $K_{\nu}(x)$ は第一種ハンケル関数に対応する関数である。この関係式によって、2つの変形ベッセル関数 $I_{\nu}(x)$ と $K_{\nu}(x)$ は互いに独立な関数であることがわかる。

第2種変形ベッセル関数は非整数次であれば定義式 (3.41) で計算することができる。しかし、整数次の場合、分母と分子がともにゼロとなるのでその値が不定となる。そこで、ノイマン関数と同様、整数次の第2種変形ベッセル関数は、

$$K_n(x) \equiv \lim_{n \to n} K_{\nu}(x),$$

のように極限を用いて定義する。この極限値はロピタルの定理を利用すれば計算でき,

$$K_n(x) = \frac{(-1)^n}{2} \left[\frac{\partial I_{-\nu}}{\partial \nu} - \frac{\partial I_{\nu}}{\partial \nu} \right]_{\nu=n}, \tag{3.42}$$

なる関係式が得られる。具体的な計算過程が $Y_n(x)$ を計算する過程とほぼ同じであるので 省略し、結果のみを書くと、第2種変形ベッセル関数は、

$$K_n(x) = \frac{(-1)^n}{2} \left[\sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^{n-m} (n-m-1)!}{m!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2m-n} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m + H_{m+n}}{m! (m+n)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2m+n} - 2 \left(\log \frac{x}{2} + \gamma \right) I_{\nu}(x) \right],$$
(3.43)

なる級数によって計算できる。なお、 H_n は調和級数、すなわち、 $1+1/2+\cdots+1/n$ である。また、 γ はオイラー定数である。この級数によって計算すると、図 3.12 のような急激に減少する関数形が得られる。 得られた級数展開から十分に小さな x に対する第 2 種変

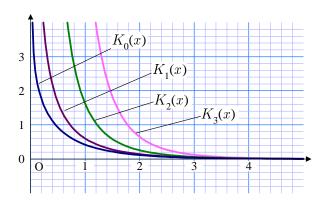


図 3.12: 第 2 種変形ベッセル関数

形ベッセル関数の振る舞いを取り出すと、

$$K_0(x) \simeq -\log \frac{x}{2} - \gamma, \qquad K_n(x) \simeq \frac{(n-1)!}{2} \left(\frac{x}{2}\right)^{-n},$$

が得られる。つまり、変数xが十分に小さい範囲では、ゼロ次の第2種変形ベッセル関数は対数関数のように振舞う。

3.7.2 第1種変形ベッセル関数の母関数

ベッセル関数と同様に、第1種変形ベッセル関数も母関数を定義すると性質を調べる上で 便利である。第1種変形ベッセル関数の母関数は、ベッセル関数の母関数に類似した関数:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(x) t^n = e^{(x/2)(t+1/t)}, \qquad (3.44)$$

である。つまり, 第 1 種変形ベッセル関数 $I_n(x)$ は, 関数 $e^{(x/2)(t+1/t)}$ をローラン展開したときの n 次の展開係数である。

第 1 種変形ベッセル関数 $I_n(x)$ の母関数が (3.44) であることは、ベッセル関数 $J_n(x)$ の母関数が $e^{(x/2)(t-1/t)}$ であることを利用すれば証明できる。変数 x を ix に置き換えると、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(ix) t^n = e^{(ix/2)(t+1/t)}$$

が成立するが、この数式の変数を $t \equiv u/i$ とすると、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} i^{-n} J_n(ix) u^n = e^{(ix/2)(u-1/u)/i} = e^{(x/2)(u-1/u)},$$

のように計算できる。ここで, $I_n(x) \equiv i^{-n}J_n(x)$ であることに注意すると, (3.44) が導出できる。 \P

ここで紹介した変形ベッセル関数の母関数を利用すると,変形ベッセル関数に関する興味深い性質を得ることができる。その例として,

$$I_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} I_n = e^x,$$
 (3.45a)

$$I_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n I_n = e^{-x},$$
 (3.45b)

$$I_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n I_{2n} = 1,$$
 (3.45c)

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n I_{2n-1} = 0, \tag{3.45d}$$

3.7.3 積分表示

変形ベッセル関数もベッセル関数と同様に積分表示を導くことができる。積分表示として,シュレーフリの積分表示とポアソンの積分表示をつくることができるのはベッセル関数と同様である。

シュレーフリの積分表示 変形ベッセル関数 $I_n(x)$ の母関数を利用すると,整数次の変形ベッセル関数に関する積分表示が得られる。変形ベッセル関数の母関数は既に示したように,

$$I_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{(x/2)(t+1/t)} t^{-n-1} dt, \qquad (3.46)$$

である。積分路 C は反時計回りに原点 t=0 を一周する経路である。この性質は被積分関数の -1 次の係数が $I_n(x)$ であることを利用している。

この性質は整数でない次数 ν に対しても成立させることができる。つまり、関係式:

$$I_{\nu}(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C} e^{(x/2)(t+1/t)} t^{-\nu-1} dt, \qquad (3.47)$$

が満足できるように積分路 C を選ぶことができる。その積分路は始点と終点が負の実軸上の無限遠であり、原点 t=0 を反時計回りに周回し、負の実軸上の無限遠に戻る経路である。この積分路は、ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ を与えるシュレーフリ積分の経路 (図 3.5) と同一である。

第1種変形ベッセル関数 $I_{\nu}(x)$ の積分表示が正しいことは, $J_{\nu}(x)$ の場合と同様に証明できる。積分表示 (3.47) を変形ベッセル微分方程式に代入すると,

$$\begin{split} x^2 I_{\nu}''(x) + x I_{\nu}' - (x^2 + \nu^2) I_{\nu}(x) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_C \left[\frac{x^2}{4} \left(t - \frac{1}{t} \right)^2 t^{-\nu - 1} + \frac{x}{2} \left(t + \frac{1}{t} \right) t^{-\nu - 1} - \nu^2 t^{\nu - 1} \right] e^{(x/2)(t + 1/t)} dt \\ &= \frac{1}{2\pi i} \left\{ e^{(x/2)(t + 1/t)} t^{-\nu} \left[\nu + \frac{x}{2} \left(\frac{x}{t} - \frac{1}{t} \right) \right] \right\}_{t = t_0}^{t_1}, \end{split}$$

のように計算できる。詳しい計算過程は省略したが、ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ に関する計算と同様である。また、 t_0 と t_1 は積分路の始点と終点である。始点と終点をともに負の実軸上の無限遠にするとこの積分はゼロとなるので、積分 (3.47) が変形ベッセル微分方程式を満足することが示される。なお、始点と終点を負の実軸上の無限遠にするとは、単純に $t_0,t_1\to-\infty$ とするのではない。正しくは、 $t_0\equiv Re^{-\pi i},\,t_1\equiv Re^{\pi i}$ と定義し、 $R\to\infty$ と設定するのである。具体的に積分路を設定して計算すると、 $I_{\nu}(x)$ は、

$$I_{\nu}(x) = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\pi} e^{x \cos \varphi} \cos \nu \varphi \, d\varphi - \frac{\sin \nu \pi}{\pi} \int_{0}^{\infty} e^{-\nu \xi - x \cosh \xi} \, d\xi, \tag{3.48}$$

なる積分で計算できることが導かれる。なお、右辺の第 1 項は原点を中心とする半径 1 の積分路での積分である。一方、第 2 項は負の実軸を無限遠から -1 までたどり、-1 から負の無限遠に引き返す積分路で積分した結果である。この積分表示から、

$$I_{-\nu}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{x \cos \varphi} \cos \nu \varphi \, d\varphi + \frac{\sin \nu \pi}{\pi} \int_0^{\infty} e^{\nu \xi - x \cosh \xi} \, d\xi,$$

であることが容易にわかるので、第2種変形ベッセル関数の定義式を適用すると、

$$K_{\nu}(x) = \int_{0}^{\infty} e^{-x \cosh \xi} \cosh \nu \xi \, \mathrm{d}\xi, \tag{3.49}$$

がただちに導かれる。

ポアソンの積分表示 変形ベッセル関数 $I_{\nu}(x)$ はポアソンの積分表示で表現することが可能である。ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ のポアソンの積分表示のように, $I_{\nu}(x)$ の級数展開から導出することができる。しかし, $J_{\nu}(x)$ のポアソンの積分表示に $I_{\nu} \equiv e^{-\pi i \nu/2} J_{\nu}(x)$ を代入することによって $I_{\nu}(x)$ のポアソンの積分表示を得ることができる。その処方箋にしたがうと,

$$I_{\nu}(x) = \frac{1}{\pi^{1/2} \Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{0}^{\pi} e^{\pm x \cos \varphi} \sin^{2\nu} \varphi \, \mathrm{d}\varphi$$
 (3.50a)

$$= \frac{1}{\pi^{1/2}\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{-1}^{1} e^{\pm ixt} \left(1 - t^{2}\right)^{\nu - 1/2} dt, \tag{3.50b}$$

なる結果が容易に得られる。なお、この関係式は $\nu > -1/2$ において成立する。

第2種変形ベッセル関数についても同様の積分表現を導出することができる。第1種変形ベッセル関数 $I_{\nu}(x)$ に比べ、導出過程が長いため、先に結果を示しておこう。第2種変形ベッセル関数の積分表現は、

$$K_{\nu}(x) = \frac{\pi^{1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{1}^{\infty} e^{-xt} (t^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dt, \tag{3.51}$$

となる。この積分表現は第 1 種ベッセル関数の積分表現に類似しているが、積分範囲が $[1,\infty]$ であることが第 1 種変形ベッセル関数と異なる。

積分表現 (3.51) を導出するため、関数 $e^{-xt}(t^2-1)^{\nu-1/2}$ を t について積分しよう。積分は t を複素数とみなし、正の実軸上の無限遠から始まり、原点を反時計回りに 1 回だけ周り、正の実軸上の無限へ戻る経路 C に沿って実行する。なお、積分路 C は $t=\pm 1$ も取り囲むように選択されている。その積分は、

$$\int_{C} e^{-xt} (t^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dt = \int_{C} e^{-xt} t^{2\nu - 1} \left(1 - \frac{1}{t^{2}} \right)^{\nu - 1/2} dt
= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m} \Gamma(\nu + 1/2)}{m! \Gamma(\nu - m + 1/2)} \int_{C} e^{-xt} t^{2\nu - 2m - 1} dt
= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1/2 - \nu + m)}{m! \Gamma(1/2 - \nu)} \int_{C} e^{-xt} t^{2\nu - 2m - 1} dt,$$
(3.52)

のように計算される。第 2 行目への数式変形は, $1-1/t^2$ のべき乗を二項定理によって展開することによって実行されている。第 3 行目への数式変形には,ガンマ関数の反射公式 $\Gamma(x)$ $\Gamma(1-x)=\pi/\sin\pi x$ を利用した。

積分(3.52)の実行を進めるにあたり、ガンマ関数のハンケル積分表示:

$$\Gamma(x) = -\frac{1}{2i\sin \pi x} \int_C e^{-t} (-t)^{x-1} dt,$$

に注目しよう。この積分表示を利用すると、(3.52)に含まれる積分は、

$$\int_C e^{-xt} t^{2\nu - 2m - 1} dt = \int_C \frac{e^{-u} u^{2\nu - 2m - 1}}{x^{2\nu - 2m}} du$$

$$= -\frac{2i (-1)^{2\nu - 1} \sin 2\pi \nu}{x^{2\nu - 2m}} \Gamma(2\nu - 2m) = \frac{2\pi i (-1)^{2\nu} x^{2m - 2\nu}}{\Gamma(1 - 2\nu + 2m)},$$

のように計算できる。ここでも、右辺を得るためにガンマ関数の反射公式を用いた。この結果を(3.52)に代入すると、

RHD of (3.52)
$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1/2 - \nu + m)}{m! \Gamma(1/2 - \nu)} \frac{2\pi i (-1)^{2\nu} x^{2m-2\nu}}{\Gamma(1 - 2\nu + 2m)}$$

$$= \frac{2\pi i e^{-2\pi i \nu}}{\Gamma(1/2 - \nu)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1/2 - \nu + k)}{m! \Gamma(1 - 2\nu + 2m)} x^{2m-2\nu}$$

$$= \frac{2\pi i e^{-2\pi i \nu}}{\Gamma(1/2 - \nu)} \frac{\pi^{1/2}}{m! \Gamma(1 - \nu + m)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m-2\nu}$$

$$= \frac{2\pi i e^{-2\pi i \nu}}{\Gamma(1/2 - \nu)} \frac{2^{\nu} \pi^{1/2}}{x^{\nu}} I_{-\nu}(x),$$

のように数式変形できる。なお、第3行目への数式変形には、ガンマ関数の倍数公式:

$$\Gamma(x) \Gamma(z + 1/2) = \sqrt{\pi} 2^{1-2x} \Gamma(2x),$$

を利用した。さらに、第3行目が変形ベッセル関数 $I_{-\nu}(x)$ の級数展開であることに注意すると、第4行目が得られる。ここまでの結果を用いると、

$$I_{-\nu}(x) = \frac{e^{-2\pi i\nu} \Gamma(1/2 - \nu)}{2\pi^{3/2} i} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{C} e^{-xt} (t^2 - 1)^{\nu - 1/2} dt, \tag{3.53}$$

なる関係式が得られる。ここで、積分路 C を図 3.13 (a) のようにとってみよう。まず、正の軸軸上の無限円から実軸に沿って t=1 までたどり (経路 C_1)、無限小の半径で t=1 を半回転だけ回り、実軸に沿って t=-1 までたどる (経路 C_2)。続いて、無限小の半径で t=-1 を 1 回転だけ回り、実軸に沿って t=1 移動し (経路 C_3)、その後、t=1 を半回転だけ回り、実軸上を正の無限遠に向けて戻る (経路 C_4)。次数に関するパラメータが $\nu>1/2$ であれば、被積分関数は $t=\pm1$ で正則であるから、無限小の半径で周回する積分はゼロである。そのため、積分路のうち、直線部分だけについて積分を計算すれば経路 C に沿った積分を計算できる。しかし、被積分関数に $(t^2-1)^{\nu-1/2}$ なる因数が含まれるため、積分計算には注

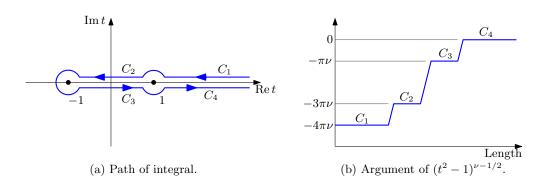


図 3.13: 変形ベッセル関数の積分表現のための積分路と被積分関数の偏角

意が必要である。注意すべきことは, $(t^2-1)^{\nu-1/2}$ の偏角 7 である。その偏角は,注目する 因数が $(t-1)^{\nu-1/2}$ (t+1) $^{\nu-1/2}$ と書けることから,t=1 中心で見た偏角と t=-1 中心で見た偏角との和になっている。例えば,積分路の終端での偏角を基準に考えると,積分路 の始点での偏角は $-4\pi\nu$ となる。積分路に沿って偏角の変化をプロットすると図 3.13 (b) のように描かれる。偏角の変化に注意して積分を計算すると,

$$J_{-\nu}(x) = \frac{e^{2\pi i\nu} \Gamma(1/2 - \nu)}{2\pi^{3/2} i} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \left[(1 - e^{-4\pi i\nu}) \int_{1}^{\infty} e^{xt} (t^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dt + i \left(e^{-\pi i\nu} + e^{-3\pi i\nu}\right) \int_{-1}^{1} e^{-xt} (1 - t^{2})^{\nu - 1/2} dt \right]$$

$$= \frac{\Gamma(1/2 - \nu)}{\pi^{3/2}} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \left[\sin 2\pi \nu \int_{1}^{\infty} e^{-xt} (t^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dt + \cos \pi \nu \int_{-1}^{1} e^{-xt} (1 - t^{2})^{\nu - 1/2} dt \right], \tag{3.54}$$

なる積分表現が得られる。一方、既に得られた $I_{\nu}(x)$ の積分表現は、

$$I_{\nu}(x) = \frac{1}{\pi^{1/2} \Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{-1}^{1} e^{-xt} (1 - t^{2})^{\nu - 1/2} dt$$

$$= \frac{\Gamma(1/2 - \nu) \sin(\nu + 1/2)\pi}{\pi^{3/2}} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{-1}^{1} e^{-xt} (1 - t^{2})^{\nu - 1/2} dt$$

$$= \frac{\Gamma(1/2 - \nu) \cos \nu \pi}{\pi^{3/2}} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{-1}^{1} e^{-xt} (1 - t^{2})^{\nu - 1/2} dt$$

のように変形できる。第2行目への変形はガンマ関数の反射公式を用いている。この数式 変形によって、

$$I_{-\nu}(x) - I_{\nu}(x) = \frac{\Gamma(1/2 - \nu)}{\pi^{3/2}} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \sin 2\pi\nu \int_{1}^{\infty} e^{-xt} (t^2 - 1)^{\nu - 1/2} dt,$$

 $^{^7}$ 複素数 $z\equiv re^{i\theta}$ について, θ を偏角と呼ぶ。整数でない指数 ν によるべき乗 z^{ν} に関して, 偏角を注意する必要である。なぜなら, z を原点を回る経路に沿って移動して元の場所に戻ったとき, $z=re^{i(\theta+2\pi)}=re^{i\theta}$ は同じ値に戻るが, $z^{\nu}=r^{\nu}e^{i\nu(\theta+2\pi)}$ は同じ値に戻らないからである。

が容易に得られる。この結果を第2種変形ベッセル関数の定義式に代入すると、

$$K_{\nu}(x) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_{\nu}(x)}{\sin \pi \nu}$$

$$= \frac{\pi}{2} \frac{2\Gamma(1/2 - \nu) \cos \pi \nu}{\pi^{3/2}} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{1}^{\infty} e^{-xt} (t^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dt$$

$$= \frac{\pi^{1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{\nu} \int_{1}^{\infty} e^{-xt} (t^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dt,$$

が得られ、積分表現 (3.51) が証明できた。なお、第3行目への数式変形にはガンマ関数の反射公式を用いた。

3.7.4 変形ベッセル関数の応用

変形ベッセル関数の応用例として, **仲上-ライス分布**を取り扱おう。仲上-ライス分布とは, 雑音の中に正弦波信号が重畳したときに観測される信号レベル (雑音と正弦波の和) に対する確率密度を表す分布である。

まず,取り扱う正弦波を $s(t)=Ae^{i\omega_0t}$ としよう。ここで,A は振幅を表す定数, ω_0 は信号の角周波数である。その信号に重畳される雑音は, $n(t)=\nu(t)\,e^{i\omega_0t}$ とする。ここで,なぜ雑音に因子 $e^{i\omega_0t}$ が付加されているか疑問に思うかもしれない。実は, $\nu(t)$ が白色雑音であれば, $n(t)=\nu(t)\,e^{i\omega_0t}$ も白色雑音である。白色雑音に因子 $e^{i\omega_0t}$ を乗じても,白色雑音が得られることは本項の最後で証明する。つまり,ここで想定する雑音 n(t) は単に白色雑音であるが、後の計算の便宜のため、因子 $e^{i\omega_0t}$ を乗じているのだ。

本項では信号を複素関数 $Ae^{i\omega_0t}$ として取り扱うので、雑音も複素関数としておく。つまり、 $\nu(t)\equiv\xi(t)+i\eta(t)$ のように書ける。ここで、 $\xi(t)$ と $\eta(t)$ はともに白色雑音を表す実関数である。また、これら雑音関数が様々な周波数の正弦波の和であると仮定すると、中心極限定理によって、 $\xi(t)$ と $\eta(t)$ は正規分布にしたがう乱数となる。それでは、 $\xi(t)$ と $\eta(t)$ の標準偏差をともに σ としておこう。まず、雑音 n(t) の振幅 $|n(t)|=\sqrt{\xi(t)^2+\eta(t)^2}$ に対する確率密度を述べておく。振幅 |n(t)| は、平均値ゼロで標準偏差 σ の正規分布にしたがう 2 つの確率変数の自乗和の平方根なので、レイリー分布にしたがう。つまり、振幅 |n(t)|=v となる確率分布は、

$$p_n(V) = \frac{v}{\sigma^2} e^{-v^2/2\sigma^2},$$

となるのだ。その雑音に正弦波 $Ae^{i\omega_0t}$ が重畳されたときにその確率分布がどうなるか、というのが本項で取り扱う問題である。

雑音の実部 $\xi(t)$ と虚部 $\eta(t)$ を極座標に変換し,

$$\xi(t) \equiv v(t) \cos \theta, \qquad \eta(t) \equiv v(t) \sin \theta,$$

と書くことにしよう。これは, $\nu(t)\equiv v(t)\,e^{i\theta(t)}$ と書くことと同じ意味である。図で表現するなら, 図 3.14 (a) を考えればよいだろう。ここで, 確率密度関数を v と θ の関数として書くと,

$$p_n(v,\theta) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-v^2/2\sigma^2},$$

となるはずである。この確率密度は、座標 $[v,\theta]$ における単位面積あたりの雑音の存在確率を表している。当然、この確率密度に線素 r d θ を乗じて、図 3.14 (a) の円弧 C に沿って周回積分すればレイリー分布の確率密度関数が得られる。

振幅 A の正弦波に雑音が重畳したとき、図 3.14 (b) のような複素平面におけるベクトル加算を考えればよい。図の \overrightarrow{OQ} が信号ベクトル、 \overrightarrow{QP} が雑音である。観測される信号はそれらの和であるので \overrightarrow{OP} である。 信号と観測値の位相差を φ , 信号と雑音の位相差を θ と

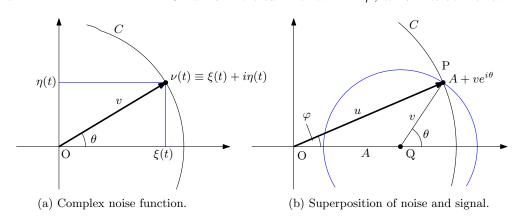


図 3.14: 複素平面における雑音と信号の表示

すれば、観測される信号は $ue^{i\varphi}$ 、雑音は $ve^{i\theta}$ と表される。ただし、uとvは、それぞれ、観測値と雑音の振幅である。そのとき、観測値と雑音の間には、

$$v^{2} = A^{2} + u^{2} - 2Au\cos\varphi, \quad \tan\theta = \frac{u\sin\varphi}{A + u\cos\varphi},$$

なる関係がある。この $[v,\theta]$ と $[u,\varphi]$ の関係式を確率密度関数に代入すれば, 先ほどのレイリー分布の確率密度関数 $p(v,\theta)$ を, 信号が重畳したときの関数:

$$p(u,\varphi) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{A^2 + u^2 - 2Au\cos\varphi}{2\sigma^2}\right),\,$$

が得られる。この確率密度関数に線素 $u\,\mathrm{d}\varphi$ を乗じて、図 3.14 (b) の円弧 C に沿って周回積分すると、振幅 A の正弦波と雑音が重畳したときの観測信号の振幅が u となる確率分布関数 p(u) が得られる。実際に計算してみると、

$$p(u) = \frac{u}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{A^2 + u^2}{2\sigma^2}\right) \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left(\frac{Au\cos\varphi}{\sigma^2}\right) d\varphi$$
$$= \frac{u}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{A^2 + u^2}{2\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{Au}{\sigma^2}\right),$$

が得られる。なお、この計算には変形ベッセル関数の積分表現 (3.48) を利用した。この確率密度関数にしたがう確率分布は仲上-ライス分布と呼ばれる。仲上ライス分布の確率密度関数は、図 3.15 に示す曲線を描く。図には、いくつかの信号振幅を想定した確率密度をプロットしている。図に記載した S/N とは、信号と雑音の振幅の自乗 (電力) の比率である。信号の振幅は既に述べたように A であり、雑音の振幅は実部と虚部が、それぞれ、 σ を標準偏差とするので $\sqrt{2}\sigma$ である。したがって、S/N は $A^2/2\sigma^2$ である。 まず、雑音しか存

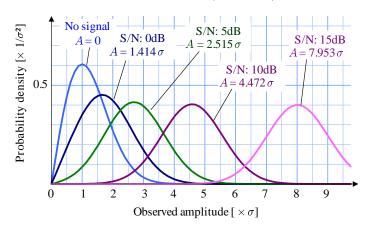


図 3.15: 仲上-ライス分布の確率密度関数

在しない場合, 確率分布はレイリー分布にしたがう。信号が大きくなるとレイリー分布の 形状から変化し, 確率分布のピークがグラフの右側に推移する。

白色雑音に関する考察 仲上-ライス分布の導出において, 白色雑音 $\nu(t)$ に因子 $e^{i\omega_0t}$ を乗じた結果も白色雑音であることを述べた。その事実を証明しよう。白色雑音 $\nu(t)$ は, フーリエ変換による表現:

$$\nu(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} N(\omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

が可能である。ここで, $N(\omega)$ は $\nu(t)$ のフーリエ変換である。フーリエ変換 $N(\omega)$ はあらゆる周波数にわたって一定の振幅をもつ白色雑音である。上の数式に因子 $e^{i\omega_0t}$ を乗じると,

$$n(t) \equiv \nu(t) e^{i\omega_0 t} = \frac{e^{i\omega_0 t}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} N(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} N(\omega) e^{i(\omega + \omega_0)t} d\omega$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} N(\omega - \omega_0) e^{i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{N}(\omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

のように計算できる。ここで、 $\tilde{N}(\omega) \equiv N(\omega-\omega_0)$ とおいた。フーリエ変換 $\tilde{N}(\omega)$ があらゆる周波数にわたり一定の振幅をもつ白色雑音であるので、その逆フーリエ変換となる n(t) も白色雑音である。したがって、白色雑音 $\nu(t)$ に因子 $e^{i\omega_0 t}$ を乗じて得られる関数 $n(t) \equiv \nu(t)\,e^{i\omega_0 t}$ も白色雑音である。¶

3.8 漸近展開

物理学の分野では、得られた微分方程式の解が大域的にどのような振る舞いをするかが 興味の対象となることが多くある。その大域的な振る舞いとは、無限遠での振る舞いであ る。無限遠での振る舞いを調べるには、関数の漸近展開が得られると便利である。本節で は、ベッセル関数の漸近的な性質を調べる。

3.8.1 第2種変形ベッセル関数

ベッセル関数の漸近展開を得るには、第2種変形ベッセル関数から取り掛かるのがよい。 漸近展開を特定する目的のため、 $z\to\infty$ を考える。漸近展開への手がかりは既に導出したポアソンの積分表示:

$$K_{\nu}(z) = \frac{\pi^{1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu} \int_{1}^{\infty} e^{-zx} (x^{2} - 1)^{\nu - 1/2} dx,$$

である。この積分表示に対して, $x \equiv 1 + t/z$ とすると,

$$K_{\nu}(z) = \frac{\pi^{1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu} \int_{0}^{\infty} e^{-z-t} \left(\frac{t^{2}}{z^{2}} + \frac{2t}{z}\right)^{\nu - 1/2} \frac{dt}{z}$$
$$= \frac{\pi^{1/2}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \frac{e^{-z}}{2^{\nu} z^{\nu}} \int_{0}^{\infty} e^{-t} t^{2\nu - 1} \left(1 + \frac{2z}{t}\right)^{\nu - 1/2} dt,$$

のように変形できる。さらに、被積分関数の括弧内に関して 2t/z を共通因子として括弧の外に出すと、

$$K_{\nu}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{e^{-z}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \int_{0}^{\infty} e^{-t} t^{\nu - 1/2} \left(1 + \frac{t}{2z} \right)^{\nu - 1/2} dt$$
$$= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \frac{e^{-z}}{\Gamma(\nu + 1/2)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2z)^{-m}}{m! \Gamma(\nu - m + 1/2)} \int_{0}^{\infty} e^{-t} t^{\nu + m - 1/2} dt,$$

のように数式変形できる。第 2 行目への数式変形は二項定理による級数展開を適用した。任意の次数 (整数でない次数) のべき乗では,二項定理による級数が収束するには |2t/z|<1 でなければならない。前提条件として $z\to\infty$ を仮定しているのだが,積分変数 t が無限大までに及ぶので一方的に |2t/z|<1 といえない。にも関わらず,この数式変形において平然と二項定理を利用したのは,次の理由があるからだ。この数式の被積分関数に注目すると,因数 e^{-t} が含まれていることがわかる。因数 e^{-t} は,いかなる t のべき多項式との積において, $t\to\infty$ の極限でゼロとなる。つまり,被積分関数は $t\to\infty$ の極限でゼロとなるはずだ。言い換えると,二項級数が収束しない条件では積分が確実にゼロとなる。したがって,二項定理が収束しない条件は計算に含まなくても問題はない。

3.8. 漸近展開 107

計算過程において二項定理を用いた正当性を説明したところで, 話を戻そう。上記の計算過程において, 右辺の積分はガンマ関数になるので.

$$K_{\nu}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2z)^{-m} \Gamma(\nu + m + 1/2)}{m! \Gamma(\nu - m + 1/2)},$$

と書いてもよい。分子のガンマ関数と分母のガンマ関数の変数の差が整数であるので, それらのガンマ関数の比は容易に得ることができ,

$$\begin{split} \frac{\varGamma(\nu+m+1/2)}{\varGamma(\nu-m+1/2)} &= \left(\nu-m+\frac{1}{2}\right)\left(\nu-m+\frac{3}{2}\right)\cdots\left(\nu+m-\frac{3}{2}\right)\left(\nu+m-\frac{1}{2}\right)\\ &= \left[\nu^2-\left(m-\frac{1}{2}\right)^2\right]\left[\nu^2-\left(m-\frac{3}{2}\right)^2\right]\cdots\left[\nu^2-\left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\left[\nu^2-\left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\\ &= \frac{\left[4\nu^2-(2m-1)^2\right]\left[4\nu^2-(2m-3)^2\right]\cdots\left[4\nu^2-3^2\right]\left[4\nu^2-1^2\right]}{4^m}, \end{split}$$

のように計算される。この比率を上の数式に代入すると、

$$K_{\nu}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[4\nu^2 - (2m-1)^2][4\nu^2 - (2m-3)^2] \cdots [4\nu^2 - 3^2][4\nu^2 - 1^2]}{m! (8z)^m}, \quad (3.55)$$

が得られる。この数式をもう少しわかりやすく書くと、

$$K_{\nu}(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left[1 + \frac{(4\nu^2 - 1^2)}{1! \, 8z} + \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)}{2! \, (8z)^2} + \cdots \right],$$

なる数式となる。この数式が第 2 種変形ベッセル関数の漸近展開である。ブラケットの中が $z\to\infty$ の極限でゼロになるので、無限遠では $K_{\nu}(z)\simeq\sqrt{\pi/2z}\,e^{-z}$ となる。これは、図 3.12 に示したグラフのように z の増加にともなって $K_{\nu}(z)$ が急激に減少する振る舞いを説明している。ここで、次のように多項式 $P_{\nu}(z)$ と $Q_{\nu}(z)$ を定義しよう。

$$P_{\nu}(z) = 1 - \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)}{2!(8z)^2} + \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)(4\nu^2 - 5^2)(4\nu^2 - 7^2)}{2!(8z)^4} - \cdots,$$

$$Q_{\nu}(z) = \frac{(4\nu^2 - 1^2)}{1!8z} - \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)(4\nu^2 - 5^2)}{3!(8z)^3} + \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)(4\nu^2 - 5^2)(4\nu^2 - 7^2)(4\nu^2 - 9^2)}{5!(8z)^5} - \cdots. (3.56b)$$

このような多項式を用いると、第2種変形ベッセル関数の漸近展開は、

$$K_{\nu}(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left[P_{\nu}(iz) + iQ_{\nu}(iz) \right],$$
 (3.57)

のように書くことができる。ここで、ブラケットの中が実数関数であるにも関わらず、なぜ $P_{\nu}(iz)+iQ_{\nu}(iz)$ のような回りくどい定義をしているのか疑問に思うかもしれない。その理由は、ベッセル関数とノイマン関数の漸近展開で明らかになる。

漸近展開の精度 概して漸近展開は無限に項を加算すると収束しない。漸近展開を用いて関数値を計算する場合,発散しないように適切な項で計算を切り上げる必要がある。言い換えると,漸近展開で計算できる精度には限界があるということである。ここでは, $K_0(z)$ の漸近展開の精度について考察しよう。その場合,ブラケット内の漸近多項式は,

$$P_0(iz) + iQ_0(iz) = 1 - \frac{1}{1!(8z)} + \frac{1 \cdot 3^2}{2!(8z)^2} - \frac{1 \cdot 3^2 \cdot 5^2}{3!(8z)^3} + \cdots$$

のように各項の符号が交互に入れ替わる級数となる。ここで、

$$a_n \equiv \frac{1 \cdot 3^2 \cdot 5^2 \cdots (2n-1)^2}{n! (8z)^2}, \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

と定義するならば、漸近多項式は $P_0(iz) + iQ_0(iz) = a_0 - a_1 + a_2 - \cdots$ と表記できる。さらに、漸近多項式 $P_0(iz) + iQ(iz)$ を第 n 項で打ち切った値を S_n としよう。その場合、漸近多項式の真値が S_{n-1} と S_n の間であると仮定すれば、誤差は必ず a_n より小さいことになる。そこで、誤差を評価するために a_n を調べてみよう。当然、 a_n は変数 z に依存するので、いくつか代表的な z を与えて a_n を計算すると、 a_n は図 3.16 のような曲線を描く。曲線は、最小値を迎えた後、上昇傾向を示す。その少々傾向は無限に続く。つまり、漸近多項式の計算項を増加させると漸近多項式は発散するのである。 漸近多項式の誤差が a_n より

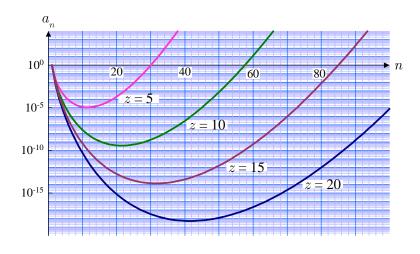


図 3.16: 漸近多項式 (for $K_0(z)$) の第 n 項の大きさ

小さいのだから、漸近展開をするには、計算項の数は a_n が最小値となるように選ぶことがよい。その最小値は z に依存する。例えば、z=5 のとき最小値は 10^{-5} 程度、z=20 で最小値は 10^{-18} となる。これは、z=5 のとき漸近展開で、たかだか、10 進 5 桁程度の精度しか確保できないことを意味する。一方、z=20 では 10 進 18 桁の精度が達成できる。

3.8. 漸近展開 109

3.8.2 その他のベッセル関数

第 2 種変形ベッセル関数 $K_{\nu}(z)$ の漸近展開を足掛かりに、他のベッセル関数を漸近展開しよう。第 1 種ハンケル関数 $H_{\nu}^{(1)}(z)$ から始めるのがよいだろう。なぜなら、 $K_{\nu}(z)$ と $H_{\nu}^{(1)}(z)$ の間には、

$$K_{\nu}(z) = \frac{\pi}{2} e^{\pi i(\nu+1)/2} H_{\nu}^{(1)}(iz)$$

の関係が成立するからである。この関係式を用いると、

$$H_{\nu}^{(1)}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp\left[i\left(z - \frac{2\nu + 1}{4}\pi\right)\right] \cdot \left[P_{\nu}(z) + iQ_{\nu}(z)\right],$$
 (3.58)

なる漸近展開が得られる。続いて、実数変数を与えたとき、第 1 種ハンケル関数 $H_{\nu}^{(1)}(z)$ の 複素共役が第 2 種ハンケル関数 $H_{\nu}^{(2)}(z)$ であることに注意すれば、第 2 種ハンケル関数の 漸近展開は、

$$H_{\nu}^{(2)}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp\left[-i\left(z - \frac{2\nu + 1}{4}\pi\right)\right] \cdot \left[P_{\nu}(z) - iQ_{\nu}(z)\right],$$
 (3.59)

となることがわかる。無限遠において $P_{\nu}(z)+iQ_{\nu}(z)\simeq 1$ であるので,この漸近展開は,無限遠でハンケル関数は振幅が $\sqrt{2/\pi z}$ の正弦波となることを意味している。さらに,これらの漸近展開によって,ハンケル関数が物理学において興味深い関数であることがわかる。波動解析において, e^{iz} が -z 方向に伝播する波であり, e^{-iz} が +z 方向に伝播する波を表すからだ。つまり,電磁界解析のように波の伝播方向を取り扱う必要がある場合, $J_{\nu}(z)$ や $Y_{\nu}(z)$ を扱うよりも,ハンケル関数を扱ったほうが便利なのである。

ベッセル関数 $J_{\nu}(z)$ とノイマン関数 $Y_{\nu}(z)$ は実数変数 z に対して、それぞれ、第 1 種ハンケル関数 $H_{\nu}^{(1)}(z)$ の実部と虚部である。その事実に注目すると、

$$J_{\nu}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left[P_{\nu}(z) \cos \left(z - \frac{2\nu + 1}{4} \pi \right) - Q_{\nu}(z) \sin \left(z - \frac{2\nu + 1}{4} \pi \right) \right],$$
 (3.60a)

$$Y_{\nu}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left[P_{\nu}(z) \sin\left(z - \frac{2\nu + 1}{4}\pi\right) + Q_{\nu}(z) \cos\left(z - \frac{2\nu + 1}{4}\pi\right) \right],$$
 (3.60b)

がただちに得られる。この漸化式を見ると, $K_{\nu}(z)$ の漸近展開で, ブラケット内の因数を $P_{\nu}(iz) + iQ(iz)$ のように定義していたか分かるだろう。多項式 P(z) と Q(z) はベッセル関数とノイマン関数を記述しやすい形で定義していたということである。

もう一つ, 第 1 種の変形ベッセル関数 $I_{\nu}(z)$ の漸近展開が残っている。その漸近展開を得るには, 関係式 $I_{\nu}(z)=i^{-\nu}J_{\nu}(iz)$ を利用すればよい。この関係式から,

$$I_{\nu}(z) \sim \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} \left[P_{\nu}(iz) + iQ_{\nu}(iz) \right],$$

が導かれるが, $I_{\nu}(z)$ は, 変数 z が実数のとき実関数となるはずなので, この数式から虚数単位 i を消去したい。そこで, $R(z) \equiv P(iz) + iQ(iz)$ を計算すると,

$$R_{\nu}(z) = 1 - \frac{(4\nu^2 - 1^2)}{8z} + \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)}{2!(8z)^2} - \frac{(4\nu^2 - 1^2)(4\nu^2 - 3^2)(4\nu^2 - 5^2)}{3!(8z)^3} + \cdots,$$

が導かれる。これを用いて、第1種の変形ベッセル関数の漸近展開:

$$I_{\nu}(z) \sim \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} R_{\nu}(z),$$
 (3.61)

が得られる。ここで導入した多項式 $R_{\nu}(z)$ は $z \to \infty$ の極限で $R_{\nu}(z) \to 1$ となる。変数 z の絶対値が大きいとき, 漸近展開を用いるのが便利であるが, 前にも述べたように, $R_{\nu}(z)$ は加算する項を増やしすぎると発散するので注意が必要である。計算する $R_{\nu}(z)$ の打ち切り項数 (次数) を n とすると, おおむね, $n \simeq 2z$ あたりで誤差が最小になる。

3.9 解の独立性

既に述べたように、ベッセル微分方程式と変形ベッセル方程式は 2 階の微分方程式であるので、2 つの独立な解が存在する。ベッセル方程式の場合、独立な解の組合せは、ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ とノイマン関数 $Y_{\nu}(x)$ である。本節では、一般の 2 階微分方程式に関する独立な解の定式化からはじめ、ベッセル方程式における独立な解を議論する。

3.9.1 一般的な2階微分方程式

一般的な2階微分方程式において微分方程式の独立な解を定式化しよう。一般的な2階 の微分方程式は.

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}z^2} + p(z) \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} + q(z) u(z) = 0,$$

なる形で書くことができる。この方程式の解u(z)を,

$$u(z) = U(z) \exp\left(-\frac{1}{2} \int p(z) dz\right),$$

とおいてみる 8 。このu(z)を上に記述した2階の微分方程式に代入すると、

$$\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}z^2} + J(z) U(z) = 0, \tag{3.62}$$

8この置き換えは、1 階微分方程式 u'+p(z)u+q(z)=0 の階の公式が、

$$y(z) = U(z) \exp\left(-\int p(z) dz\right),$$

とおいて, U(z) を特定することによって得られることにならった。

3.9. 解の独立性 111

が得られる。この方程式が2階の微分方程式の標準形と呼ばれる方程式である。ただし、

$$J(z) \equiv q(z) - \frac{1}{2} \frac{dp}{dz} - \frac{1}{4} p^{2}(z),$$

である。微分方程式 (3.62) の解が U(z), V(z) であった場合

$$U''(z) + J(z) U(z) = 0,$$
 $V''(z) + J(z) V(z) = 0,$

が成立する。前者にV(z)を乗じ、後者にU(z)を乗じて、双方の積どうしの差をとると、U''V - UV'' = 0 が得られる。この関係式を積分すると、

$$V(z) \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}z} - U(z) \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}z} = c,$$
 (c is const.)

が得られる。この数式は**ロンスキー行列式**と呼ばれ、関数の独立性を判定するために用いられる。このロンスキー行列式は、U(z) と V(z) が定数倍の関係にある場合、すなわち、独立でない場合にゼロになる。実際に c=0 とすると、ロンスキー行列式が $\mathrm{d}(U/V)/\mathrm{d}z=0$ となることからその事実が実証できる。一方、 $c\neq 0$ のとき、ロンスキー行列式を、

$$U^2(z) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \frac{V}{U} = c_0,$$

に変形する。この数式を積分すれば、

$$V(z) = c_0 U(z) \int^z U^{-2}(z) dz + c_1 U(z),$$

が得られる。ここで, c_1 は積分定数である。この関係式から, さらに,

$$v(z) = c_0 u(z) \int^z u^{-1}(z) \exp\left(-\int^z p(z) dz\right) dz + c_1 u(z),$$

が得られる。つまり、微分方程式の解の一方u(z)が与えられれば、もう一方の解v(z)がこの関係式によって導き出される。

3.9.2 スツルムの比較定理

微分方程式の解u(z)とv(z)の零点の関係を示す定理としてスツルムの比較定理がある。その定理は、ベッセル微分方程式の解の独立性を議論するための材料となるので紹介しておこう。

実変数 x の関数 u(x) と v(z) が与えられたとしよう。これらの関数は、それぞれ、2 階の微分方程式:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + h(x) u(x) = 0, \qquad \frac{d^2v}{dx^2} + g(x) v(x) = 0,$$

の解であるとする。また, h(x) と g(x) は連続関数であると仮定する。前者の方程式に v(x) を, 後者に u(x) を乗じ, 双方の積の差をとると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(v \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} - u \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} \right) - \left(g(x) - h(x) \right) uv = 0,$$

が得られる。ここで、u(x) の零点がx = a, b であるとしよう。しかも、区間 (a, b) で $u(x) \neq 0$ 、さらに、 $u'(z) \neq 0$ 、 $u'(b) \neq 0$ を仮定する。この条件のもとで、上の等式を積分すると、

$$\left[v\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right]_{x=a}^{b} = \int_{a}^{b} \left(g(x) - h(x)\right) uv \,\mathrm{d}x,\tag{3.63}$$

となる。さらに、条件:

$$u(x) > 0 \quad (a < x < b), \quad u'(a) > 0, \quad u'(b) < 0,$$

を仮定しよう。この条件を設けても一般性を損なわないはずである。さらに, a < x < b において, $g(x) \ge h(x)$ を仮定しよう。その条件を設けると, v(x) は区間 (a,b) で少なくとも 1 回, 符号を変えなければならない。なぜならば, 符号を変えずに v(x) > 0 であると仮定すると, (3.63) の左辺が,

LHS of
$$(3.63) = v(b) u'(b) - v(a) u'(a) < 0$$
,

となり、右辺が正またはゼロであることに矛盾する。逆に、v(x) < 0と仮定しても矛盾が生じる。この結果は、スツルム (Sturm) の定理が導出されたことを意味する。

定理 1 常微分方程式の 1 つの解 u(x) の隣り合う零点を a と b としたとき,区間 (a,b) で $g(x) \ge h(x)$ が成立するとする。そのとき,区間 (a,b) に,他の解 v(x) の零点が少なくとも一つ存在する。

この定理の特殊な場合として $h(x) \equiv g(x)$ を考えると, u(x) と v(x) は同一の微分方程式の解である。その場合のスツルムの定理は, 2 階の微分方程式の一方の解が 2 つの零点をもてば、その零点の間に、もう一方の解の零点が存在することを意味する。

スツルムの定理は、2 階常微分方程式の標準形だけでなく、次の形の方程式に拡張可能である。 関数 u(x) と v(x) が、それぞれ、微分方程式:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(p(x)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right) + h(x)\,u(x) = 0, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(p(x)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\right) + g(x)\,v(x) = 0,$$

の解とする。先ほどと同様に、前者の方程式にv(x) を、後者にu(x) を乗じて、双方の積の差をとると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(p(x) v \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} - p(x) u \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} \right) + \left(h(x) - g(x) \right) uv = 0,$$

3.9. 解の独立性 113

が得られる。関数 u(x) の隣り合う零点を a と b とし、関数 p(x) が区間 (a,b) で符号を変えないと仮定すると、関数 v(x) は区間 (a,b) で符号を変えなければならない。つまり、v(x) は区間 (a,b) に 1 個以上の零点をもつということである。

ベッセル関数はスツルムの定理にしたがう。なぜなら、ベッセル微分方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(x \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \right) + \left(x - \frac{\nu^2}{x} \right) = 0,$$

なる形に書き換えることができるからである。スツルムの定理に関して、 $p(x) \equiv x$, $g(x) \equiv h(x) \equiv x - v^2/x$ と考えれば、u(x) と v(x) はベッセル関数の 2 つの解に相当する。例えば、u(x) がベッセル関数 J_{ν} , v(x) がノイマン関数 $Y_{\nu}(x)$ に相当すと考えよう。スツルムの定理の p(x) は、ベッセル方程式では x であるので、 $(0,\infty)$ で常に同一符号である。ベッセル関数が無限遠で三角関数となるので、ベッセル関数 $J_{\nu}(x)$ は区間 $(0,\infty)$ で無限個の零点をもつ。スツルムの定理によると、ノイマン関数 Y_{ν} はベッセル関数の隣り合う零点の間に零点をもたなければならない。仮に、ベッセル関数の隣り合う零点の間に、ノイマン関数が複数の零点をもつならば、再びスツルムの定理によってベッセル関数がさらにノイマン関数の隣り合う零点の間に零点をもつならば、再びスツルムの定理によってベッセル関数の隣り合う零点の間にノイマン関数の零点が一つだけ存在する。言い換えると、実軸上に、ベッセル関数の零点とノイマン関数の零点は交互に並んでいる。その事実は、第1種ハンケル関数の実部と虚部を描いた図 3.10 に現れている。

3.9.3 ベッセル関数のロンスキー行列式

本節のここまでの展開によって、ベッセル関数のロンスキー行列式が計算できるようになった。スツルムの定理を導出する過程で、 $p(x)\equiv x$ とすれば、任意のベッセル関数の組み合せ u(z)と v(z) を与えれば、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left(z u \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z} - z v \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} \right) = 0,$$

が得られる。これを積分すると、

$$u\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z} - v\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} = \frac{c}{z},$$

が得られる。ここで, c は積分定数である。この数式がベッセル関数のロンスキー行列式である。

ベッセル関数の独立性を検証するため, $u(z)\equiv J_{\nu}(z),\,v(x)\equiv J_{-\nu}(z)$ を代入してみよう。すると, ロンスキー行列式は,

$$J_{\nu}(z) J'_{-\nu}(z) - J'_{\nu}(x) J_{-\nu}(z) = J_{\nu}(x) J_{-\nu-1}(z) - J_{-\nu}(z) J_{\nu+1}(z)$$

となる。この値は既に示したように、c/zに等しいはずである。ここで、定数 c を決定する必要がある。定数 c は z に依存しないので、計算しやすい z を上の数式に代入して直接、計算するのがよいだろう。ゼロに近い値を z に代入すると, $J_{\nu}(z) \simeq (z/2)^{\nu}/\Gamma(\nu+1)$ のように近似できるので都合がよさそうである。その計算は容易に実行でき、定数は $c=-2\sin\pi\nu/\pi$ のように特定できる。したがって、ロンスキー行列式は、

$$J_{\nu}(z) J'_{-\nu}(z) - J'_{\nu}(x) J_{-\nu}(z) = -\frac{2 \sin \pi \nu}{\pi z},$$

のようになる。このロンスキー行列式は、次数 ν が整数の場合にのみゼロとなる。したがって、非整数次であれば $J_{\nu}(x)$ と $J_{\nu}(x)$ が独立であることが検証された。整数次の場合、前にも示したとおり独立ではない。そこで、ノイマン関数を導入してロンスキー行列式を計算しよう。ノイマン関数の定義 (3.31) を用いてロンスキー行列を計算すると、

$$J_{\nu}(z) Y_{-\nu}'(z) - J_{\nu}'(x) Y_{-\nu}(z) = \frac{J_{\nu}'(x) J_{-\nu}(z) - J_{\nu}(z) J_{-\nu}'(z)}{\sin \pi \nu} = \frac{2}{\pi z},$$

となる。このロンスキー行列は、次数 ν には関係せず、ゼロになることはない。つまり、ノイマン関数はベッセル関数との独立性が約束されている。

変形ベッセル関数についても同様の手順でロンスキー行列式を計算できる。結果のみを 書くと、

$$I_{\nu}(z) I'_{-\nu}(z) - I'_{\nu}(x) I_{-\nu}(z) = -\frac{2 \sin \pi \nu}{\pi z},$$

$$I_{\nu}(z) K'_{\nu}(z) - I'_{\nu}(x) K_{\nu}(z) = -\frac{1}{z},$$

となる。第 1 種変形ベッセル関数の $I_{\nu}(z)$ と $I_{-\nu}(z)$ は,次数 ν が非整数であれば互いに独立である。しかし,整数次にはロンスキー行列式がゼロになることから,独立ではない。その代わり, $I_{\nu}(z)$ と $K_{\nu}(z)$ は次数に関わらず,必ず,互いに独立であることが保証される。

3.10 球ベッセル関数

ここまでに取り扱ったベッセル関数は、ヘルムホルツ方程式を円筒座標で変数分離して得られる微分方程式 (ベッセル微分方程式) の解である。ヘルムホルツ方程式を球面座標で変数分離すると、ベッセル微分方程式と類似の微分方程式が得られる。その方程式の解は、球ベッセル関数と呼ばれる。

3.10.1 球面座標でのヘルムホルツ方程式

ベッセルの方程式がヘルムホルツの波動方程式 $(\nabla^2 + k^2)f = 0$ を円筒座標で変数分離して得られることは前に述べた。ヘルムホルツの波動関数は、球座標で変数分離すると類

似した方程式:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r^2 \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r} \right) + \left[k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] f(r) = 0,$$

が得られる。ここで, r と k は, それぞれ, 原点からの半径と波動の波数に対応する物理量である。変数に関して $x \equiv kr$ のように置き換えると, この方程式は,

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2}{x} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} + \left[1 - \frac{\nu(\nu+1)}{x^2} \right] f(x) = 0, \tag{3.64}$$

のように変形される。なお、変数分離の際に用いた整数nを、ここで一般化のため実数 ν に置き換えておいた。この方程式は多少似ているかもしれないが、ベッセルの微分方程式ではない。しかし、

$$\hat{f}(x) \equiv f(x) \, x^{-1/2},\tag{3.65}$$

のように定義された関数 $\hat{f}(x)$ を用いると、微分方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2 \hat{f}}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}\hat{f}}{\mathrm{d}x} + \left[1 - \frac{(\nu + 1/2)^2}{x^2} \right] \hat{f}(x) = 0,$$

のようにベッセルの微分方程式に書き換えられる。微分方程式 (3.65) は 2 階の微分方程式 なので独立な 2 つの解が存在するはずである。それらの解を j_{ν} と y_{ν} としよう。そのとき,置き換え (3.65) によって微分方程式がベッセルの微分方程式に書き換えられるので,方程式の解は.

$$j_{\nu}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\nu+1/2}(x), \qquad y_{\nu}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{\nu+1/2}(x),$$
 (3.66)

のように書くことができる⁹。これらの解はそれぞれ,第1種と第2種の**球ベッセル関数**と呼ばれる。物理学において,多くのケースで,整数次の関数しか興味の対象ではない。整数次の球ベッセル関数は,半奇整数次のベッセル関数に対応付けられている。半奇整数次のベッセル関数は三角関数を用いて厳密な関数式を記述できるので,球ベッセル関数の場合,物理学で興味深い整数次の関数を三角関数を用いて厳密に記述できる。例としてゼロ次の球ベッセル関数を書くと,

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad y_0(x) = -\frac{\cos x}{x},$$

のように書くことができる。また、円筒座標系の場合と同様に球ハンケル関数は、 $h_{\nu}^{(1)}(x) \equiv j_{\nu}(x) + iy_{\nu}(x)$ 、 $h_{\nu}^{(2)}(x) \equiv j_{\nu}(x) - iy_{\nu}(x)$ のように定義される。球ハンケル関数についても、ゼロ次の関数を例として記述すると、

$$h_0^{(1)}(x) = \frac{e^{i(x-\pi/2)}}{x}, \quad h_0^{(2)}(x) = \frac{e^{-i(x-\pi/2)}}{x},$$

 $^{^9}$ 単に $j_\nu(x)=J_{\nu+1/2}(x)/\sqrt{x}$ と書いてもよかったのだが、整数次の関数 $j_n(x)$ を記述する際の便宜上、 $j_\nu(x)=\sqrt{\pi/2x}\,J_{\nu+1/2}(x)$ と定義する。

となる。これらゼロ次の関数は、物理的には点波源による電磁場を表している。第 1 種の球ハンケル関数は無限遠から波源に向かって到来する波を表すので、物理的に想定が不可能であるため、物理的にほとんど興味を惹かない。第 2 種の球ハンケル関数は点波源から無限遠に向かって放射される電磁場を表すので、物理的な興味が深い関数である。

3.10.2 漸化式と高次の球ベッセル関数

前項で説明したように、球ベッセル関数 $j_n(x)$ はベッセル関数 $J_n(x)$ と簡単な数式で関係づけられる。そのことから、ベッセル関数 $J_n(x)$ と同様に、球ベッセル関数 $j_n(x)$ が隣り合う次数どうしで漸化式が成立することが予想される。ベッセル関数の漸化式 (3.15) と円筒座標系と球面座標系でのベッセル関数の関係 (3.66) によって、球ベッセル関数での漸化式:

$$j_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} j_n(x) - j_{n-1}(x), \qquad (3.67)$$

が導かれる。第2種の球面ベッセル関数についても同一の漸化式が成立する。球面ベッセル関数を,次数が小さいものをいくつか挙げると,

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, y_0(x) = -\frac{\cos x}{x},$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, y_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3\cos x}{x^2}, y_2(x) = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3\sin x}{x^2},$$

となる。漸化式 (3.67) を用いればさらに高い次数の球ベッセル関数を得ることができる。球面ベッセル関数 $j_3(x)$ を 3 次までプロットすると図 3.17 に示す曲線を描く。曲線は見かけ上,図 3.2 に示す円筒座標系でのベッセル関数に類似しているが,球面ベッセル関数の方が |x| の上昇に伴い深く減衰する。

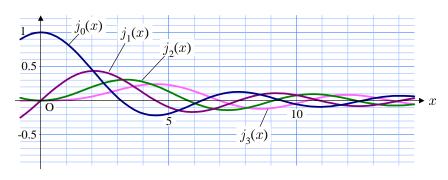


図 3.17: 球ベッセル関数

球ベッセル微分方程式のもう一方の解である球ノイマン関数は図 3.18 に示す曲線を描く。この関数も見かけは円筒座標系のノイマン関数に類似しているが、 やはり、 球ノイマ

3.10. 球ベッセル関数 117

ン関数の方が |x| の増加に伴う減衰が深い。 球ベッセル関数にしても、球ノイマン関数に

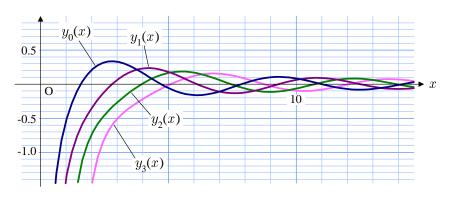


図 3.18: 球面ノイマン関数

しても、円筒座標系の関数に比べて減衰が深いのは、数式におけるxの依存性を見ればわかる。円筒座標系のベッセル関数は漸近形で $x^{-1/2}$ に比例するが、球ベッセル関数は x^{-1} に比例する。そのべき指数の違いが減衰の深さに反映している。

球ベッセル関数の漸化式は (3.67) だけではない。円筒座標系におけるベッセル関数の漸化式から始め、数種類の漸化式の表現を得ることができる。上で示した (3.67) を含め、改めて、球ベッセル関数の漸化式を書くと、

$$nj_{n-1}(x) + (n+1)j_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x}j_n(x),$$
 (3.68a)

$$nj_{n-1}(x) - (n+1)j_{n+1}(x) = (2n+1)j'_n(x),$$
 (3.68b)

$$j_{n-1}(x) = \frac{n-1}{x} j_{n+1}(x) + j'_n(x), \tag{3.68c}$$

が挙げられる。漸化式 (3.68a) は書き方を多少変えたが, (3.67) と同一の数式である。第 2 の漸化式 (3.68b) は, ベッセル関数の漸化式 (3.16) から導出できる。まず, (3.66) に示した $j_n(x)$ の定義式 (3.66) を x について微分すると,

$$j'_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \left(J'_{n+1/2}(x) - \frac{J_{n+1/2}(x)}{x} \right),$$

が得られる。ベッセル関数の漸化式 (3.16) に, $\nu=n+1/2$ を代入し, $J'_{n+1/2}(x)$ を消去すると漸化式は.

$$J_{n-1/2}(x) - J_{n+3/2}(x) = \frac{J_{n+1/2}(x)}{x} + 2\sqrt{\frac{2x}{\pi}} j_n'(x),$$

のように変形される。両辺に $\sqrt{\pi/2x}$ を乗じて、球ベッセル関数の定義に注意すると、

$$j_{n-1}(x) - j_{n+1}(x) = 2j'_n(x) + \frac{j_n(x)}{x},$$

が得られる。この結果に 2n+1 を乗じて漸化式 (3.68a) との差をとると、漸化式 (3.68b) が得られる。この漸化式が、(3.16) に対応する球ベッセル関数の漸化式である。さらに、(3.68a) と (3.68b) を組み合わせて $j_{n+1}(x)$ の項を消去すると漸化式 (3.68c) が得られる。¶

漸化式 (3.68a) から (3.68c) は, $j_n(x)$ だけでなく $y_n(x)$, $h_n^{(1)}(x)$, $h_n^{(2)}(x)$ に関しても成立 することを補足しておく。

第4章 ルジャンドル関数

ルジャンドル関数は、ヘルムホルツ方程式を極座標で変数分離したときに現れる天頂角の依存性を表す微分方程式の解である。物理学で興味のあるルジャンドル関数は多項式で表現されるので、ルジャンドル多項式と呼ばれる。本章は、ルジャンドルの微分方程式の解としてルジャンドル関数を定義し、その性質を調べる。

4.1 ルジャンドル多項式

ルジャンドルの微分方程式は、ヘルムホルツ方程式を球面座標で変数分離したときの天 頂角依存性に関する微分方程式である。本章の応用例で、ヘルムホルツ方程式からルジャ ンドル微分方程式を導出するが、その結果は、

$$(1 - x2) y''(x) - 2xy'(x) + n (n + 1) = 0, (4.1)$$

のような形をしている。

4.1.1 ルジャンドル微分方程式の級数解

微分方程式 (4.1) の解を, 前章と同様に級数解として求めてみよう。微分方程式 (4.1) の解を.

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{p+k},$$
 (4.2)

と仮定しよう。ここで、少なくとも $c_0 \neq 0$ であるとする。つまり、p は級数の最低次数である。この式を微分方程式 (4.1) に代入すると、

$$p(p-1)c_0x^{p-2} + \sum_{k=0}^{\infty} \left[(p+k+2)(p+k+1)c_{k+2} + \left[n(n+1) - (p+k)(p+k+1) \right] c_k \right] x^{k+p} = 0, \quad (4.3)$$

が得られる。この式が恒等的に成立するには、すべての次数の係数がゼロでなければならない。まず、 x^{p-2} の係数に着目すると、p=0,1となる。つまり、最低次数はゼロか1である。続いて、最低次数が0,1のそれぞれに対して展開係数を決定しよう。

最低次数が 0 の場合 ルジャンドル微分方程式に、級数を仮定した解を代入して得られた関係式 (4.3) について、k+p 次の係数がゼロである条件から、展開係数は、

$$c_{k+2} = -\frac{n(n+1) - k(k+1)}{(k+2)(k+1)}c_k = -\frac{(n-k)(n+k+1)}{(k+2)(k+1)}c_k,$$

なる関係式を満たす。展開式の最低次の係数 c_0 が決まれば、この関係式を用いて偶数項 c_{2k} が順次、決まっていく。奇数次を決めるには c_1 が必要であるが、その値を決める条件が (4.3) に規定されていない。とりあえず、 $c_1=0$ としておこう。つまり、展開係数の奇数項は、必ず、ゼロであると仮定したことになる。展開係数の偶数項を計算するため、上に書いた展開係数の漸化式を、

$$c_{2k} = -\frac{(n-2k+2)(n+2k+1)}{2k(2k-1)}c_{2(k-1)},$$

のように書き換えておこう。この漸化式を見ると, n-2k+2=0 を満たすと展開係数がゼロになる。また, それ以降の展開係数はすべてゼロとなる。つまり, n がゼロ, または, 正の偶数であれば, 級数解は有限項の多項式となる。ここで, $n\equiv 2m$ としておこう。その過程のもとで, 漸化式を繰り返し適用して c_{2k} を計算すると,

$$c_{2k} = -\frac{(2m-2k+2)(2m+2k-1)}{2k(2k-1)}c_{2(k-1)}$$

$$= (-1)^2 \frac{(2m-2k+2)(2m-2k+4)(2m+2k-1)(2m+2k-3)}{2k(2k-1)(2k-2)(2k-3)}c_{2(k-2)} = \cdots$$

$$= (-1)^k \frac{(2m-2k+2)(2m-2k+4)\cdots(2m)\cdot(2m+2k-1)(2m+2k-3)\cdots(2m+1)}{(2k)!}c_0$$

$$= \frac{(-1)^k}{(2k)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k)!}{2^{m+k}(m+k)!} \frac{2^m m!}{(2m)!}c_0,$$

が得られる。したがって、ルジャンドル微分方程式の解は、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k)!}{2^{m+k}(m+k)!} \frac{2^m m!}{(2m)!} c_0 x^{2k},$$

のような多項式として書くことができる。この多項式がルジャンドル多項式である。

上に書いたルジャンドル多項式は最高次数を 2m とする多項式である。最高次数を与える m はゼロ, または, 正の整数であるので, 最高次数を明示する意味で, ルジャンドル多項式を $P_{2m}(x)$ と書こう。すると,

$$P_{2m}(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k)!}{2^{m+k}(m+k)!} \frac{2^m m!}{(2m)!} c_0 x^{2k}, \tag{4.4}$$

のように書き換えることができる。

最低次数が1の場合 ルジャンドル微分方程式に、級数を仮定した解を代入して得られた 関係式 (4.3) について、k+p 次の係数がゼロである条件から、展開係数は、

$$c_{k+2} = -\frac{n(n+1) - (k+1)(k+2)}{(k+3)(k+2)}c_k = -\frac{(n-k-1)(n+k+2)}{(k+3)(k+2)}c_k,$$

なる関係式を満たす。ここで、漸化式に p=1 を代入している。展開式の最低次の係数 c_0 が決まれば、この関係式を用いて偶数項 c_{2k} が順次、決まっていく。この場合も展開係数の奇数項はすべてゼロだと仮定しておこう。展開係数の偶数項を計算するため、上に書いた展開係数の漸化式を、

$$c_{2k} = -\frac{(n-2k+1)(n+2k)}{2k(2k+1)}c_{2(k-1)},$$

のように書き換えておこう。この漸化式を見ると, n-2k+1=0 を満たすと展開係数がゼロとなり, それ以降の係数もゼロとなる。つまり, n が正の奇数であれば, ルジャンドル多項式の解は有限項の多項式となる。そこで, $n\equiv 2m+1$ として話を進めよう。その過程のもとで, 漸化式を繰り返し適用して c_{2k} を計算すると,

$$c_{2k} = -\frac{(2m-2k+2)(2m+2k+1)}{2k(2k-1)}c_{2(k+1)} = \cdots$$

$$= (-1)^k \frac{(2m-2k+2)(2m-2k+4)\cdots(2m)\cdot(2m+2k+1)(2m+2k-1)\cdots(2m+3)}{(2k+1)!}c_0$$

$$= \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k+2)!}{2^{m+k}(m+k+1)!} \frac{2^{m+1} (m+1)!}{(2m+2)!}c_0,$$

が得られる。したがって、ルジャンドル微分方程式の解は、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k+2)!}{2^{m+k}(m+k+1)!} \frac{2^{m+1} (m+1)!}{(2m+2)!} c_0 x^{2k+1},$$

のような多項式として書くことができる。このルジャンドル多項式は最高次数を 2m+1 とする多項式である。最高次数を与える m はゼロ, または, 正の整数であるので, 最高次数を明示する意味で, ルジャンドル多項式を $P_{2m+1}(x)$ と書こう。すると,

$$P_{2m+1}(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{2^m m!}{2^{m-k}(m-k)!} \frac{(2m+2k+2)!}{2^{m+k}(m+k+1)!} \frac{2^{m+1} (m+1)!}{(2m+2)!} c_0 x^{2k+1}, \quad (4.5)$$

のように書き換えることができる。

4.1.2 ルジャンドル多項式

前項でルジャンドル多項式を、最低次数が0と1の場合について、個別に展開式を記述した。最低次数が0のとき、ルジャンドル多項式の最高次数は偶数となり、一方、最低次数

が1のとき、最高次数は奇数となる。ルジャンドル多項式は、最低次数が0か1かに依存しない統一形式で記述することが可能であり、最高次数をnとすれば、

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k! (n-2k)! (n-k)!} x^{n-2k}, \tag{4.6}$$

のように書くことができる。本項では、この統一形式を証明する。

まず、最低次数が0の場合、n=2mであるから、展開式(4.4)を数式変形すると、

$$\begin{split} P_n(x) &= \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^{m-p}}{(2m-2p)!} \frac{2^m \, m!}{2^p \, p!} \frac{(4m-2p)!}{2^{2m-p} \, (2m-2p)!} \frac{2^m \, m!}{(2m)!} c_0 \, x^{2m-2p} \\ &= \sum_{p=0}^m \frac{(-1)^p}{(2m-2p)!} \frac{1}{2^{2m} \, p!} \frac{(4m-2p)!}{(2m-p)!} \cdot \frac{(-1)^m \, 2^{2m} \, (m!)^2}{(2m)!} c_0 \, x^{2m-p} \\ &= \sum_{p=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^p \, (4m-2p)!}{2^n \, p! \, (n-p)! \, (n-2p)!} x^{n-2p}, \end{split}$$

となり、(4.6) と一致する。ここで、 $\lfloor n/2 \rfloor$ は n/2 の小数部を切り捨てた整数を与える。つまり、n=2m なので $\lfloor n/2 \rfloor = m$ である。さらに、数式変形にあたり、 $2k \equiv 2m-2p$ とおき、最低次の展開係数 c_0 に関して、

$$\frac{(-1)^m 2^{2m} (m!)^2}{(2m)!} c_0 \equiv 1,$$

が成立することを仮定した。

一方, 最低次数が 1 の場合, n=2m+1 であるから, 展開式 (4.5) を数式変形すると,

$$P_{n}(x) = \sum_{p=0}^{m} \frac{(-1)^{m-p}}{(2m+1-2p)!} \frac{2^{m} m!}{2^{p} p!} \frac{(4m+2-2p)!}{2^{2m+1-p} (2m+1-p)!} \frac{2^{m+1} (m+1)!}{(2m+2)!} c_{0} x^{2m+1-2p}$$

$$= \sum_{p=0}^{m} \frac{(-1)^{p}}{(2m+1-2p)!} \frac{1}{2^{2m+1} p!} \frac{(4m+2-2p)!}{(2m+1-p)!}$$

$$\times \frac{(-1)^{m} 2^{2m+1} m! (m+1)!}{(2m+2)!} c_{0} x^{2m+1-2p}$$

$$= \sum_{p=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^{p} (2n-2p)!}{2^{n} p! (n-p)! (n-2p)!} x^{2m+1-2p},$$

となり、(4.6) と一致する。この場合は、n=2m+1 なので $\lfloor n/2 \rfloor = m$ である。この数式変形にあたり、 $2k \equiv 2m+1-2p$ とおき、最低次の展開係数 c_0 に関して、

$$\frac{(-1)^m 2^{2m+1} m! (m+1)!}{(2m+2)!} c_0 \equiv 1,$$

4.2. 母関数と漸化式 123

が成立することを仮定した。

最低次数の展開係数 c_0 を都合がよいように選んでいるものの, 最低次数によらずルジャンドル多項式を統一形式で記述することができた。このような統一形式 (4.6) で記述した多項式を、以降、ルジャンドル多項式と呼ぶことにする。

4.2 母関数と漸化式

ルジャンドル多項式も母関数を導入すれば、その性質を調べることが容易にできる。本 節では、ルジャンドル多項式の母関数を導入し、性質を調べるための漸化式を導く。

4.2.1 母関数

ルジャンドル多項式の場合、通常母関数を用いると都合がよい。通常母関数とは、 $P_n(x)$ を t^n の展開係数とする関数である。結果を書くと、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = (1 - 2xt + t^2)^{-1/2}, \tag{4.7}$$

が成立する。多項式 $P_n(x)$ の導出過程から、母関数がこのような初等関数となるのは意外に思えるかもしれないが、次のように証明することができる。

上の数式 (4.7) の左辺にルジャンドル多項式の展開式 (4.6) を代入すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k! (n-k)! (n-2k)!} x^{n-2k} t^n, \tag{4.8}$$

となる。この計算をさらに進めるには、媒介変数を変換し、総和の順序を入れ替える。母関数を計算するための総和は、図 4.1 に示す格子点を取り尽くしながら実行される。媒介変数 n は、右下から左上に走る破線に付与された番号である。媒介変数 k は格子点の行を表す番号である。この図を見ると、確かに、媒介変数 n は 0 から無限大まで、k は 0 から $\lfloor n/2 \rfloor$ の範囲で格子点を取り尽くされることがわかる。ここで、図 4.1 に示すように、列に番号 m を付与する。すると、母関数は媒介変数 m を 0 から無限大まで、k を 0 から m まで取り尽くしながら総和をとる順序も可能である。このとき、 $n \equiv k+m$ の関係が成立するので、

RHS of (4.8) =
$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^{k} (2m)!}{2^{k+m} k! \, m! \, (m-k)!} x^{m-k} t^{k+m}$$
$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m} (m!)^{2}} \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^{k} \, m!}{k! \, (m-k)!} (2x)^{m-k} t^{m+k}$$

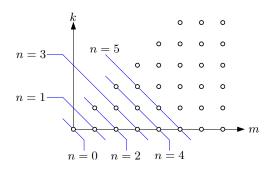


図 4.1: 母関数を計算するための媒介変数の格子点

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} t^m \sum_{k=0}^{m} \frac{m!}{k! (m-k)!} (2x)^{m-k} (-t)^k, \tag{4.9}$$

のように計算される。この計算は技巧的であるので、なるべく計算過程を省略しないように書いてある。媒介変数 k に関する総和が多項式の二項展開になっていることに気づけば、この数式は、

RHS of (4.9) =
$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} t^m (2x - t)^m = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2} (2xt - t^2)^m,$$
(4.10)

のように書くことができる。実は、媒介変数 m についての総和も二項展開である。ここで、 $(2m)!/2^m m! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)$ の関係に注意して計算を続けると、

RHS of (4.10) =
$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)}{2^m} (2xt - t^2)^m$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2} \cdots \frac{2m-1}{2} (2xt - t^2)^m$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{3}{2}\right) \left(-\frac{5}{2}\right) \cdots \left(-\frac{2m-1}{2}\right) (-2xt + t^2)^m$$

$$= (1 - 2xt + t^2)^{-1/2},$$

が導かれ、確かに、ルジャンドル多項式の通常母関数が $(1-2xt+t^2)^{-1/2}$ であることが証明された。母関数を用いると、ルジャンドル多項式の漸化式を得ることができる。漸化式を用いると、展開式 (4.6) を用いるよりも少ない計算でルジャンドル多項式の特定が可能になる。本書ではルジャンドル微分方程式の解としてルジャンドル多項式を定義したが、文献 1 によっては母関数をルジャンドル多項式の定義としている。

 $^{^1}$ ジョージ・アルフケン, ハンス・ウェーバー, 特殊関数, 基礎物理数学 Vol. 3, 第 4 版, 権平 健一郎, 神原武志, 小山 直人 訳, 講談社, 2001.

4.2. 母関数と漸化式 125

4.2.2 特別な関数値

ルジャンドル多項式の母関数から導かれる特殊な値を紹介しよう。紹介する特別な値とは、ルジャンドル多項式の変数 x を ± 1 , 0 としたときの関数値:

$$P_n(1) = 1,$$
 $P_n(-1) = (-1)^n,$ (4.11)

$$P_{2n+1}(0) = 0, P_{2n}(0) = \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n} (n!)^2}, (4.12)$$

である。これらの関数値が上に示した値になることを証明しよう。

ルジャンドル多項式の母関数表示:

$$(1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n,$$

Cx = 1を代入すると、

$$\frac{1}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(1) t^n,$$

なる等式が得られる。左辺は二項展開によって $1/(1-t)=1+t+t^2+t^3+\cdots$ のように 展開されるので、上の等式が任意の t について成立するためには、 $P_n(1)=1$ でなければ ならない。続いて、x=-1 をルジャンドルの多項式の母関数表示に代入すると、左辺は 1/(1+t) となる。上と同様に二項展開を利用すると、 $P_n(-1)=(-1)^n$ が導かれる。

続いて、母関数表示にx = 0を代入すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(0) t^n = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}},$$

となるのだが、この式の右辺を二項展開すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(0) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2} \cdots \frac{2n-1}{2} t^{2n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n} (n!)^2} t^{2n},$$

が得られる。右辺の展開式にはtの偶数項しか存在しないので,x=0としたときのルジャンドル多項式の奇数項がゼロとなることがわかる。また,偶数項も本項の冒頭で紹介した値になっている。

4.2.3 パリティ

前項で示した $P_n(-1) = (-1)^n$ はルジャンドル多項式の偶奇性の一部である。ルジャンドル多項式の母関数 $(1-2xt+t^2)^{-1/2}$ は, $x\mapsto -x$ と $t\mapsto -t$ 双方の置き換えをしても値が変化しない。この性質は、数式で表現すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(-x) (-t)^n,$$

のように記述できる。この級数におけるtの各次数の項を等号で結ぶと、

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x), (4.13)$$

なる関係式が得られる。この関係式は、偶数次のルジャンドル多項式が偶関数であり、奇数次のルジャンドル多項式が奇関数であることを意味している。このような偶奇性はパリティと呼ばれ、量子力学では波動関数の反転の性質を表現するため重要な役割を演じる。

4.2.4 関数値の上限

ルジャンドル多項式は物理学では $P_n(\cos\theta)$ のように, 変数が [-1,1] の範囲で与えられることが多い。そのような制限を与えると, ルジャンドル多項式は $|P_n(\cos\theta)| \leq P_n(1) = 1$ なる関係を満たす。つまり, ルジャンドル多項式は, 変数が 1 に等しいとき最大値をとり, その値は 1 である。

上記の事実は次のようにして証明できる。ルジャンドルの多項式の母関数表示:

$$(1 - 2t\cos\theta + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos\theta) t^n,$$

を考えよう。この式の左辺は,

$$(1 - 2t\cos\theta)^{-1/2} = (1 - te^{i\theta})^{-1/2}(1 - te^{-i\theta})^{-1/2}$$
$$= \left(1 + \frac{1}{2}e^{i\theta}t + \frac{3}{8}e^{2i\theta}t^2 + \cdots\right)\left(1 + \frac{1}{2}e^{-i\theta}t + \frac{3}{8}e^{-2i\theta}t^2 + \cdots\right),$$

のように二項展開できる。この数式は、

$$(1 - 2t\cos\theta)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{in\theta} t^n \cdot \sum_{m=0}^{\infty} a_m e^{-im\theta} t^m,$$

なる形で書けるはずである。ここで, $a_0=1$, $a_1=1/2$, $a_2=3/8$, ... である。しかも, 展開係数 a_n はすべて正の実数である。この数式の右辺を計算するにあたり, 総和の順序を入れ替えると,

$$RHS = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{k} a_m a_{k-m} e^{i(k-2m)\theta} t^k$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} \left(a_m a_{k-m} e^{i(k-2m)\theta} + a_{k-m} m a_m e^{-i(k-2m)\theta} \right) t^k$$

$$= 2 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} a_m a_{k-m} t^k \cos(k-2m)\theta,$$

4.2. 母関数と漸化式 127

なる数式変形ができる。ここで、数式を簡略化するために、

$$a_m a_{k-m} \equiv b_{km} \quad (k \neq 2m), \qquad a_{k/2}^2 = \frac{1}{2} b_{k,k/2},$$

なる展開係数 b_{km} を定義すると,

$$(1 - 2t\cos\theta + t^2)^{-1/2} = 2\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\lfloor k/2\rfloor} b_{km} t^k \cos(k - 2m)\theta,$$

なる関係式が得られる。この数式がルジャンドル多項式の母関数であることに注意すると,k次の展開係数は、

$$P_k(\cos \theta) = 2 \sum_{m=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} b_{km} \cos(k - 2m)\theta,$$

のように書くことができる。この関係式から、

$$|P_k(\cos\theta)| \le 2\sum_{m=0}^{\lfloor k/2\rfloor} b_{km},$$

なる不等式が成立する。係数の絶対値 $|P_k(\cos\theta)|$ が最大となるのは、いかなる k と m について $\cos(k-2m)\theta=1$ が成立するときである。前節で述べたように、そのようなときには k に関わらず $P_k(1)=1$ が成立する。よって、 $|P_k(\cos\theta)|\leq 1$ となる。つまり、ルジャンドル多項式の最大値は 1 である。 \P

4.2.5 漸化式

前項の最後で述べたように、ルジャンドルの多項式を計算するには漸化式を利用すると 便利である。ルジャンドル多項式の漸化式とは、

$$P_1(x) = xP_0(x),$$
 (4.14a)

$$P_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} \left[(2n+1)x P_n(x) - n P_{n-1}(x) \right] \quad (n = 1, 2, 3, ...), \tag{4.14b}$$

である。前節で示したルジャンドル多項式の展開式では計算途中で非常に大きな数が現れるので、次数が大きくなると計算しづらいが、漸化式を用いると、多少、次数が大きくなっても容易に計算できる。

漸化式は、ルジャンドル多項式の母関数表示:

$$(1 - 2xt + t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n,$$

を t で微分すれば証明できる。両辺を微分すると、

$$\frac{x-t}{(1-2xt+t^2)^{3/2}} = \sum_{n=1}^{\infty} n P_n(x) t^{n-1},$$

が得られる。この等式の両辺に $1-2xt+t^2$ を乗じると、

$$(x-t)\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n = (1-2xt+t^2)\sum_{n=1}^{\infty} nP_n(x) t^{n-1},$$

が得られる。この両辺をさらに展開して整理すると、

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) \right] t^n + P_1(x) - xP_0(x) = 0,$$

が導かれる。この数式が任意のt について成立するには, t の各次数の係数がゼロであることなので, その結果として上に記述した漸化式が得られる。¶

初期項として $P_0(x) = 1$ を与え², 導出された漸化式を用いて 8 次までのルジャンドル多項式を計算すると,

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3),$$

$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x), P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5),$$

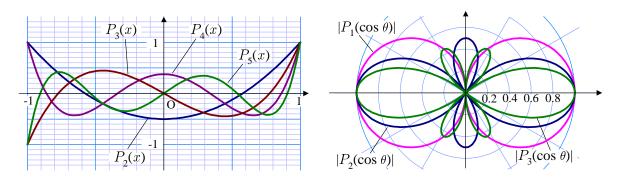
$$P_7(x) = \frac{1}{16}(429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x),$$

$$P_8(x) = \frac{1}{128}(6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35),$$

が得られる。ルジャンドルの多項式のうち, $P_2(x)$ から $P_5(x)$ までの多項式は, 図 4.2 に示す曲線を描く。既に述べたように、偶数次のルジャンドルの多項式は偶関数であり、そうでなければ奇関数である。

ルジャンドル多項式は図 4.2 に示す曲線を描く。図 4.2 (a) は横軸を変数 x にとったときの関数値 $P_n(x)$ を描いたグラフである。一方,図 4.2 (b) は極座標表現において,多項式の絶対値 $|P_n(\cos\theta)|$ を原点からの距離として描いたグラフである。 極座標表示において, $|P_1(\cos\theta)|$, $|P_2(\cos\theta)|$, $|P_3(\cos\theta)|$ は遠方界としての電気双極子,4 重極子,8 重極子の静電ポテンシャルの角度依存性を表す。その事実は,第 4.3.2 節の計算結果について最も次数が低い 1/r の依存項を取り出すことでわかる。

 $^{^{2}}$ これは母関数に t=0 を代入すれば明らかである。



- (a) Value of function vs. variable x.
- (b) Magnitude in the polar coordinate representation.

図 4.2: ルジャンドル多項式

4.3 ルジャンドル多項式の応用例

ルジャンドル多項式は、物理学では電気多重極子のポテンシャルや、ヘルムホルツ方程式における天頂角依存性を表現する手段として応用される。本節では、応用例として電気多重極子のポテンシャルを紹介する。ヘルムホルツ方程式における天頂角依存性は、後に説明するルジャンドル陪多項式の応用例として紹介する。

4.3.1 点電荷のポテンシャル

原点 O から x 軸方向に a だけずれた位置に点電荷 q が存在する場合 (図 4.3) の静電ポテンシャルを考えよう。電荷から観測点までの距離を r_1 とすれば、観測点における静電ポテンシャルは、 $\phi = q/4\pi\varepsilon_0 r$ となる。ただし、 ε_0 は真空中の誘電率という物理定数である。ここで、その静電ポテンシャルを原点からの距離 r と、原点から見た観測点の方向 θ の関数で記述してみよう。余弦定理を用いると、静電ポテンシャルは、

$$\begin{split} \phi &= \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 \, r_1} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 \, \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar\cos\theta}} \\ &= \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} \left[1 - 2\frac{a}{r}\cos\theta + \left(\frac{a}{r}\right)^2 \right]^{-1/2}, \end{split}$$

となる。この数式は、ルジャンドル多項式の母関数 $(1-2xt+t^2)^{-1/2}$ について、 $x \equiv \cos \theta$ 、 $t \equiv a/r$ とした場合に一致する。 つまり、原点からずれた位置に存在する電荷による、静電ポテンシャルはルジャンドル多項式を用いて、

$$\phi = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^n,$$

のように書くことができる。

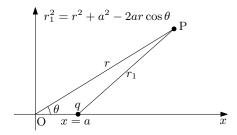


図 4.3: 原点からずれた点電荷と観測点

4.3.2 電気多重極子

前項で述べたように、電荷 q から距離 r 隔てた場所における静電ポテンシャルは、 $\phi=q/4\pi\varepsilon_0 r$ のように r に反比例する。複数の電荷を組み合わせて、1/r や $1/r^n$ のうちの低い 次数を消去することができる。

まず、電荷qがx=aに存在する場合を考えよう。観測点を、x軸と角度 θ をなす方向に原点Oから距離rを隔てた場所にとったとする。ルジャンドル多項式を用いると、観測点における静電ポテンシャルは、

$$\phi = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r_1} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^n,$$

と展開することができる。ここで, r_1 を電荷から観測点までの距離である。

図 4.4 (a) のように, x = a に電荷 q を, x = -a を -q を配置した場合の静電ポテンシャルを計算しよう。複数の電荷による静電ポテンシャルは, 各電荷に起因するポテンシャルの和を計算すればよい。ポテンシャルの和を計算すると,

$$\phi = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} \sum_{n=0}^{\infty} \left[P_n(\cos\theta) - (-1)^n P_n(\cos\theta) \right] \left(\frac{a}{r}\right)^n$$
$$= \frac{2aq}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \left[P_1(\cos\theta) + P_3(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^2 + \cdots \right],$$

のように r^{-1} の項が消去されている。巨視的には電荷が中性となるので r^{-1} の項がなくなっているのである。このような逆の極性の電荷の対は電気双極子と呼ばれる。巨視的に中性であっても,電気双極子は異なる場所に正と負の電荷を配置しているので,配置に起因する高次項が残る。なお,分子の 2aq は電気双極子モーメントと呼ばれる物理量である。

電気双極子を 2 つ並べるとポテンシャルから r^{-2} の項までを消去することができる。その一例として、図 4.4 (b) のように, $x=\pm a$ に電荷 q を, x=0 に電荷 -2q を配置すればよい。その場合の静電ポテンシャルは、

$$\phi = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \left[P_n(\cos\theta) + (-1)^n P_n(\cos\theta) \right] \left(\frac{a}{r} \right)^n - 2 \right\}$$

図 4.4: 直線上の電気多重極子の例

$$= \frac{2a^2q}{4\pi\varepsilon_0 r^3} \left[P_2(\cos\theta) + P_4(\cos\theta) \left(\frac{a}{r}\right)^2 + \cdots \right],$$

のように、最低次数が r^{-3} となる。この電荷の配置は電気 4 重極子と呼ばれる。同様にしてポテンシャルの最低次数を大きくすることができる。例えば、図 4.4 (c) のように電荷を配置すると、ポテンシャルは r^{-4} の次数から始まり、

$$\phi = \frac{2a^3q}{4\pi\varepsilon_0 r^4} \left[6P_3(\cos\theta) + 30P_5(\cos\theta) \left(\frac{r}{a}\right)^2 + \cdots \right],$$

となる。これは電気 8 重極子である。さらに、図 4.4 (d) のように電荷を配置すると、ポテンシャルは r^{-5} の次数から始まり、

$$\phi = \frac{2a^4q}{4\pi\varepsilon_0 r^5} \left[12P_4(\cos\theta) + 60P_6(\cos\theta) \left(\frac{r}{a}\right)^2 + \cdots \right],$$

のようになる。これは電気 16 重極子である。電気多重極子の配置法はここに示した配置だけでなく、様々な配置が可能である。

4.4 ルジャンドル多項式の別の定義

本章の冒頭で、ルジャンドル多項式をルジャンドル微分方程式の解として定義した。前に述べたように、母関数によって定義する方法もある。本節では、さらに他の定義法としてロドリグの公式とシュレーフリ積分を紹介する。

4.4.1 ロドリグの公式

ロドリグ (Rodrigues) の公式は、多項式で表現されるn 次の特殊関数をある関数のn 階 微分を用いて表す公式である。この公式は、Nジャンドル多項式を含め、いくつかの特殊

関数に適用できるため、特殊関数の定義式として用いられることもある。ロドリグの公式 によると、ルジャンドル多項式は、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} (x^2 - 1)^n, \tag{4.15}$$

なる関係式で定義される。この公式はルジャンドル関数の直交性を導く際にも利用される。

本章の冒頭で、ルジャンドル多項式の級数形式が次のように書かれることを示した。

$$P_n(x) = \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^r \frac{(2n-2r)!}{2^n r! (n-r)! (n-2r)!} x^{n-2r}.$$

この関係式は、次のように変形できる。

$$P_n(x) = \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^r \frac{(2n-2r)(2n-2r-1)\cdots(n-2r+1)}{2^n r! (n-r)!} x^{n-2r}$$

$$= \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^r \frac{1}{2^n r! (n-r)!} \frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2r}$$

$$= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^r n!}{r! (n-r)!} x^{2n-2r}.$$

この数式はさらに、総和の対象となる媒介変数rの範囲を拡張し、

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \sum_{r=0}^n \frac{(-1)^r n!}{r! (n-r)!} x^{2(n-r)},$$

のように変形することができる。なぜなら, $r > \lfloor n/2 \rfloor$ のとき, 2(n-r) が n より小さい整数なので $x^{2(n-r)}$ の n 階微分が, 必ず, ゼロとなるからである。総和記号の内側に位置する $x^{2(n-r)}$ の係数が二項係数になっていることに注目すれば, その結果としてロドリグの公式が得られる。

4.4.2 シュレーフリ積分

ルジャンドル多項式は、複素積分によって定義することもできる。複素積分によってル ジャンドル多項式を表現すると.

$$P_n(z) = \frac{2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+1}} dt,$$
(4.16)

となる。ここで,積分路は複素平面上の t=x を囲む単純閉曲線である。この積分はシュレーフリ積分と呼ばれる。

シュレーフリ積分によるルジャンドル多項式の表現を証明しよう。まず, コーシーの積分公式によって,

$$(z^2 - 1)^n = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{t - z} dt,$$

が成立する。この式をzについてn階微分して $2^{-n}/n!$ を乗じると、

$$P_n(z) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n} (z^2 - 1)^n = \frac{2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^n}{(t - z)^{n+1}} \mathrm{d}t,$$

が得られる。よって、シュレーフリ積分による表現が証明された。¶

検算の意味で、シュレーフリ積分によって定義されたルジャンドル多項式がルジャンドル微分方程式の解であることを示そう。シュレーフリの公式 (4.16) を微分すると、

$$\frac{\mathrm{d}P_n}{\mathrm{d}z} = \frac{(n+1)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2-1)^n}{(t-z)^{n+2}} \mathrm{d}t,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 P_n}{\mathrm{d}z^2} = \frac{(n+1)(n+2)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2-1)^n}{(t-z)^{n+3}} \mathrm{d}t,$$

が得られる。シュレーフリの公式 (4.16) とこれらの導関数をルジャンドルの微分方程式に 代入すると、

$$(1-z^2) P_n''(z) - 2z P_n'(z) + n (n+1) P_n(z)$$

$$= \frac{(n+1)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2-1)^n}{(t-z)^{n+3}} \left(n+2-2zt-2nzt+nt^2\right) dt$$

$$= \frac{(n+1)2^{-n}}{2\pi i} \oint \frac{d}{dt} \left[\frac{(t^2-1)^{n+1}}{(t-z)^{n+2}} \right] dt,$$

が得られる。任意の整数 n に対して,関数 $(t^2-1)^{n+1}/(t-z)^{n+2}$ が 1 価関数であるので,途中で t=z を通らなければ任意の閉曲線に沿った積分は必ずゼロになる。つまり,シュレーフリの公式 (4.16) によって与えられる関数 $P_n(z)$ はルジャンドルの微分方程式の解である。

次数nを整数以外の数 ν に拡張する場合には、積分路の選択に注意を要する。次数 ν に拡張したルジャンドルの多項式は、ルジャンドル関数と呼ばれ、

$$P_{\nu}(z) = \frac{2^{-\nu}}{2\pi i} \oint \frac{(t^2 - 1)^{\nu}}{(t - z)^{\nu+1}} dt,$$

なる形で記述できる。このルジャンドル関数をルジャンドルの微分方程式に代入すると,

$$(1 - z^{2}) P''_{\nu}(z) - 2z P'_{\nu}(z) + \nu (\nu + 1) P_{\nu}(z)$$

$$= \frac{(\nu + 1)2^{-\nu}}{2\pi i} \oint \frac{d}{dt} \left[\frac{(t^{2} - 1)^{\nu + 1}}{(t - z)^{\nu + 2}} \right] dt,$$

となる。この式の右辺をゼロにするには積分路の選択に注意が必要なのである。積分変数tを、

$$t \equiv r_1 e^{i\theta_1} \equiv r_{-1} e^{i\theta_{-1}} \equiv r_z e^{i\theta_z},$$

のような極座標表示をしよう。その場合,被積分関数内のブラケットの中に記述した関数は、

$$\frac{(t^2-1)^{\nu+1}}{(t-z)^{\nu+2}} = \frac{r_1^{\nu+1}r_{-1}^{\nu+1}}{r_z^{\nu+2}} e^{i[(\nu+1)(\theta_1+\theta_{-1})-(\nu+2)\theta_z]},$$

のように書くことができる。この関数の偏角を θ を書くならば、この数式から、

$$\theta = (\nu + 1)(\theta_1 + \theta_{-1}) - (\nu + 2)\theta_z,$$

が成立する。例えば、t=1を反時計回りに周回し、t=-1、zを周回しない場合、偏角は θ_1 のみを 2π だけ増加させたときの変化をする。すなわち、 θ は 2π ($\nu+1$) だけ増加する。次数 ν が整数でなければ偏角の増加分は 2π の整数倍にはならないので、周回積分はゼロではなく、その結果、 ν ジャンドルの微分方程式を満足しない。一方、t=1 と t=z を周回する積分路をとった場合、偏角は θ_1 と θ_z を 2π だけ増加させたときの変化をする。具体的な偏角の増加分は、 2π ($\nu+1-\nu-2$) = -2π となる。この場合、 ν に関係なく周回積分がゼ

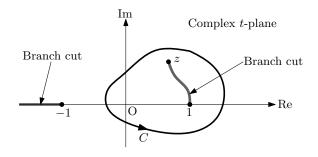


図 4.5: シュレーフリ積分の積分路

ロとなるため、シュレーフリ積分はルジャンドル微分方程式の解となる。つまり、シュレーフリ積分の積分路は、図 4.5 に示すように、積分変数 t の複素平面において、1 と z を反時計回りに周回する任意の単純閉曲線である。図中の淡色の線は分岐と呼ばれ、これを横切る曲線を積分路として選ぶと、整数以外の ν ではルジャンドル微分方程式を満たさない。

4.5 直交性

ルジャンドル多項式には、異なる次数間での直交性が成立する。直交性をもつ関数系は、 フーリエ変換における三角級数のように、物理学では有用である。ルジャンドル多項式の 直交性は、

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}, \tag{4.17}$$

4.5. 直交性 135

なる数式で表すことができる。ここで、 δ_{mn} はクロネッカーのデルタである。

ルジャンドル多項式の直交性は、ロドリグの公式を用いると証明できる。二つのルジャンドル多項式の積 $P_m(x)$ $P_n(x)$ を区間 [-1, 1] で積分すると、部分積分によって、

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \left\{ \left[P_n(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n \right]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} P'_n(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n dx \right\},$$
(4.18)

のように計算できる。後で証明するが、この積分の第1項はゼロである。したがって、

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = -\frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^{1} P'_m(x) \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} (x^2 - 1)^n dx,$$

が成立する。ここで、 $m \leq n$ としよう。積 $P_m(x)$ $P_n(x)$ は順序を交換しても不変なので、 $m \leq n$ なる条件を設けても一般性は失われない。部分積分を繰り返すと、

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) dx = \frac{1}{2^n n!} \int_{-1}^{1} P_m''(x) \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}} (x^2 - 1)^n dx$$
$$= \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^{1} P_m^{(n)}(x) (x^2 - 1)^n dx,$$

のようになる。この式の右辺は部分積分をn繰り返した結果である。ルジャンドル多項式 $P_m(x)$ は, x の m 次の多項式であるので, m < n のとき $P_m^{(n)}(x) = 0$ である。よって、この式の右辺はゼロである。続いて、m = n の場合を考えよう。このとき、上の式は、

$$\int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2 dx = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \int_{-1}^{1} P_n^{(n)}(x) (x^2 - 1)^n dx,$$

のように書き換えられる。ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ は n 次の多項式であるので、その n 階微分は定数となる。その定数は、(4.6) より、

$$P_n^{(n)}(x) = \frac{(2n)!}{2^n n!},$$

であることがわかる。これを上の式に代入すると.

$$\int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2 dx = \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \int_{-1}^{1} (1 - x^2)^n dx,$$

が得られる。ここで、 $x \equiv \sin \theta$ のように置き換えると、上の積分は、

$$\int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2 dx = \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \int_{-\pi/2}^{pi/2} \cos^{2n+1} \theta \, dt \, \theta,$$

のように変形される。この積分は、ウォリスの公式:

$$\int_0^{\pi/2} \cos^{2n+1} \theta \, d\theta = \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2n-2) \, 2n}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2n-1) \, (2n+1)},$$

がそのまま適用でき、その結果、

$$\int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1},$$

が得られる。つまり、これでルジャンドル多項式の直交性(4.17)が証明できた。¶

それでは、(4.18) の第 1 項がゼロになることを証明しよう。その事実を証明するには、 $m \geq 2$ の整数を与えたとき、 $(x^2-1)^m f(x)$ の導関数が必ず (x^2-1) で因数分解できることを示せばよい。ここで、f(x) は [-1,1] で正則な関数であるとする。実際に微分してみると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[(x^2 - 1)^m f(x) \right] = m (x^2 - 1)^{m-1} f(x) + (x^2 - 1)^m f'(x)$$
$$= (x^2 - 1)^{m-1} \left[m f(x) + (x^2 - 1) f'(x) \right],$$

が得られる。関数 f(x) が正則な関数であるので、必ず、f'(x) が存在し、ゆえに、ブラケット ([]) の中身は正則な関数とみなせる。したがって、 $(x^2-1)^m f(x)$ の導関数が、必ず、 $(x^2-1)^m f(x)$ の夢りとなる。さらに、この計算結果から、 $(x^2-1)^m f(x)$ の m-1 次までの導関数は (x^2-1) で因数分解できる。よって、 $(x^2-1)^m f(x)$ の m-1 次までの導関数は、 $x=\pm 1$ で ゼロとなる。ゆえに、(4.18) の第 1 項はゼロである。 ¶

4.6 ルジャンドル陪多項式

ヘルムホルツ方程式を変数分離したとき, 天頂角の依存性は厳密にルジャンドル微分方程式になるのではなく,

$$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - x^2}\right]y(x) = 0,$$
(4.19)

のような形になる。この微分方程式は**ルジャンドル陪微分方程式**と呼ばれる。とくに, *m* がゼロのとき, ルジャンドル陪微分方程式はルジャンドル微分方程式と一致する。

4.6.1 陪微分方程式の解

ルジャンドルの陪微分方程式の解を特定するため, ルジャンドル多項式から始めよう。 ルジャンドル多項式は, 方位角の分離定数について m=0 としたときの解であり, 微分方程式:

$$(1 - x^2) P_n''(x) - 2x P_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0,$$

の解である。この方程式を m 階微分すると、

$$(1-x^2) P_n^{(m+2)}(x) - 2x (m+1) P_n^{(m+1)}(x) + (n^2 + n - m^2 - m) P_n^{(m)}(x) = 0,$$

が得られる。数式変形には、2つの関数の積の高次導関数を得るためのライプニッツの公式を利用した。ここで、 $u(x) \equiv P_n^{(m)}(x)$ とおくと、上の微分方程式は、

$$(1 - x^2) u''(x) - 2x (m+1) u'(x) + (n^2 + n - m^2 - m) u(x) = 0, (4.20)$$

のように書くことができる。この方程式は自己随伴 3 ではないので,自己随伴になるように方程式を変形しよう。そのために, $v(x)\equiv (1-x^2)^{m/2}\,u(x)$ を定義する。この定義式をu(x) について解き,x について微分すると,

$$\begin{split} u(x) &= (1 - x^2)^{-m/2} \, v(x), \\ u'(x) &= \left(v'(x) + \frac{mx \, v(x)}{1 - x^2} \right) (1 - x^2)^{-m/2}, \\ u''(x) &= \left[v''(x) + \frac{2mx \, v'(x)}{1 - x^2} + \frac{m \, v(x)}{1 - x^2} + \frac{m \, (m + 2) \, x^2 \, v(x)}{(1 - x^2)^2} \right] (1 - x^2)^{-m/2}, \end{split}$$

が得られる。これらを(4.20)に代入すると、

$$(1 - x^2)v''(x) - 2xv'(x) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - x^2}\right]v(x) = 0,$$

が得られる。これは前に示したルジャンドルの陪微分方程式である。すなわち, ルジャンドルの陪微分方程式の解は.

$$y(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_n(x),$$

この解は、媒介変数nだけでなく、mによっても個別に定めることができるので、 $P_n^m(x)$ のように添え字を2つ伴って記述される。この関数は、nジャンドル陪多項式と呼ばれ、

$$P_n^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_n(x), \tag{4.21}$$

と書くことができる。ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ が n 次の多項式であるので, m>n となれば, $P_n^m(x)$ はゼロとなる。したがって, ゼロでない解を期待するには $m\leq n$ が条件となる。

計算機による数値計算のため、ルジャンドルの陪多項式を級数で記述してみよう。陪多項式の定義 (4.21) から、 $(1-x^2)^{-m/2}P_n^m(x)$ を計算すると、

$$\frac{\mathrm{d}^m P_n}{\mathrm{d}x^m} = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)! (n-2k)(n-2k-1) \cdots (n-2k-m+1)}{2^n k! (n-k)! (n-2k)!} x^{n-2k-m}$$

$$= \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k! (n-k)! (n-2k-m)!} x^{n-2k-m},$$

³自己随伴の微分方程式とは, p(x)u''(x)+p'(x)u'(x)+q(x)=0 の形の方程式である。

が得られる。この式の両辺に $(1-x)^{m/2}$ を乗じると,

$$P_n^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-m)/2 \rfloor} \frac{(-1)^k (2n - 2k)!}{2^n k! (n-k)! (n-m-2k)!} x^{n-m-2k}, \tag{4.22}$$

が得られる。途中計算と違い、(4.22) の総和の上限が $\lfloor (n-m)/2 \rfloor$ に書き換えられているのは、k がその値を超えると展開係数がゼロになってしまうからである。

ルジャンドル陪多項式の第 2 の媒介変数 m は、今のところ、0 から n までの整数であるとしているが、-n から n までの整数へ拡張が可能である。定義式 (4.21) だけでは、m が 負になると、マイナス 2 階微分などが必要になり、負の次数のルジャンドル陪多項式が定義できないのであるが、ロドリグの公式 (4.15) を用いて定義式 (4.21) を書き換えると、

$$P_n^m(x) = \frac{1}{2^n n!} (1 - x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}} (x^2 - 1)^n, \tag{4.23}$$

が得られる。この書き換えられた定義式によって、これならば、媒介変数 m が -n から n の範囲へ拡張ができるのである。この新たな定義式を用いて、 $P_n^m(x)$ と $P_n^{-m}(x)$ を計算すると、

$$\begin{split} P_n^m(x) &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=m}^n \binom{n+m}{k} \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} (x-1)^n \frac{\mathrm{d}^{n+m-k}}{\mathrm{d}x^{n+m-k}} (x+1)^n \\ &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \binom{n+m}{k+m} \frac{\mathrm{d}^{k+m}}{\mathrm{d}x^{k+m}} (x-1)^n \frac{\mathrm{d}^{n-k}}{\mathrm{d}x^{n-k}} (x+1)^n \\ &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n+m)!}{(k+m)! (n-k)!} \frac{n!}{(n-k-m)!} \frac{n!}{k!} (x-1)^{n-k-m} (x+1)^k, \\ P_n^{-m}(x) &= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{-m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \binom{n-m}{k} \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} (x-1)^n \frac{\mathrm{d}^{n-m-k}}{\mathrm{d}x^{n-m-k}} (x+1)^n \\ &= \frac{(-1)^m}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n-m)!}{k! (n-m-k)!} \frac{n!}{(n-k)!} \frac{n!}{(m+k)!} (x-1)^{n-k-m} (x+1)^k, \end{split}$$

が得られる。なお、上の計算は $x^2 - 1 = (x - 1)(x + 1)$ を用いてライプニッツの公式を適用した。この計算結果から、

$$P_n^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(x), \tag{4.24}$$

なる関係が得られる。この関係式から、 $-n \le m \le n$ の範囲でルジャンドル陪多項式 $P_n^m(x)$ が定義できたことになる。具体的な数値研鑽に関しては、正の m については展開式 (4.22) を用いて計算すればよく、負の m に関しては、関係式 (4.24) を用いて正の次数から負の次数に変換すればよい。

4.6.2 パリティ

ルジャンドル陪多項式もルジャンドル多項式と同様にパリティの関係を決定できる。ル ジャンドル多項式のパリティから、

$$P_p^0(-x) = (-1)^p P_p^0(x),$$

であることは明らかである。パリティを決定するには、ルジャンドル陪多項式の定義式:

$$P_p^m(x) \equiv (1 - x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_p^m(x),$$

に注目する。偶数階の微分で関数の偶奇性が変化せず, 奇数階の微分で偶奇性が反転する。一方, $(1-x^2)^{m/2}$ に注意が必要である。括弧の中が偶関数であるので, m が偶数であれば $(1-x^2)^{m/2}$ は偶関数である。一方, m が奇数の場合, $(1-x^2)^{m/2}$ は多項式の平方根となるので, 正負の符号を選ぶ自由度が生じるのだが, 必ず, 正の符号をとることにすれば,

$$P_p^m(-x) = (-1)^{p+m} P_p^m(x), (4.25)$$

なるパリティ関係を得ることができる。

4.6.3 直交性

ルジャンドル陪多項式もルジャンドル多項式と同様の直交性があり、

$$\int_{-1}^{1} P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{2}{2p+1} \frac{(p+m)!}{(p-m)!} \delta_{pq}, \tag{4.26}$$

が成立する。本節ではその関係式を導出する。

まず, 導出にあたり $p \ge q$ としておこう。積は順序を交換することが可能なので, この条件は一般性を損なわない。ロドリグの公式から派生した定義式 (4.23) によって, ルジャンドル陪多項式どうしの内積は,

$$\int_{-1}^{1} P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{(-1)^m}{2^{p+q} p! \, q!} \int_{-1}^{1} X^m \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d} x^{p+m}} X^p \, \frac{\mathrm{d}^{q+m}}{\mathrm{d} x^{q+m}} X^q \, \mathrm{d} x,$$

のように書くことができる。ただし, $X \equiv x^2 - 1$ である。右辺の積分を実行するにあたり, 部分積分を適用すると,

RHS =
$$\frac{(-1)^m}{2^{p+q}p! \, q!} \left\{ \left[X^m \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d}x^{p+m}} X^p \frac{\mathrm{d}^{q+m-1}}{\mathrm{d}x^{q+m-1}} X^q \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(X^m \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d}x^{p+m}} X^p \right) \frac{\mathrm{d}^{q+m-1}}{\mathrm{d}x^{q+m-1}} X^q \, \mathrm{d}x \right\},$$

のように数式変形される。右辺の第 1 項は, $x = \pm 1$ で X = 0 となるため, 必ず, ゼロである。さらに, 部分積分を繰り返し, k 回目では,

RHS =
$$\frac{(-1)^{m+k}}{2^{p+q}p! \, q!} \left\{ \left[\frac{\mathrm{d}^{k-1}}{\mathrm{d}x^{k-1}} \left(X^m \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d}x^{p+m}} X^p \right) \frac{\mathrm{d}^{q+m-k+1}}{\mathrm{d}x^{q+m-k+1}} X^q \right]_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} \left(X^m \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d}x^{p+m}} X^p \right) \frac{\mathrm{d}^{q+m-k}}{\mathrm{d}x^{q+m-k}} X^q \, \mathrm{d}x \right\},$$

となることが予想できる。この予想は、右辺の第 1 項が、必ず、ゼロになる前提で成立するので、第 1 項がゼロになることを示せばよい。前節で示したように、 $X^m f(x)$ の m-1 階 微分までが、 $x=\pm 1$ でゼロとなる。その事実を利用すれば、

$$\frac{\mathrm{d}^{k-1}}{\mathrm{d}x^{k-1}} \left(X^m \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d}x^{p+m}} X^p \right) = 0, \qquad \text{if } k \le m$$

$$\frac{\mathrm{d}^{q+m-k+1}}{\mathrm{d}x^{q+m-k+1}} X^q = 0, \qquad \text{if } k \ge m+1$$

が導かれるので、部分積分の第 1 項が、必ず、ゼロになることが示された。したがって、部分積分を q+m 回繰り返すと、

$$\int_{-1}^{1} P_p^m(x) P_q^m(x) dx = \frac{(-1)^{q+2m}}{2^{p+q} p! q!} \int_{-1}^{1} \frac{d^{q+m}}{dx^{q+m}} \left(X^m \frac{d^{p+m}}{dx^{p+m}} X^p \right) X^q dx,$$

が得られる。この被積分関数は、ライプニッツの公式を用いて展開すると、

$$X^{q} \frac{\mathrm{d}^{q+m}}{\mathrm{d}x^{q+m}} \left(X^{m} \frac{\mathrm{d}^{p+m}}{\mathrm{d}x^{p+m}} X^{p} \right) = X^{q} \sum_{k=0}^{p+m} \frac{(q+m)!}{k! (q+m-k)!} \frac{\mathrm{d}^{q+m-k}}{\mathrm{d}x^{q+m-k}} X^{m} \frac{\mathrm{d}^{q+m+k}}{\mathrm{d}x^{q+m+k}} X^{p}$$

となる。ここで、 X^m の最高次が x^{2m} の項であることに注意すると、2m 階を越える微分はゼロとなる。つまり、総和の対象となる項がゼロ以外の値となる条件は、 $q+m-k \le 2m$ 、かつ、 $p+m+k \le 2p$ である。これを整理すると、 $q-m \le k$ 、かつ、 $k \le p-m$ となる。まず、p>q のとき、これら 2 つの条件を同時に満足する k は存在しない。したがって、

$$\int_{-1}^{1} P_p^m(x) P_q^m(x) dx = 0, \quad \text{if } p \neq q$$

である。一方, p=q のとき, ゼロ以外の値となる項は k=p+m の項のみである。したがって,

$$\int_{-1}^{1} [P_p^m(x)]^2 dx = \frac{(-1)^{p+2m}(p+m)!}{2^{2p}p! \, p! \, (2m)! \, (p-m)!} \int_{-1}^{1} X^p \, \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} X^m \, \frac{d^{2p}}{dx^{2p}} X^p \, dx$$

である。ところで、

$$\frac{\mathrm{d}^{2m}}{\mathrm{d}x^{2m}}X^m = \frac{\mathrm{d}^{2m}}{\mathrm{d}x^{2m}}(x^2 - 1) = (2m)!$$

4.7. 球面調和関数 141

であることに注意すると.

$$\int_{-1}^{1} [P_p^m(x)]^2 dltx = \frac{(-1)^{p+2m} (2p)! (p+m)!}{2^{2p} p! p! (p-m)!} \int_{-1}^{1} X^p dx,$$

$$= \frac{(-1)^{p+2m} (2p)! (p+m)!}{2^{2p} p! p! (p-m)!} \int_{0}^{\pi} \sin^{2p+1} \theta d\theta$$

$$= \frac{2}{2p+1} \frac{(p+m)!}{(p-m)!}$$

が得られる。したがって、ルジャンドル陪多項式の直交性を表す (4.26) が証明された。¶ 直交性を表す (4.26) は極座標を用いて記述すると、

$$\int_0^{\pi} P_p^m(\cos \theta) \, P_q^m(\cos \theta) \, \sin \theta \, d\theta = \frac{2}{2p+1} \frac{(p+m)!}{(p-m)!} \delta_{pq}, \tag{4.27}$$

となる。方位方向の分離定数が m=0 の場合, ルジャンドル陪多項式はルジャンドル多項式と一致する。その場合, 直交性を表す数式 (4.26) もルジャンドル多項式の直交性と一致している。

4.7 球面調和関数

ルジャンドル陪多項式の応用例として球面調和関数を紹介しよう。球面調和関数は, ヘルムホルツ方程式やシュレーディンガー方程式の解の中に現れる方位角と天頂角の依存性を表す関数である。本節では, ヘルムホルツ方程式の解法から球面調和関数を導入する。

4.7.1 ヘルムホルツ方程式の解

電磁界の波動関数 4 を $\psi(\mathbf{r})$ としたとき、ヘルムホルツの方程式は、 $(\nabla^2 + k^2)\psi = 0$ と書くことができる。この方程式は、本来、波動方程式:

$$\left(\nabla^2 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \psi = 0,$$

から派生した方程式である。この波動方程式に、時間依存性 $e^{i\omega t}$ を仮定すると、ヘルムホルツの波動方程式が得られる。ただし、 $k\equiv\omega/c$ である。これらの方程式で用いた記号は、 ω が電磁場の各周波数に、k が波数に対応する。

 $^{^4}$ 電場か磁束密度か,また,どの座標成分かは特定しない。特定しないでも同じ法則が成立するからである。

球面座標系 $[r, \theta, \varphi]$ についてヘルムホルツ方程式を解いてみよう。この座標系の角成分は、順に、動径座標、天頂角座標、方位角座標である。ヘルムホルツの方程式を球面座標で記述すると、

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + k^2 \psi = 0, \tag{4.28}$$

となる。この方程式を解くには、変数分離を利用する。つまり、 $\psi(r,\theta,\varphi) \equiv R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ とおいて方程式を解くのである。この定義式をヘルムホルツの方程式に代入すると、

$$\frac{\Theta\Phi}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{R\Phi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{R\Theta}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + k^2R\Theta\Phi = 0,$$

のように方程式は変形される。この方程式に r^2/R を乗じると, 第 2 項と第 3 項から r の依存性を排除できる。残された第 1 項と第 4 項はは, $1/\Theta \Phi$ を乗じると, r のみにしか依存しない。そこで, ヘルムホルツの方程式を 2 つの式:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \tag{4.29a}$$

$$\frac{\Phi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left[l \left(l + 1 \right) \Theta \Phi + \frac{\Theta}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \right] = 0, \tag{4.29b}$$

に分離する。前者はr以外の依存性を排除できているので常微分方程式である。ところで、新たにl(l+1)を含む項が登場しているが、(4.29a)を Θ Φ倍し、(4.29b)を R/r^2 倍して、互いを加算すると、l(l+1)を含む項が相殺され、ヘルムホルツの方程式に戻る。また、新たに追加した項にl(l+1)を設定した理由は後に説明する。

方位角の依存性について、当然、1 価関数でなければならないので、 $\Phi(\varphi)$ は φ について 周期 2π の関数である。そこで、整数 m を用いて、 $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$ であるとしよう。方 位角の依存性関数が単純に Φ でなく、 Φ_m としたのは、任意の整数 m に対して個別に解が 設定できるからである。すると、(4.29b) は、

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \left(\sin \theta \frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta} \right) + \left[l \left(l + 1 \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \tag{4.29c}$$

のような常微分方程式に変形される。これは既に取り扱ったルジャンドルの陪微分方程式である。この方程式は,lが整数でなければ収束解が存在しない。これが,先ほど項を追加した際に,l(l+1)を設定した理由である。これまでに学んだ内容から,この方程式の解が,

$$\Theta_l^m(\theta) = C P_l^m(\cos \theta),$$

であることが容易にわかる。ただし, C は定数である。天頂角の依存性関数は, 媒介変数 l と m の組合せに対して個別に解が設定できるので, Θ_l^m のように添え字を付加した。ここで, $-l \le m \le l$ である。

4.7. 球面調和関数 143

先ほど、方位角の依存関数を $\Phi_m(\varphi)=e^{im\varphi}/\sqrt{2\pi}$ と設定した。この設定は、

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m(\varphi) \, \Phi_n(\varphi) \, \mathrm{d}\varphi = \delta_{mn},$$

のように正規化されたことを意味する。天頂角の依存性関数についても同様の正規化:

$$\int_0^{\pi} \Theta_p^m(\theta) \, \Theta_q^m(\theta) \, \mathrm{d}\theta = \delta_{pq},$$

を要求すると、定数Cが定まり、

$$\Theta_l^m(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta),$$

が得られる。方位角と天頂角の依存性関数の積 $Y_l^m(\theta,\varphi) \equiv \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ は球面調和関数と呼ばれる。つまり, 球面調和関数は,

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \tag{4.30}$$

である。この関係式は、 $-l \le m \le l$ なる整数 m について成立するが、 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ と $Y_l^{-m}(\theta,\varphi)$ の関係を調べておこう。ルジャンドル陪多項式の方位角の分離変数 m の正負次数の対応関係 (4.24) から、

$$Y_{l}^{-m}(\theta,\varphi) = (-1)^{m} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{l}^{m}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \tag{4.31}$$

が導出される。この関係式を用いると、(4.30)は、

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \tag{4.32}$$

のように書き換えられる。これらの数式にしたがって球面調和関数を計算すると、

$$\begin{split} Y_0^0(\theta,\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_1^0(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta,\varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \, e^{\pm i\varphi}, \\ Y_2^0(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right), \\ Y_2^{\pm 1}(\theta,\varphi) &= \mp \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \, 3 \sin \theta \cos \theta \, e^{\pm i\varphi}, \quad Y_2^{\pm 2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{96\pi}} \, 3 \sin^2 \theta \, e^{\pm 2i\varphi}, \end{split}$$

が得られる。

本節は球面調和関数の説明をすれば十分であるが、動径方向の依存関数 R(r) を放置するのはいささか気持ち悪いので、R(r) についても微分方程式を解いてみる。動径座標の依存性に関するヘルムホルツの方程式 (4.29a) は、

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}(kr)^2} + \frac{2}{kr} \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}(kr)} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{(kr)^2}\right] R = 0,$$

のように書き換えられる。この方程式は、第3章で取り扱った球ベッセルの微分方程式で ある。したがって、その解は、

$$R_l(r) = h_l^{(2)}(kr) = \frac{H_{l+1/2}^{(2)}(kr)}{\sqrt{kr}},$$
 (4.33)

のように書くことができる。ここで、解は任意の整数lについて設定できるため、 R_l のように添え字を付加した。また、 $h_l^{(2)}$ は第2種の球ハンケル関数である。第2種の関数は原点から無限遠へ放射される電磁場を意味する。数学的には第1種のハンケル関数も解となるのだが、無限遠から原点への電磁場の入力を意味するので、物理学的な興味はなく、解の対象としない。また、半奇整数次のベッセル関数は初等関数を用いて厳密に記述することができる。いくつかの例を書いておくと、

$$h_0^{(2)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-ikr} \frac{e^{\pi i/2}}{kr}, \qquad h_1^{(2)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-ikr} \left(\frac{e^{\pi i/2}}{k^2 r^2} - \frac{1}{kr} \right),$$

$$h_2^{(2)}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-ikr} \left(\frac{3e^{\pi i/2}}{k^3 r^3} - \frac{3}{k^2 r^2} - \frac{e^{\pi i/2}}{kr} \right),$$

となる。これらの数式を見ると, l=0 は原点に配置された点波源, l=1 は双極子を含む波源, l=2 は 4 重極子を含む波源に対応することがわかる。

計算されたヘルムホルツ方程式の解に含まれる球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ を描くと図 4.6 のようになる。球面調和関数の大きさ $|Y_l^m(\theta,\varphi)|$ は、 θ と φ で指定される方向の電磁場の強さを表現している。 既に説明したように, $Y_0^0(\theta,\varphi)$ は単極子に対応する解なので関数は球面を描く。高次の球面調和関数は多重極子に対応する解なので,複雑な形状となる。水素原子モデルにおける電子の波動関数 5 でも同様の形状が現れる。

4.7.2 量子力学の角運動量

球面調和関数は,量子力学における水素原子の電子の波動方程式にも現れる。その波動 関数において,球面調和関数は電子の軌道角運動量と関係している。球面調和関数の応用 例として,その事実を紹介しよう。

⁵電子の波動方程式はシュレーディンガーの方程式の解であり、その方程式にもラプラシアンが含まれるため、その解には球面調和関数が現れる。

4.7. 球面調和関数 145

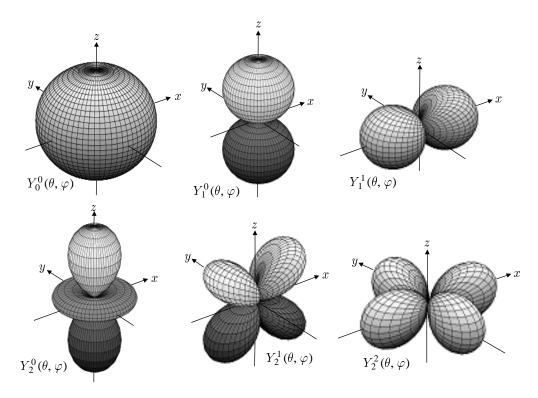


図 4.6: 球面調和関数

原子核が原点に位置するように座標を選んだ場合、電子の軌道角運動量は $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ となる。ここで、 \mathbf{r} は電子の位置、 \mathbf{p} は電子の運動量である。カルテシアン座標系では、 $\mathbf{r} = [x,y,z]$ 、 $\mathbf{p} = [p_x,p_y,p_z]$ のように成分表示できる。ところが、量子力学では運動量の成分は、

$$\mathbf{p} = \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right],$$

なる演算子で書くことができる。この演算子表示を用いて角運動量 $\mathbf{L} = [L_x, L_y, L_z]$ の各成分を書き下すと、

$$L_{x} = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

$$L_{y} = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

$$L_{z} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

となる。これらの演算子を球面座標系で書き直してみよう。球面座標系の座標 $[r, \theta, \varphi]$ は、

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta,$$

なる数式でカルテシアン座標と関係づけられている。この関係式を用いて、カルテシアン

座標系の座標についての偏微分演算子を書き換えると,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \tag{4.34a}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \tag{4.34b}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \tag{4.34c}$$

が得られる。これを用いて角運動量の各成分を計算すると、

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \tag{4.35a}$$

$$L_{y} = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \tag{4.35b}$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},\tag{4.35c}$$

が得られる。この結果を利用して、角運動量の大きさの自乗を計算すると、

$$\begin{split} \boldsymbol{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \end{split}$$

が得られる。第 6.3 節で導出するが、電子の波動関数を $\psi(r,\theta,\varphi)$ とすると、シュレーディンガー方程式の天頂角と方位角の依存性は、

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + l (l+1) \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = 0, \tag{4.36}$$

のように書くことができる。この方程式は、第 4.7.1 項で導出したヘルムホルツ方程式における電磁場の天頂角と方位角の依存性と一致する。つまり、この方程式の解は球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ となるはずである。一方、天頂角と方位角の依存性に関する微分方程式には角運動量の大きさの自乗が含まれている。したがって、シュレーディンガー方程式の天頂角と方位角の依存性は、

$$L^{2} \psi(r, \theta, \varphi) = l (l+1) \hbar^{2} \psi(r, \theta, \varphi), \tag{4.37}$$

なる形式に書き直すことができる。この方程式は演算子 L^2 に関する固有方程式となっている。演算子 L^2 の固有関数が $\psi(r,\theta,\varphi)$ で、対応する固有値が $l(l+1)\hbar^2$ である。量子力

4.7. 球面調和関数 147

学の数式では、演算子は測定を意味し、固有値はその測定値である。つまり、水素原子の電子の軌道角運動量の大きさのを測定すると、 $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ が測定されるのだ。しかも、先ほど述べたように、微分方程式の解、すなわち、演算子 \mathbf{L}^2 に対する固有関数が $Y_l^m(\theta,\varphi)$ であることから、l は整数でなければならない。しかも、ベクトルの大きさの自乗であるので、l はゼロまたは正の整数である。

球面調和関数のもう一方の媒介変数 m も整数である。波動関数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ に球面調和関数が含まれ、しかも、その方位角依存性が $e^{im\varphi}$ であるので、波動関数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ に、軌道角運動量の z 成分に対応する演算子 L_z を作用させると、

$$L_z \, \psi(r,\theta,\varphi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = m\hbar \, \psi(r,\theta,\varphi),$$

となる。つまり、演算子 L_z の固有値は $m\hbar$ 、すなわち、軌道角運動量の z 成分を観測すると、 $m\hbar$ が得られる。角運動量の大きさが、

$$l\hbar \le \sqrt{l(l+1)}\,\hbar \le \left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar,$$

である 6 ことに注意すると, $|m| \le l$ でなければならない。これは, 角運動量の z 成分の大きさが角運動量全体の大きさより大きくなれないからである。つまり, ある特定の整数 l

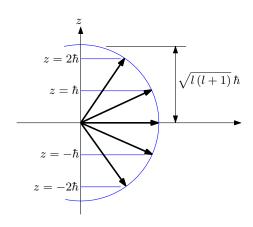


図 4.7: 電子の軌道角運動量 (l = 2)

に対して、2l+1 通りの m が選択可能である。既に学んだように、球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ にはルジャンドル陪多項式 $P_l^m(\theta,\varphi)$ が含まれているて、その関数は、 $|m| \leq l$ の整数でしか定義されていなかった。角運動量として m に要請される制限は、ルジャンドル陪多項式の数学的な制限と一致するのである。

⁶等号が成り立つのはl=0のときであり,lが大きくなると $(l+1/2)\hbar$ に近づく。

4.8 第2種ルジャンドル関数

ルジャンドル微分方程式は、2階の微分方程式であるので2つの独立した解が存在する。 ルジャンドル微分方程式の解して、既にルジャンドル多項式を導入した。本節では、もう 一方の解として第2種ルジャンドル多項式を導入する。

4.8.1 ルジャンドル多項式の構成

ルジャンドル微分方程式の第2の解を導入する準備としてルジャンドル多項式の構成を 調べよう。第4.1.1 項で, ルジャンドル微分方程式の級数解としてルジャンドル多項式を 導入する際, 多項式の最高次数が偶数である場合と, 奇数である場合に分類した。本項で は, それらの場合におけるルジャンドル多項式の構成を調べる。

最高次数が偶数である場合 (4.4) と、奇数である場合 (4.5) を個別に調べると、次のように定義される多項式 $p_n(x)$ と $q_n(x)$ がルジャンドル多項式に含まれることがわかる。

$$p_n(x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} n (n-2) \cdots (n-2k+2) \times (n+1)(n+3) \cdots (n+2k-1)x^{2k}, \qquad (4.38a)$$

$$q_n(x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} (n-1)(n-3) \cdots (n-2k+1) \times (n+2)(n+4) \cdots (n+2k)x^{2k+1}.$$
 (4.38b)

多項式 $p_n(x)$ と $q_n(x)$ はルジャンドル多項式 $P_n(x)$ を $1/c_0$ 倍した多項式である。そのうち、 $p_n(x)$ が n が偶数の場合に対応し、 $q_n(x)$ は n が奇数の場合に対応する。具体的には、ルジャンドル多項式は、

$$P_n(x) = \begin{cases} \frac{(-1)^m (2m)!}{2^{2m} (m!)^2} p_n(x) & \text{if } n = 2m, \\ \frac{(-1)^m (2m+1)!}{2^{2m} (m!)^2} q_n(x) & \text{if } n = 2m+1, \end{cases}$$
(4.39)

のように書くことができる。ところで、上に書いた $p_n(x)$ と $q_n(x)$ の定義式は、無限級数として書いてあるが、特定の次数以降でゼロとなるので実際には有限項の多項式である。

4.8.2 第2種ルジャンドル多項式の導入

ルジャンドル多項式は最高次数n が偶数と奇数の場合で、それぞれ、 $p_n(x)$ と $q_n(x)$ を用いていた。単純にその規則を逆にして、最高筋数n が偶数のときに $q_n(x)$ 、奇数のときに

 $p_n(x)$ を用いれば、ルジャンドル関数とは異なる関数を定義できる。

最高次数nが偶数のときに $q_n(x)$ を用いると、級数は有限項でとどまらず、無限級数となる。それは、nが奇数のときの $p_n(x)$ も同じである。その事実から、級数 $q_n(x)$ と $p_n(x)$ の収束性に注意が必要である。これらの級数の収束半径は、ともに|x|<1である。この収束条件に示すように $x=\pm1$ で収束しない。 それは、次のようにして示すことができる。

級数 $p_n(x)$ の 2k 次の係数を c_{2k} としよう。この級数について隣り合う次数の係数の比率 c_{2k+2}/c_{2k} は $k \to \infty$ の極限で、

$$\lim_{k \to \infty} \frac{c_{2k+2}}{c_{2k}} = \lim_{k \to \infty} \left[-\frac{(n-2k+4)(n+2k-3)}{(2k+1)(2k+2)} \right] = 1,$$

となる。つまり, $k\to\infty$ の極限で, 隣り合う係数は同符号で同じ大きさである。したがって, 級数 $p_n(x)$ は |x|<1 では収束するが, そうでない場合には発散するのだ。これで, $p_n(x)$ の収束性を示すことができた。もう一方, $q_n(x)$ の収束性も同様の考察で示すことができる。¶

新たに導入する関数は、媒介変数nの偶奇と級数 $p_n(x)$ 、 $q_n(x)$ の関係をルジャンドル多項式 $P_n(x)$ と逆にするので、

$$Q_n(x) = \begin{cases} C_{2m} q_n(x) & \text{if } n = 2m, \\ D_{2m+1} p_n(x) & \text{if } n = 2m+1, \end{cases}$$
(4.40)

のように定義することができる。ここで, C_{2m} と D_{2m+1} は規格化係数である。この規格化係数を決定するため, 新たに導入する級数 $Q_n(x)$ も $P_n(x)$ と同一の漸化式:

$$Q_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} \left[(2n+1) x P_n(x) - n P_{n-1}(x) \right], \tag{4.41}$$

が成立することを要請しよう。まず, n=2m のとき, この漸化式に $p_n(x)$ と $q_n(x)$ の級数 展開を代入すると. 長い等式であるが.

$$(2m+1) D_{2m+1} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} (2m+1)(2m-1) \cdots (2m-2k+3) \cdot (2m+2)(2m+4) \cdots (2m+2k) x^{2k} \right]$$

$$= (4m+1) C_{2m} \left[x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} (2m-1)(2m-3) \cdots (2m-2k+1) \cdot (2m+2)(2m+4) \cdots (2m+2k) x^{2k+1} \right]$$

$$- 2m D_{2m-1} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} (2m-1)(2m-3) \cdots (2m-2k+1) \cdot (2m)(2m+2) \cdots (2m+2k-2) x^{2k} \right],$$

が得られる。この等式について、定数項(ゼロ次の係数)のみに注目すると、

$$D_{2m+1} = -\frac{2m}{2m+1}D_{2m-1},$$

なる漸化式が得られる。続いて1次の係数に注目すると,

$$C_{2m} = -(2m+1) D_{2m+1},$$

が得られる。この条件を満たす規格化係数は、

$$D_{2m+1} = (-1)^{m+1} \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2m+1)},$$

$$C_{2m} = (-1)^m \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)},$$

が挙げられる。特に, $D_1 = -1$, $C_0 = 1$ である。この結果を用いて $Q_n(x)$ を記述すると,

$$Q_n(x) = \begin{cases} (-1)^m \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)} \cdot q_n(x) & \text{if } n = 2m, \\ (-1)^{m+1} \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2m)}{3 \cdot 5 \cdot 7 \cdots (2m+1)} \cdot p_n(x) & \text{if } n = 2m+1, \end{cases}$$
(4.42)

のようになる。新たに導入した関数 $Q_n(x)$ はルジャンドル微分方程式の解であるので、第 2種ルジャンドル関数 7 と呼ばれる。しかも、第 2種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ は、ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ と同一の漸化式 (4.41) を満たす。

導入した第 2 種ルジャンドル関数は、実は、初等関数を用いて書くことができる。まず、(4.42) を用いて $Q_0(x)$ と $Q_1(x)$ を計算しよう。対応する規格化係数が $C_0=1$, $D_1=-1$ であることに注意すると、

$$Q_0(x) = q_0(x) = x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} + \frac{x^7}{7} + \cdots,$$

$$Q_1(x) = q_0(x) = 1 - x^2 - \frac{x^4}{3} - \frac{x^6}{5} - \frac{x^8}{7} + \cdots,$$

が得られる。これらの級数は,

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \log \frac{1+x}{1-x}, \quad Q_1(x) = \frac{x}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - 1,$$
 (4.43a)

である。さらに高次の $Q_n(x)$ は、級数を直接計算するよりも、漸化式(4.41)を利用するほうが容易に計算できる。その結果、

$$Q_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{4} \log \frac{1 + x}{1 - x} - \frac{3x}{2},$$
(4.43b)

$$Q_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{4} \log \frac{1+x}{1-x} - \frac{5x^2}{2} + \frac{2}{3},$$
 (4.43c)

が得られる。漸化式 (4.41) によるとさらに高次の $Q_n(x)$ にも $\log[(1+x)/(1-x)]$ が残ることが明らかなので,第 2 種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ は $x=\pm 1$ で発散する関数である。これらの関数をグラフとしてプロットすると図 4.8 のような曲線を描く。図中のどの曲線も $x=\pm 1$ で発散することがわかる。

 $^{^7}$ 既に述べたように, $Q_n(x)$ は有限項の多項式でなく, 無限級数であるので第 2 種ルジャンドル多項式とは呼ばずに, 第 2 種ルジャンドル関数と呼ぶことにする。

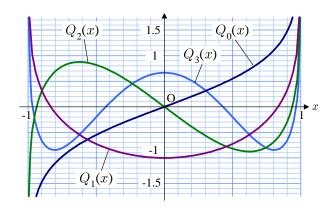


図 4.8: 第2種ルジャンドル関数

級数として表現した場合, $Q_n(x)$ は $|x| \ge 1$ では発散する。一方, 級数の収束半径の中 |x| < 1 では、上に述べたように $Q_n(x)$ が対数関数を用いて厳密に表現できる。複素関数における解析接続という考え方を用いると、級数の収束半径の外では、級数の代わりに対数関数を用いた表現を $Q_n(x)$ とすることができる。そのようにすることで、第 2 種ルジャンドル関数の定義域を複素数全体に拡張することができる。解析接続による定義域の拡張は、第 1 で階乗をガンマ関数として拡張する際にも用いた。定義域を拡張した第 2 種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ を x > 1 についてプロットすると図 4.9 のようになる。ただし、x > 1 では対数関数の変数が負になるので、 $Q_n(x)$ は複素数となる8。図 4.9 はその複素関数値の実

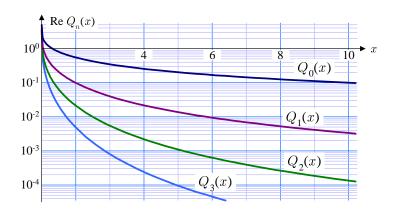


図 4.9: 遠方 (x > 1) における第 2 種ルジャンドル関数の実部

部をプロットしたグラフである。グラフに示すように関数の実部はxの増加とともに減少し、無限遠ではゼロになる。

 $^{^8}$ 負の数の対数関数を考えるには, $-x=xe^{\pm\pi i}$ に注意すればよい。すなわち, $\log(-x)=\log x\pm\pi i$ である。ただし, この関係式にも現れているように, 対数関数は多価関数であるので, 主値を定義しなければならないが, ここではその言及はしないことにする。

4.8.3 第1種ルジャンドル多項式との関係

第2種ルジャンドル関数 $Q_n(x)$ は,第1種ルジャンドル関数 $P_n(x)$ を用いて関数の定義ができる。それら2つの関数はルジャンドル微分方程式の独立な解とはいえ,密接な関係があるのだ。その関係とは,

$$Q_n(x) = -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(t)}{t - x} dt, \qquad (4.44)$$

なる関係式である。この関係式はノイマン表現と呼ばれる。

ノイマン表現 (4.44) を数学的帰納法によって証明しよう。まず, $P_0(t)=1$, $P_1(t)=t$ に注意して (4.44) の右辺を計算すると,

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \log \frac{1+x}{1-x}, \qquad Q_1(x) = \frac{x}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - 1,$$

が得られ、確かに、前項で計算した第2種ルジャンドル関数と一致している。続いて、任意の次数n-1とnについて (4.44) が成立すると仮定し、n+1でも関係式が成立することを示す。そのためには $Q_n(x)$ に関する漸化式を利用する。計算をすると、

$$(2n+1)xQ_{n}(x) - nQ_{n-1}(x)$$

$$= -\frac{2n+1}{2}x\int_{-1}^{1}\frac{P_{n}(t)}{t-x}dt + \frac{n}{2}\int_{-1}^{1}\frac{P_{n-1}(t)}{t-x}dt$$

$$= -\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{(2n+1)xP_{n}(t) - nP_{n-1}(t)}{t-x}dt$$

$$= -\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{(2n+1)tP_{n}(t) - nP_{n-1}(t)}{t-x}dt + \int_{-1}^{1}(2n+1)P_{n}(x)dt$$

$$= -\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{(n+1)P_{n+1}(t)}{t-x}dx = (n+1)Q_{n+1}(x),$$
(4.45)

が得られる。この計算の第4行目から第5行目への数式変形ではルジャンドル関数 $P_n(x)$ に関する漸化式を適用した。また、この数式変形は、

$$\int_{-1}^{1} P_n(t) \, \mathrm{d}t = 0,$$

が成立することを利用している。次数nが奇数であれば $P_n(x)$ が奇関数であるのでこの等式は成立する。それが偶関数のときにもこの等式は成立するのか?成立することは後に証明する。数式変形 (4.45) によって $Q_n(x)$ の漸化式が得られるので,次数n+1 に対しても関係式 (4.44) が成立することが示せた。したがって,関係式 (4.44) は任意の次数について成立する。¶

ルジャンドル多項式 $P_n(t)$ を t について区間 [-1,1] で積分した結果がゼロになることを示そう。その証明には、ルジャンドル関数の母関数表示:

$$\sum_{k=0}^{\infty} P_n(t) \, \xi^k = (1 - 2\xi t + t^2)^{-1/2},$$

を利用する。この数式の両辺を個別に区間[-1,1]で積分し、それらの結果を等号で結ぶと、

$$\sum_{k=0}^{\infty} \int_{-1}^{1} \frac{P_n(t)}{k+1} \xi^k \, \mathrm{d}t = 2,$$

となる。この結果によって、

$$\int_{-1}^{1} P_0(t) dt = 2, \quad \int_{-1}^{1} P_k(t) dt = 0 \quad (k \ge 1),$$

が導かれた。偶関数が区間 [-1,1] での積分でゼロになるのは不思議に思うかもしれない。 実は、偶数次のルジャンドル多項式 $P_{2m}(t)$ は区間 [0,1] で積分するとゼロになる 9 のだ。それが、偶関数である偶数次のルジャンドル多項式を区間 [-1,1] で積分するとゼロになる理由である。

ノイマン表示は $Q_n(x)$ と $P_n(x)$ の具体的な関係式を得るのに有用である。それを示すため、ノイマン表示に含まれる積分を計算してみると、

$$Q_n(x) = -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{t - x} dt$$

$$= -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{t - x} dt - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{(P_n(t) - P_n(x))}{t - x} dt$$

$$= \frac{P(x)}{2} \log \frac{1 + x}{1 - x} - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(t) - P_n(x)}{t - x} dt,$$

が得られる。この計算結果は、前項で示したように対数関数を含む関係式となっている。 対数関数に付随する係数が $P_n(x)/2$ であることは前項で示した $Q_0(x)$ から $Q_3(x)$ に現れている。上で計算した $Q_n(x)$ の表記を簡略化すると、

$$Q_n(x) = \frac{P_n(x)}{2} \log \frac{1+x}{1-x} - W_{n-1}(x), \tag{4.46}$$

のように書くことができる。ここで、第 2 項を $W_{n-1}(x)$ なる記号で記述した。添え字として与えた n-1 は、 $W_{n-1}(x)$ が x についての n-1 次の多項式という意味である。引き続き、 $W_{n-1}(x)$ を計算しよう。この計算にあたり、 ルジャンドル多項式が、

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} x^{n-2m},$$

 $^{^9}$ 母関数表示を区間 [0,1] で積分すれば証明できる。

のように書けることに注意する。すると、多項式 $W_{n-1}(x)$ は、

$$W_{n-1}(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \frac{t^{n-2m} - x^{n-2m}}{t - x} dt$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \sum_{k=0}^{n-2m-1} t^k x^{n-2m-k-1} dt$$

$$= \frac{1}{2} \left[\sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \sum_{k=0}^{n-2m-1} \frac{t^{k+1}}{k+1} x^{n-2m-k-1} \right]_{-1}^{1},$$

のように計算できる。この数式は、t の次数が偶数である項が相殺されるので、k が偶数である場合のみが残る。そこで、この数式は、

$$W_{n-1}(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} c_{n-2m} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-1)/2 - m \rfloor} \frac{x^{n-2m-2k-1}}{2k+1},$$

のように変形できる。ルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の展開係数 c_{n-2m} は既に与えられているので、その係数を正確に書くと、

$$W_{n-1}(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m (2n-2m)!}{2^n \, m! \, (n-2m)! \, (n-m)!} \sum_{k=0}^{\lfloor (n-1)/2-m \rfloor} \frac{x^{n-2m-2k-1}}{2k+1}, \tag{4.47}$$

が得られる。この結果に n=1,2 を代入すると $W_0(x)=1$, $W_1(x)=3x/2$ が得られるので,その 2 つに関しては既に導いた $Q_n(x)$ の展開式 (4.43a), (4.43b) と合致する。しかし,(4.47) を用いて $W_{n-1}(x)$ を計算するのは煩雑であるので,漸化式:

$$(n+1)W_n(x) = (2n+1)xW_{n-1} - nW_{n-2}(x), (4.48)$$

を用いるほうが計算が容易である。この漸化式がどうやって導かれたか? それは, $Q_n(x)$ の漸化式から容易に導かれるはずであるので, 証明は読者に任せることにする。

第5章 エルミート関数

エルミート関数は量子力学における調和振動子に関する微分方程式 (エルミート微分方程式) の解である。物理学として興味のあるエルミート関数は多項式で表現できるので, エルミート多項式と呼ばれる。本章は, エルミート微分方程式としてエルミート関数を定義し、その性質を調べる。

5.1 エルミート多項式

エルミート微分方程式は,量子力学における1次元の調和振動子に関する微分方程式から導かれる。本章の応用例でエルミート微分方程式を導出するが,その結果は,

$$y''(x) - 2xy'(x) + 2ny(x) = 0, (5.1)$$

のような2階の常微分方程式である。

5.1.1 エルミート微分方程式の級数解

本書でこれまでに用いた処方箋にしたがって,エルミート微分方程式 (5.1) の解を級数解にて求めてみよう。つまり、微分方程式の解を、

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{p+k},$$
 (5.2)

と仮定する。やはり, p を級数の最低次数であるとし, 少なくとも $c_0 \neq 0$ とする。この式を微分方程式 (5.1) に代入すると,

$$p(p-1) c_0 z^{p-2} + p(p+1) c_1 z^{p-1}$$

$$+ \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (p+k+2)(p+k+1) c_{k+2} - [2(p+k)-2n] c_k \right\} x^{p+k} = 0,$$

が得られる。この等式が恒等的に成立するためには、xのすべての次数の係数がゼロでなければならない。よって、

$$c_{k+2} = \frac{2(p+k) - 2n}{(p+k+2)(p+k+1)}c_k,$$

なる漸化式が得られる。すべての展開係数を決定するには、初期条件として c_0 と c_1 を決めておかなければならない。

既に述べたように、級数の最低次数の係数が c_0 であるので、少なくとも $c_0 \neq 0$ でなければならない。そのとき、 z^{p-2} の項がゼロとなるためには、p(p-1)=0 が成立する必要がある。つまり、p=0、または、p=1 でなければならないのだ。さらに、p=1 ならば $c_1=0$ であることも条件となる。一方、p=0 のとき、 c_1 に対する特別な制限はないが、同様に $c_1=0$ として考察を進める。そのとき、前に書いた漸化式から、 $c_1=c_3=c_5=\cdots=0$ となる。よって、展開係数は偶数項 c_{2m} のみを決めてやればよい。

最低次数が0の場合 まず, p=0 の場合を考えよう。この場合, 展開係数はz の偶数次のみがゼロでないと考えられるので, u(z) の定義を,

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} x^{2k},$$

とすることができる。また、展開係数は

$$c_{2(k+1)} = \frac{4k - 2n}{(k+2)(k+1)}c_{2k},\tag{5.3}$$

なる漸化式で計算できる。なお、奇数番目の係数はすべてゼロ $(c_{2k+1}=0)$ である。ところで、4k-2n=0 を満たせば、漸化式 (5.3) より、 $c_{2(k+1)}=0$ となり、以降の係数もすべてゼロとなる。この条件を満たすのはn が偶数のときである。この条件を満たすばあい、級数解は有言行の多項式となるが、満たさなければ級数は無限に続くことになる。この条件は、量子力学における量子条件に対応する。

量子条件を満たさない場合,調和振動子の波動関数がどうなるか示したのが図 5.1 である。後に説明するが,調和振動子の波動関数 $\psi(x)$ は,エルミート微分方程式の解 y(x) を用いて, $\psi(x)=y(x)\,e^{-x^2/2}$ と書かれる。量子力学で波動関数は,確率密度を与える役割があるため,波動関数は無限遠でゼロに収束しなければならない。図 5.1 によると,量子条件を満たす場合 (n=4),波動関数 $\psi(x)$ は原点の遠方で急激にゼロに収束する。しかし,わずかにその条件からずれただけで遠方で波動関数が発散するのである。

量子条件を満たさない場合の発散の振る舞いを調べてみよう。展開係数 c_{2k} の漸化式に注目し、隣り合う係数の比 c_{2k+2}/c_{2k} を評価すると、

$$\lim_{m \to \infty} \frac{c_{2k+2}}{c_{2k}} = \lim_{k \to \infty} \frac{4k - 2n}{(2k+2)(2k+1)} = \lim_{k \to \infty} \frac{1}{k},$$

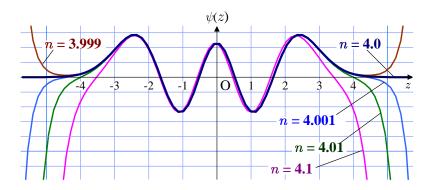


図 5.1: 波動関数 $\psi(z)$ の発散

が得られる。つまり、展開係数は十分に大きなkについては、kの増加とともに係数が1/kの比率で減少している。しかも、 c_{2k} と c_{2k+2} は同一符号 1 である。この振る舞いは e^{x^2} によく似ている。なぜなら、 e^{x^2} は、

$$e^{x^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{k!},$$

のように級数展開されるからである。この展開式は、x のべき指数が2 ずつ上昇し、展開係数が 1/k の比率で減少していることを示している。比較までに、 $e^{x^2/2}$ の場合、展開係数は 1/2k の比率で減少する。そのような、高次の展開係数の振る舞いは原点の遠方で顕著に現れるはずである。したがって、十分に大きな |x| に対する波動関数 $\psi(x)$ の振る舞いは、

$$\psi(x) = y(x) e^{-x^2/2} \simeq C e^{x^2} \cdot e^{-x^2/2} = C e^{x^2/2},$$

となり, |x| の増加とともに波動関数が急激に発散するのである。ただし, C は適切な比例係数 2 である。このような発散を食い止めるには, 展開係数を途中でゼロにするしかなく, そのためには量子条件が必要なのである。

漸化式 (5.3) を繰り返し適用すれば、展開係数の一般項を計算することができる。漸化式を適用するにあたり、量子条件 $n \equiv 2m$ を代入すると、

$$c_{2k} = \frac{-4(m-k+1)}{2k(2k-1)}c_{2k-2}$$

$$= \frac{(-4)^2(m-k+1)(m-k+2)}{2k(2k-1)(2k-2)(2k-3)}c_{2k-4} = \cdots$$

$$= \frac{(-1)^k 2^{2k}(m-k+1)(m-k+2)\cdots(m-1)m}{2k(2k-1)(2k-2)(2k-3)\cdots 4\cdot 3\cdot 2\cdot 1}c_0$$

$$= \frac{(-1)^k 2^{2k}m!}{(2k)!(m-k)!}c_0,$$

¹係数が同一符号となるのは 4k > 2n のときである。

²特に重要ではないので、その比例係数の値については詮索しないものとする。

が得られる。この結果を用いて多項式y(x)を記述すると、

$$y_{2m}(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^k 2^{2k} m! c_0}{(2k)! (m-k)!} x^{2k},$$

となる。多項式 y(x) には、n (= 2m) を媒介変数として付与した。この媒介変数は級数 y(x) の最高次数としての意味がある。

最低次数が 1 の場合 次に, p=1 の場合を考察するが, 基本的には p=0 の場合と同様である。この場合, 展開係数は x の奇数次のみがゼロでないと考えられるので, y(x) の定義を,

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} x^{2k+1},$$

とすることができる。展開係数は、

$$c_{2(k+1)} = \frac{4k+2-2n}{(2k+3)(2k+2)}c_{2k},\tag{5.4}$$

なる漸化式で計算できる。なお、奇数番目の係数はすべてゼロ $(c_{2m+1}=0)$ である。最低次数が 1 の場合、n が奇数、すなわち、 $n\equiv 2m+1$ を満たせば、 $c_{2(n+1)}=0$ となり、以降の係数もすべてゼロとなる。それが量子条件である。量子条件を満たさない場合、展開係数は無限にゼロにならず、

$$\lim_{k \to \infty} \frac{c_{2k+2}}{c_{2k}} = \lim_{k \to \infty} \frac{4k+2-2n}{(2k+3)(2k+2)} = \lim_{k \to \infty} \frac{1}{k},$$

となる。つまり、多項式 y(x) は e^{x^2} と同様に振舞うので、量子条件を満足しなければ波動関数は原点の遠方で急激に発散する。

この場合についても, 漸化式 (5.4) を繰り返し適用し, 展開係数の一般項を得ることができる。先ほどと同様なので手順を省略するが, 得られた展開係数は,

$$c_{2k} = \frac{(-1)^k 2^{2k} m!}{(2k+1)! (m-k)!} c_0,$$

である。なお、ここでは量子条件 $n\equiv 2m+1$ を適用した。この展開係数を用いて、y(x) の展開式を記述すると、

$$y_{2m+1}(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{(-1)^k 2^{2k} m! c_0}{(2k+1)! (m-k)!} x^{2k+1},$$

となる。y(x) に付与した添え字は、多項式の最高次数を表す。

5.2. 母関数と漸化式 159

多項式 y(x) の最低次数が 0 次と 1 次の場合について個別に考察したが、多項式 $y_{2m}(x)$ と $y_{2m+1}(x)$ は統一形式で記述できる。 その統一形式を $H_n(x)$ なる記号で書くことにすると、

$$H_n(z) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^k n!}{(n-2k)! k!} (2z)^{n-2k}, \tag{5.5}$$

となる。この統一形式による多項式をは**エルミート多項式**と呼ばれる。上での考察では, $y_{2m}(x)$ や $y_{2m+1}(x)$ の数式に含まれる媒介変数kは2xのべき指数が上昇する順になるように設定していたが,ここでは,統一記述のためべき指数がnから下降する順に設けている。しかし,総和記号の中身を展開して書くと,ここに書いた $H_n(x)$ は考察時の数式と一致するはずである。なお,この展開式を用いた場合,先ほど用いた最低次数の係数 c_0 とは,

$$c_0 = \begin{cases} \frac{(-1)^{n/2} n!}{(n/2)!} & \text{if } n \text{ is even,} \\ \frac{(-1)^{(n-1)/2} 2 n!}{((n-1)/2)!} & \text{if } n \text{ is odd,} \end{cases}$$

のように関係づけられる。

5.2 母関数と漸化式

他の関数と同様に、エルミート多項式も母関数を用いると、性質を調べる上で便利なことが多い。本節ではエルミート多項式の母関数を特定し、エルミート多項式 $H_n(x)$ の異なる次数 n の間での関係式を導出する。

5.2.1 指数型母関数

エルミート多項式 $H_n(x)$ については、性質を調べる目的で指数型の母関数が適している。最初に結果を示しておくと、

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^2}{n!} = e^{-t^2 + 2xt}, \tag{5.6}$$

となる。本項ではこの関係を証明する。

前節で記述したエルミート多項式の展開式を用いて、エルミート多項式を展開すると、

$$\begin{split} \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \, \frac{t^n}{n!} &= \sum_{n=0}^{\infty} \, \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m \, n!}{(n-2m)! \, m!} (2x)^{n-2m} \frac{t^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \, \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{(-1)^m}{(n-2m)! \, m!} (2x)^{n-2m} t^n, \end{split}$$

となる。ここから計算を進めるには、総和の順序を入れ替える。母関数を計算するために、媒介変数nを0から無限大まで、nを0から $\lfloor n/2 \rfloor$ まで増加させながら総和をとる。この総和をとる添え字の格子点を描くと図5.2のようになる。この図では、nを斜線で、mを縦軸にとっている。まず、nを固定し、破線に沿って、右下から左上へ格子点をたどって総和をとる。最も左上に到達したらnを増加させ、同様の操作を繰り返す。図示した経路をたどれば、最も左上の格子点では $m = \lfloor n/2 \rfloor$ となっていることに注意するとよい。これを

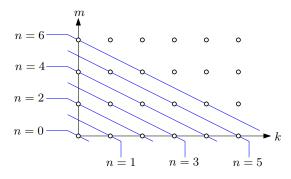


図 5.2: 母関数計算のための媒介変数の格子点

無限に繰り返せば、格子点すべてを取り尽くすことになる。つまり、総和の順序を変え、まず、最も左の列の下から上に格子点を取り尽くくし、列を右に移し、同様の操作を繰り返しても、総和の結果は同じである。この格子点に対して、横軸にkをとれば、k=n-2mなる関係がある。この関係に注意して計算を続けると、

RHS =
$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{k! \, m!} (2z)^k t^{2m+k}$$

= $\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m t^{2m}}{m!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2tx)^k}{k!} = e^{-t^2} e^{2xt} = e^{-t^2+2xt},$

が得られるので, (5.6) が証明できた。 \P

5.2.2 漸化式と多項式の特定

前項で導出したエルミート多項式の母関数を利用すると, エルミート関数の漸化式を得ることができる。結果的に得られる漸化式は,

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x), (5.7)$$

$$H'_n(x) = 2n H_n(x),$$
 (5.8)

である。これらの漸化式はともに、母関数を微分することによって導出できる。

まず, (5.6) をt について微分すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} = (-2t + 2x) e^{-t^2 + 2xt}$$
$$= -2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} + 2x \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!},$$

が得られる。この式の両辺に対して t^n の係数を比較すると, (5.7) が導出できる。引き続き, (5.6) をz について微分すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} H'_n(x) \frac{t^n}{n!} = 2t e^{-t^2 + 2xt} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!},$$

がえられる。この式についても同様に t^n の係数を比較すると, (5.8) が導出できる。

母関数と得られた漸化式を用いると、各次数のエルミート多項式を順次、特定することができる。まず、母関数に t=0 を代入すると、 $H_0(z)=1$ が容易に得られる。この結果を (5.8) に代入して、 $H_1(x)=2x$ が得られる。さらに、これらの結果を (5.7) に代入すると、 $H_2(x)=4x^2-2$ が得られる。以降、(5.7) を繰り返すとエルミート多項式が順次、得られる。このようにして得られるエルミート多項式の例を下に挙げておく。

$$H_0(x) = 1,$$
 $H_1(x) = 2x,$
 $H_2(x) = 4x^2 - 2,$ $H_3(x) = 8x^3 - 12x,$
 $H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12,$
 $H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x,$
 $H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120.$

母関数から、エルミート多項式のパリティに関する性質も明らかになる。母関数 e^{-t^2+2zt} は、 $t\mapsto -t$ と $x\mapsto -x$ の双方の置き換えによって値を変化させない。つまり、

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(-x) \frac{(-t)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(-x) \frac{(-1)^n t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!},$$

であるから、左辺と右辺で t^n の係数を比較することによって、パリティの関係式:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x), (5.9)$$

が導出される。

5.2.3 ロドリグ表示

ルジャンドル多項式と同様に、エルミート多項式もロドリグ表示ができる。ロドリグ表示によると、エルミート多項式は、

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-x^2/2},$$
 (5.10)

によって計算できる。

ロドリグ表示は母関数によって証明できる。母関数の展開式 (5.6) より、

$$H_n(x) = \left. \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n} e^{-t^2 + 2xt} \right|_{t=0},$$

で計算できることは明らかである。この数式は、コーシーの積分公式を用いると、

$$H_n(x) = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} \oint \frac{e^{-t^2 + 2xt}}{t^{n+1}} dt,$$

のように書き換えることができる。この式の積分路は原点を左回りに周回する任意の単純 閉曲線である。この式の右辺を計算すると、

RHS =
$$\frac{(-1)^n n!}{2\pi i} e^{x^2} \oint \frac{e^{-(t-x)^2}}{t^{n+1}} dt = \frac{(-1)^n n!}{2\pi i} e^{x^2} \oint \frac{e^{-\xi^2}}{(\xi+x)^{n+1}} d\xi$$

= $\frac{(-1)^n}{2\pi i} e^{x^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \Big|_{\xi=x} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2},$

のように変形される。ここで, $\xi \equiv t - x$ なる置き換えを適用した。これによって, エルミート多項式のロドリグ表示が導出された。

5.3 直交性

本節ではエルミート多項式の直交性について調べる。結果的には、エルミート多項式 $H_n(x)$ は単独で直交性を示さず、 $H_n(x)$ を $e^{-x^2/2}$ が直交性を示す。本節で導出する関係式は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = 2^n \pi^{1/2} n! \, \delta_{nm}, \qquad (5.11)$$

である。この関係式は、量子力学の調和振動子の波動関数の規格化に用いられる。

エルミート多項式 $H_n(x)$ と $e^{-x^2/2}$ の積は量子力学の調和振動子の波動方程式 $\psi_n(x)$ となるので、シュレーディンガー方程式の解である。量子力学の調和振動子は、エルミート

5.3. 直交性 163

微分方程式が無限遠で発散しないよう,量子条件を満たすはずである。後に,応用例として示すが,調和振動子に関するシュレーディンガーの方程式は,

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi_n}{\mathrm{d}x^2} + (2n + 1 - x^2)\psi_n = 0,$$

となる。この方程式の中のnが整数であることが量子条件である。この方程式に異なる量子数mとnを仮定して、両者の方程式を並べて書くと、

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi_m}{\mathrm{d}x^2} + (2m + 1 - x^2)\psi_m = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi_n}{\mathrm{d}x^2} + (2n + 1 - x^2)\psi_n = 0,$$

となる。前者に ψ_n を、後者に ψ_m を乗じて差をとると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[\psi'_m(x) \, \psi_n(x) - \psi_m(x) \, \psi'_n(x) \right] + 2 \left(m - n \right) \psi_m(x) \, \psi_n(x) = 0,$$

が得られる。この式を実数全体にわたって積分すると、

$$\left[\psi'_{m}(x)\,\psi_{n}(x) - \psi_{m}(x)\,\psi'_{n}(x)\right]_{-\infty}^{\infty} + 2\left(m - n\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{m}(x)\,\psi_{n}(x)\,\mathrm{d}x = 0,$$

となる。エルミート多項式 $H_n(x)$ が有限次数の多項式であるので、それを $e^{-x^2/2}$ 倍した $\psi_n(x)$ は $x=\pm\infty$ でゼロである。したがって、上の積分の左辺の第 1 項がゼロとなるので、

$$(m-n) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \, \psi_n(x) \, \mathrm{d}x = 0,$$

が成立することになる。まず, m=n のとき, この等式が成立するのは当然であるが, $m \neq n$ の場合にこの等式が成立するには.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \, \psi_n(x) \, \mathrm{d}x = 0, \qquad (m \neq n)$$

の成立が必要である。つまり、異なる次数の波動関数が直交することが示された。

それでは, m = n のときの積分値を特定しよう。そのために, 母関数表示:

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \, \frac{t^n}{n!} = e^{-t^2 + 2xt},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{s^n}{n!} = e^{-s^2 + 2xs},$$

を利用する。この2つの数式の積をとり、さらに、 e^{-x^2} 倍すれば、

$$\sum_{n=0}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2} \frac{(st)^n}{(n!)^2} = e^{-t^2 - x^2 - s^2 + 2xt + 2xs} = e^{-(x-s-t)^2} e^{2st},$$

となる。この両辺を実数全体にわたって積分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(st)^n}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2/2} dx = \sqrt{\pi} e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n (st)^n}{n!},$$

が得られる。すべてのnに対して項別に等号で結ぶと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2/2} dx = 2^n \sqrt{\pi} \, n!,$$

が導出される。したがって、エルミート多項式の直交性 (5.11) が証明された。この積分値は量子力学の波動関数の規格化係数を決めるのに役立つ。なぜなら、量子力学では、 $|\psi_n(x)|^2 = [H_n(x)]^2 e^{-x^2}$ は確率密度としての意味があるからである。つまり、量子力学の調和振動子の波動関数は、

$$\psi_n(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{2^{n/2}\pi^{1/4}(n!)^{1/2}}H_n(x),$$

のように規格化される。こうすれば、 $|\psi_n(x)|^2$ を実数全体にわたって積分した結果が 1 となり、確率密度として意味づけられるのである。

5.4 量子力学における調和振動子

エルミート関数の応用例として量子力学における調和振動子を考えよう。調和振動子は、変位xの自乗に比例するポテンシャルによってつくられる運動をする振動子である。このように書くとわかりにくいが、ポテンシャル $V(x)=kx^2/2$ によって運動形態が決められる振動子のことである。つまり、単振動のことである³。

5.4.1 シュレーディンガーの方程式

振動子の質量を m とすれば、振動の角周波数が $\omega = \sqrt{k/m}$ であることが容易にわかる。 比例係数 k の代わりに角周波数 ω を用いると、ポテンシャルは $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ となる。 振動子の前エネルギーを E とすると、古典力学では、

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E,$$

が成立する。ここで, p は振動子の運動量である。量子力学では, これをシュレーディンガーの方程式で書き換える。シュレーディンガーの方程式では,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] \psi(x) = E\psi(x), \tag{5.12}$$

³振動子に作用する力が $-kx^2$ であるので、運動方程式が $\ddot{x}=(k/m)x$ と書けるから、その解は $x=Ce^{i\sqrt{k/m}t}$ となる。ただし、C は定数である。

のように記述できる。ここで, $\psi(x)$ は振動子の波動関数であり, \hbar はプランク定数である。この方程式の第1項が運動量の自乗にあたる。この方程式を解くにあたり.

$$z \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \ x, \qquad \epsilon \equiv \frac{E}{\hbar \omega},$$

の置き換えをすると、シュレーディンガーの方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi}{\mathrm{d}z^2} + (2\epsilon - z^2) \,\psi = 0,\tag{5.13}$$

のように書き換えられる。ここで、z と ϵ は、ともに無次元量であり、前者をを規格化座標、後者を規格化エネルギーと呼ぶことにしよう。

5.4.2 調和振動子の波動関数

シュレーディンガーの方程式 (5.13) は, 無限遠 $(z \to \infty)$ で $\psi \simeq e^{-z^2/2}$ のように振舞う。これは, $z \to \infty$ のとき, $\psi'' - z^2 \psi = 0$ が近似的に成立すると考えれば導かれる。それを引き継ぎ, 方程式 (5.13) の一般解は u(z) $e^{-z^2/2}$ の形をしていると仮定しよう。これを, (5.13) に代入すると,

$$\frac{d^2 u}{dz^2} - 2z \frac{du}{dz} + (2\epsilon - 1) u = 0, (5.14)$$

が得られる。つまり、この方程式の解となる u(z) が得られれば調和振動子の波動関数が特定できることになる。

微分方程式 (5.14) の解は, $2\epsilon - 1 = 2n$ (n は整数) を満たさなければ, 波動関数 u(z) $e^{-z^2/2}$ が原点の遠方で発散する。それは, 本章で既に説明したとおりである。そのときの解は, $u(z) = H_n(z)$ となるので、波動方程式は,

$$\psi_n(z) = C H_n(z) e^{-z^2/s},$$

である。ここで, C は定数であり, $|\psi_n(z)|^2$ が確率密度を与えるように決定すればよい。波動関数は, 第 5.3 節で既に規格化されていて,

$$\psi_n(z) = \frac{e^{-z^2/2}}{2^{n/2}\pi^{1/4} n!} H_n(z)$$

が得られている。この規格化は $|\psi_n(z)|^2$ を実数全体で積分した値が 1 になるように振幅調整されている。なお,波動関数 $\psi_n(z)$ は正規化エネルギーが $\epsilon=n+1/2$ の場合に対応する解である。ただし,n はゼロ以上の整数である。つまり,量子力学では全エネルギーが,

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

を満たさなければ解が存在しないのである。その条件を量子条件と呼び, n を量子数と呼ぶ。量子力学では、古典力学で現れないような現象が現れる。

量子力学の波動関数は、振幅の自乗 $|\psi_n(z)|^2$ が確率密度を表す。上に記述した波動関数は、その意味に合致するよう、実数全体にわたって積分した値が 1 になるように規格化してある。そのように計算した調和振動子の確率密度関数は図 5.3 のようになる。図の横軸は規格化座標 z、縦軸は規格化エネルギー ϵ である。図中の放物線は、調和振動子のポテンシャルエネルギー $\epsilon=z^2/2$ である。前に説明したように、 $\epsilon=n+1/2$ の場合しか波動関数が存在しない。 最も、低いエネルギー状態はゼロのエネルギーではなく、 $\epsilon=1/2$ であ

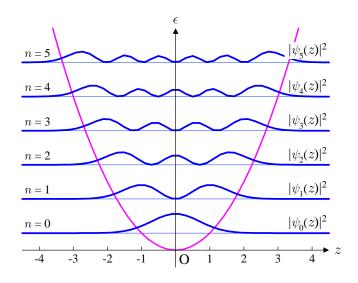


図 5.3: 調和振動子の確率密度

る 4 。一方, 波動関数から計算できる確率密度関数を, ゼロから5までの量子数について図示している。古典力学では, 図中の放物線の外側, すなわち, ポテンシャルエネルギーが振動子のエネルギーを超える領域では振動子が存在できないので確率密度がゼロになる。しかし, 量子力学では外側の領域にも確率密度がにじみ出している。また, 放物線の内側の領域でも, 確率密度が変動し, 調和振動子の存在確率がゼロになる場所があることも古典力学との相違点である。

量子数が大きい状態, つまり, エネルギーが大きい状態では確率密度は古典力学から計算できる結果に近くなる。単振動する振動子を見出す確率は, 振動の端と中央ではどちらが高いだろうか? 正解は, 振動の端で振動子を見出す確率が高い。なぜなら, 振動の中央では振動子の速度が最大であるが, 端ではゼロになるからである。古典力学から導かれる振動子の確率密度 p(x) は,

$$p(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{2\varepsilon - z^2}},$$

となる。この古典的な確率密度と、量子数 n=40 での確率密度を図 5.4 に比較する。 量 4これは、量子力学における不確定性原理に関係している。

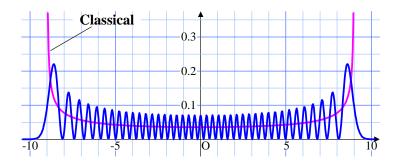


図 5.4: 高い量子数 (n=40) の確率密度と古典的確率密度の比較

子力学における確率密度は、ゼロ点を含み振動を繰り返している。古典力学における確率密度は、その振動の中心を通っているのがこの図からわかるだろう。

第6章 ラゲール関数

ラゲール (Laguerre) 関数は、シュレーディンガー方程式を球面座標系で変数分離した動径方向の依存性に対応する微分方程式の解である。変数分離から得られた動径方向の依存性に関する微分方程式はラゲール微分方程式と呼ばれる。ラゲール関数のうち物理学で興味のある解は、多項式で現されるのでラゲール多項式と呼ばれる。本章は、ラゲール微分方程式の解としてラゲール関数を導入し、その性質を調べる。

6.1 ラゲール微分方程式

ラゲール微分方程式は、シュレーディンガー方程式を球面座標系で変数分離することによって導かれる。具体的な導出は第6.3節で示すことにして、ラゲールの微分方程式は、

$$xy''(x) + (1-x)y'(x) + ny(x) = 0, (6.1)$$

なる2階の常微分方程式である。この微分方程式の解としてラゲール関数を定義しよう。

6.1.1 ラゲール多項式

ラゲール微分方程式の解は,

$$L_n(x) = \sum_{n=0}^{n} \frac{(-1)^k n!}{(k!)^2 (n-k)!} x^k,$$
(6.2)

のような級数で表すことができる。この級数がラゲール多項式である。

ベッセル関数やエルミート関数を導入した際と同様の手順を踏めばこの多項式を導出できる。ラゲールの微分方程式の解を,

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{p+k},$$

とする。ここで, p は最低次数を意味し, 展開係数は, 少なくとも, $c_0 \neq 0$ であるとする。この定義式をラゲールの微分方程式に代入すると.

$$p^{2}c_{0}x^{p-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \left[(p+k+1)^{2}c_{k+1} - (p+k-n)c_{k} \right]x^{p+k} = 0,$$

が得られる。この関係式が恒等的に成立するように展開係数を決めるのだ。まず, x^{p-1} の係数をゼロにする要請から p=0 でなければならない。つまり, ラゲール多項式の最低次数はゼロである。これを総和記号に内部に反映させると, 展開係数の漸化式:

$$c_{k+1} = -\frac{n-k}{(k+1)^2}c_k,$$

が得られる。この漸化式を用いて,係数が順次決定できる。漸化式を繰り返すと,展開係数の一般項:

$$c_k = -\frac{n-k+1}{k^2}c_{k-1} = (-1)^2 \frac{(n-k+1)(n-k+2)}{k^2(k-1)^2}c_{k-2} = \cdots$$
$$= (-1)^k \frac{(n-k+1)(n-k+2)\cdots(n-1)n}{k^2(k-1)^2\cdots 2^2\cdot 1^2}c_0 = \frac{(-1)^k n!}{(k!)^2(n-k)!}c_0,$$

が得られる。特に言及しなかったが、n はゼロ以上の整数であることを前提としている。それゆえに、展開係数の漸化式より、 $c_{k+1}=0$ となり、それ以降の展開係数もゼロとなる。したがって、ラゲール多項式はn 次の多項式となり、(6.2) が得られる。ただし、 $c_0=1$ とした。

仮に, n が整数でない場合, 係数が途中でゼロになることはなく, ラゲール多項式は無限級数となる。次数 n が整数ではない場合, その意味で多項式ではなく, ラゲール関数と呼ばれる。ラゲール関数について, 十分に大きな k をとって, 隣り合う係数の比 c_{k+1}/c_k を計算すると.

$$\lim_{k \to \infty} \frac{c_{k+1}}{c_k} = \lim_{k \to \infty} \frac{1}{k},$$

となる。つまり、十分に大きな次数の展開係数は、同一符号で 1/k 倍ずつ減少する。それは、 e^x の展開係数に類似した振る舞いである。したがって、整数次でないラゲール関数 $L_n(x)$ は指数関数と同様に振る舞い、 $x\to\infty$ で発散する。そのため、整数次のラゲール多項式が物理学で用いられることがある反面、整数次でないラゲール関数は物理学の興味を引くことは少ない。

6.1.2 母関数と漸化式

他の関数と同様に、ラゲール多項式も母関数を生成しておけば、ラゲール多項式の性質を調べる上で有用である。ラゲール多項式の場合、通常母関数と呼ばれる母関数を生成す

171

ると都合がよい。ラゲール多項式の通常母関数は、

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t}, \tag{6.3}$$

である。この母関数をラゲール多項式の定義とする場合もある。

ラゲール多項式の具体的な展開式が得られているので、母関数が上に記述した関数形になることを証明しよう。通常母関数の展開式にラゲール多項式の展開式 (6.2) を代入すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k n!}{(k!)^2 (n-k)!} x^k t^n,$$

となる。さらに計算を続けるには、総和の順序を入れ替える。この総和は、図 6.1 に示す媒介変数の格子点を取り尽くすように計算されると考えるとよい。媒介変数 n は右下から左上に伸びる線分に与えられた番号である。媒介変数 k は下から上に向かう行の番号である。この数式では、斜めに延びる線分に沿って総和が計算される。これを、縦方向に無限に格子点を取り尽くして、右の列へ演算を継続するように順序を変えたとしよう。 そ

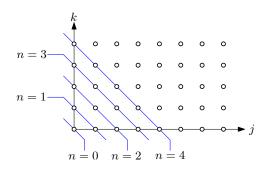


図 6.1: 母関数計算のための媒介変数の格子点

こで、左から右へ列に番号をつける。これをjとしよう。そのとき、n = k + jの関係がある。その関係を使って、総和計算を書き換えると、

RHS =
$$\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+j)!}{(k!)^2 j!} x^k t^{k+j}$$
,

となるが、ここでまた必要な情報がある。それは、負のべき指数をもつべき乗 $(1-\xi)^{-n}$ の二項展開である。負のべき指数をもつべき乗は、

$$(1-\xi)^{-n} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-n)(-n-1)\cdots(-n-k)}{k!} (-\xi)^k$$
$$= \frac{n(n+1)\cdots(n+k-1)}{k!} \xi^k = \frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!} \xi^k,$$

のように無限級数として二項展開される。これを利用すると、母関数は、

RHS =
$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (kt)^k (1-t)^{-k-1}$$

= $\frac{1}{1-t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{xt}{1-t} \right)^k = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t},$

のように計算される。したがって、ラゲール多項式の母関数を特定することができた。

母関数からただちに得られる情報として、ラゲール多項式の漸化式が挙げられる。母関数を微分することによって、3項間の漸化式と導関数を含む漸化式:

$$(n+1)L_{n+1}(x) - (2n+1-x)L_n(x) + nL_{n-1}(x) = 0, (6.4a)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_{n+1}(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_n(x) - L_n(x),\tag{6.4b}$$

が得られる。前者の導出に関して、母関数をtについて微分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} n L_n(x) t^{n-1} = \frac{1}{(1-t)^2} e^{-xt/(1-t)} - \frac{x}{(1-t)^3} e^{-xt/(1-t)}$$
$$= \frac{m+1}{1-t} \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n - \frac{x}{(1-t)^2} \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n,$$

が得られる。この数式の両辺に $(1-t)^2$ を乗じ、展開係数を比較すれば、(6.4a) が得られる。一方、母関数をx について微分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_n(x) t^n = -\frac{t e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^2} = -\frac{t}{1-t} \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) t^n,$$

が得られる。この数式の両辺に1-tを乗じ、展開係数を比較すれば、(6.4b)が得られる。

6.1.3 多項式の特定

前節で導出した母関数と漸化式によってラゲール多項式を順次特定することが可能である。まず、母関数に x=0 を代入すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n(0) t^n = \frac{1}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} t^n,$$

が得られるので, $L_n(0)=1$ が得られる。つまり, あらゆる次数 n においてラゲール多項式の 0 次の係数は 1 である。思い起こせば, 級数解を求めた際に 0 次の係数に関して $c_0=1$ としていたので当然の結果である。

次に、母関数に t=0 を代入すると、 $L_0(x)=1$ が得られる。引き続き、漸化式を適用すれば、順次、ラゲール多項式が特定できる。まず、(6.4b) を適用すれば $L_n(x)=-x+1$ が得られる。それ以降は、(6.4a) を使っても、(6.4b) をつかっても同一の結果が得られる。ラゲール多項式を次数の低いものをいくつか挙げると次のようになる。

$$L_{0}(x) = 1, L_{1}(x) = -x + 1,$$

$$L_{2}(x) = \frac{1}{2!}(x^{2} - 4x + 2), L_{3}(x) = \frac{1}{3!}(-x^{3} + 9x^{2} - 18x + 6),$$

$$L_{4}(x) = \frac{1}{4!}(x^{4} - 16x^{3} + 72x^{2} - 96x + 24),$$

$$L_{5}(x) = \frac{1}{5!}(-x^{5} + 25x^{4} - 200x^{3} + 600x^{2} - 600x + 120).$$

6.1.4 ロドリグの公式

ラゲール多項式にもロドリグ表示をすることができる。ラゲール多項式のロドリグ表示は,

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} (x^n e^{-x}), \tag{6.5}$$

となる。この公式は、母関数表示から導くことができる。母関数表示 (6.3) によると、ラ ゲール多項式は、

$$L_n(x) = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \frac{e^{-xt/(1-t)}}{1-t} \bigg|_{t=0},$$

のように書くことができる。この式の両辺に $n!e^{-x}$ を乗じると、

$$n! e^{-x} L_n(x) = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \frac{e^{-x/(1-t)}}{1-t} \bigg|_{t=0}$$

が得られる。この数式の右辺を1-tのべき級数として展開した後, t=0を代入すると,

RHS =
$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k! (1-t)^{k+1}} \bigg|_{t=0} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k (k+n)!}{(k!)^2 (1-t)^{k+n+1}} \bigg|_{t=0}$$

= $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k (k+n)!}{(k!)^2}$,

のように計算される。この式の右辺を整理すると、

RHS =
$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \frac{x^{k+n}}{k!} = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} (x^n e^{-x}),$$

が得られる。この数式は $n!e^{-x}L_n(x)$ に等しいので、ロドリグ表示(6.5)が導かれる。

6.2 ラゲール陪多項式

量子力学における水素原子のシュレーディンガー方程式を変数分離した動径方向の依存性は、厳密には、ラゲール微分方程式ではなく、ラゲール陪微分方程式と呼ばれる微分方程式になる。ラゲール陪微分方程式は、

$$xy''(x) + (k+1-x)y'(x) + ny(x) = 0, (6.6)$$

なる2階の常微分方程式である。この微分方程式の解はラゲール陪関数と呼ばれる。

6.2.1 ラゲール陪多項式

ラゲール陪微分方程式の解を求めるため、ラゲール微分方程式を起点に考察を進めよう。 解の導出には、ルジャンドル陪部分方程式で用いた手法を参考にする。まず、p次のラゲール多項式 $L_p(x)$ は、

$$x \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} L_p(x) + (1-x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_p(x) + p L_p(x) = 0,$$

なるラゲール微分方程式の解である。この微分方程式の m 階微分を計算すると,

$$x\frac{\mathrm{d}^{m+2}}{\mathrm{d}x^{m+2}}L_p(x) + (m+1-x)\frac{\mathrm{d}^{m+1}}{\mathrm{d}x^{m+1}}L_p(x) + (p-m)\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}L_p(x) = 0,$$

が得られる。この m 階微分の計算には、ライプニッツの公式を適用した。ここで、

$$y(x) = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_{n+m}(x),$$

とおくと, y(x) はラゲール陪微分方程式を満たす。つまり, この y(x) はラゲール陪微分方程式の解である。その解を $L_n^m(x)$ と書くことにすれば,

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_{n+m}(x), \tag{6.7}$$

となる。前に用いた手法を参考にしたとはいえ,意外と簡単に解が見つかった。ところで,なぜか $(-1)^m$ なる因子が付加されていることを疑問に思うかもしれない。その理由はすぐにわかる。ラゲール多項式の展開式が (6.2) であることがわかっているので,これを m 階微分すれば、ラゲール陪多項式の級数表現が得られるはずである。計算してみると.

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_{n+m}(x) = \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \sum_{j=0}^{n+m} \frac{(-1)^{m+j} (n+m)!}{(j!)^2 (n+m-j)!} x^j$$

$$= \sum_{j=m}^{n+m} \frac{(-1)^{m+j} (n+m)! \cdot k (j-1) \cdots (j-m+1)}{(j!)^2 (n+m-j)!} x^{j-m}$$

$$= \sum_{j=m}^{n+m} \frac{(-1)^{m+j} (n+m)!}{j! (j-m)! (n+m-j)!} x^j,$$

となる。総和の範囲が0からでなくmからになっているのは,m次未満の項がm階微分すると消えてしまうからである。ここで,媒介変数を $k\equiv j+m$ で置き換えると,

$$L_n^m(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (n+m)!}{k! (k+m)! (n-k)!} x^k,$$
(6.8)

が得られる。これが**ラゲール陪多項式**である。なお、先ほどラゲール陪多項式の定義として $(-1)^m$ なる因子を付加したのは、ゼロ次の展開係数を、必ず、正の値にするためである。

6.2.2 母関数

ラゲール多項式の性質を調べるため、その母関数を考察しよう。ラゲール多項式では通常母関数が取り扱いやすい形となり.

$$\sum_{k=0}^{\infty} L_n^m(x) t^n = \frac{e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{m+1}},$$
(6.9)

となる。

ラゲール多項式の母関数は次のようにして導出できる。

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n^m(x) t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (n+m)!}{k! (m+k)! (n-k)!} x^k t^n,$$

ここで, n=k+pという添え字の置き換えをして総和の順序を入れ替える。図に示すように, n と k について格子点を取り尽くしていたものを, k と p について格子点を取り尽くすように順序を替えるのである。すると,

RHS =
$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+p+m)!}{k! (m+k)! p!} x^k t^{k+p},$$

が得られる。実は、この展開係数には負の次数の二項係数が含まれている。それを示すため、 $(1+\xi)^{-q}$ を二項展開してみると、

$$(1+\xi)^{-q} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-q)(-q-1)\cdots(-q-j+1)}{j!} \xi^{j}$$
$$= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^{j}(n+j-1)!}{j! (q-1)!} x^{j},$$

となるので, ラゲール多項式の母関数の計算を進めるには, この数式が使えそうである。 この負の次数の二項展開を利用すると,

RHS =
$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k t^k}{k!} (1-t)^{-m-k-1}$$

$$= \frac{1}{(1-t)^{m+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{xt}{1-t} \right)^k$$
$$= \frac{1}{(1-t)^{m+1}} e^{-xt/(1-t)},$$

となり、ラゲール多項式の母関数が導出できた。

母関数からただちに得られる情報として、ラゲール多項式の漸化式が挙げられる。母関数を微分することによって、3項間の漸化式と導関数を含む漸化式:

$$(n+1)L_{n+1}^m(x) - (2n+m+1-x)L_n^m(x) + (n+m)L_{n-1}^m(x) = 0, (6.10a)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_{n+1}^{m}(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_{n}^{m}(x) - L_{n}^{m}(x), \tag{6.10b}$$

が得られる。前者の導出に関して、母関数をtについて微分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} n L_n^m(x) t^{n-1} = \frac{m+1}{(1-t)^{m+2}} e^{-xt/(1-t)} - \frac{x}{(1-t)^{m+3}} e^{-xt/(1-t)}$$
$$= \frac{m+1}{1-t} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^m(x) t^n - \frac{x}{(1-t)^2} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^m(x) t^n,$$

が得られる。この数式の両辺に $(1-t)^2$ を乗じ、展開係数を比較すれば、(6.4a) が得られる。一方、母関数をx について微分すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_n^m(x) \, t^n = -\frac{t}{(1-t)^{m+2}} e^{-xt/(1-t)} = -\frac{t}{1-t} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^m(x) \, t^n,$$

が得られる。この数式の両辺に1-tを乗じ、展開係数を比較すれば、(6.4b)が得られる。

6.2.3 漸化式

母関数表示を用いると, ラゲール陪多項式の漸化式を得ることができる。そのうちの一つは3項間の漸化式, もう一つは導関数を含む漸化式である。それらの漸化式は,

$$(n+1) L_{n+1}^m(x) - (2n+m+1-x) L_n^m(x) + (n+m) L_{n-1}^m(x) = 0, (6.11a)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_{n+1}^{m}(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}L_{n}^{m}(x) - L_{n}^{m}(x),\tag{6.11b}$$

なる数式で記述される。前者の導出のためには、母関数表示をtについて微分するとよい。その微分の結果は、

$$\begin{split} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} L_n^m(x) \, t^n &= -\frac{x \, e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{m+3}} + \frac{(m+1) \, e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{m+2}} \\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x}{(1-t)^2} \, L_n^m(x) \, t^n + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m+1}{1-t} L_n^m(x) \, t^n, \end{split}$$

である。両辺に $(1-t)^2$ を乗じて, t^n の係数を比較すると, 漸化式 (6.11a) が得られる。一方, 母艦数表示を x について微分すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x}(x) \, t^n = -\frac{t \, e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{m+2}} = -\frac{t}{1-t} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^m(x) \, t^n,$$

が得られる。両辺に1-tを乗じて, t^n の係数を比較すると, 漸化式 (6.11b) が得られる。

6.2.4 ロドリグ表示

ラゲール陪多項式のロドリグ表示は、ラゲール多項式のロドリグ表示と類似の数式で記述できる。それは、ルジャンドル多項式とルジャンドル陪多項式のロドリグ表示の関係に似ている。ラゲール陪多項式のロドリグ表示は、

$$L_n^m(x) = \frac{e^x x^{-m}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x} x^{n+m} \right), \tag{6.12}$$

なる数式で記述される。このロドリグ表示を2つの方法で証明しよう。一つはラゲール多項式のロドリグ表示を用いる方法,もう一つはラゲール陪多項式の母関数表示を用いる方法である。

第1の証明方法として, ラゲール多項式のロドリグ表示を用いた証明をしよう。ラゲール陪多項式とラゲール多項式の関係:

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} L_{n+m}(x),$$

から始める。この式の右辺にロドリグ表示を適用すると、

$$\begin{split} L_n^m(x) &= \frac{(-1)^m}{(n+m)!} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[e^x \frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}} \left(e^{-x} x^{n+m} \right) \right] \\ &= \frac{(-1)^m}{(n+m)!} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[e^x \sum_{k=0}^{n+m} \frac{(n+m)!}{k! \, (n+m-k)!} (-1)^{n+m-k} e^{-x} \cdot \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} x^{n+m} \right] \\ &= \frac{1}{(n+m)!} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} \left[\sum_{k=0}^{n+m} \frac{(n+m)! \, (n+m)!}{k! \, (n+m-k)! \, k!} (-1)^{n-k} x^{n+m-k} \right] \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{n! \, (n+m)!}{k! \, (n-k)! \, k!} (-1)^{n-k} x^{n-k} \\ &= \frac{x^{-m} e^x}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! \, (n-k)!} (-1)^{n-k} e^{-x} \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} x^{n+m} \\ &= \frac{x^{-m} e^x}{n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(e^{-x} x^{n+m} \right), \end{split}$$

のように計算できるのでラゲール陪多項式のロドリグ表示が得られる。なお、第2行目への数式変形はライプニッツの公式を用いて、導関数を展開した。第5行目への数式変形は、ライプニッツの公式を用いて展開された導関数を元に戻した。第4行目で総和の範囲がゼロからn に変わっているのは、 x^{n+m-k} のm 階微分がゼロでない値になるには、 $k \le n$ である場合に限られるからである。

第2の証明方法として、母関数表示による証明を示そう。母関数表示によると、ラゲール陪多項式は、

$$L_n^m(x) = \frac{1}{n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \frac{e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{m+1}} \bigg|_{t=0},$$

と書くことができる。この数式は、コーシーの積分公式を利用すれば、

$$L_n^m(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^{-xt/(1-t)}}{t^{n+1}(1-t)^{m+1}} dt \Big|_{t=0}$$

のように書き換えられる。ここで, $\xi \equiv x/(1-t)$ と置き換えると, この式の右辺は,

RHS =
$$\frac{e^{x}x^{-m}}{2\pi} \oint \frac{e^{-\xi}\xi^{n+m}}{(\xi - x)^{n+1}} d\xi \Big|_{\xi = x}$$

= $\frac{e^{x}x^{-m}}{n!} \frac{d^{n}}{d\xi^{n}} (e^{-\xi}\xi^{n+m}) \Big|_{\xi = x} = \frac{e^{x}x^{-m}}{n!} \frac{d^{n}}{dx^{n}} (e^{-x}x^{n+m}),$

のように計算される。第1行目から第2行目への数式変形は、再び、コーシーの積分公式を用いた。この計算結果から、ラゲール陪多項式のロドリグ表示 (6.12) が導出できた。同時に、ラゲール多項式のロドリグ表示 (6.5) も証明できたことになる。

6.2.5 直交性

ラゲール陪多項式には直交関係があり,

$$\int_0^\infty L_n^m(x) L_p^m(x) e^{-x} x^m dx = \frac{(n+m)!}{n!} \delta_{np}, \tag{6.13}$$

が成立する。

ラゲール陪多項式の直交関係を証明しよう。まず, $e^{-x}x^{m+1}dL_n^m/dx$ を微分すると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right) = e^{-x} x^m \left(x \frac{\mathrm{d}^2 L_n^m}{\mathrm{d}x^2} + (m+1-x) \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right),$$

が得られる。ラゲール陪微分方程式(6.6)を利用して右辺の第1項を消去すると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right) = -n e^{-x} x^m L_n^m(x),$$

なる関係式が導かれる。この式の両辺に $L_p^m(x)$ を乗じた式と, 媒介変数 n と p を入れ替えた式を書くと,

$$L_p^m(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right) = -n e^{-x} x^m L_p^m(x) L_n^m(x),$$

$$L_n^m(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_p^m}{\mathrm{d}x} \right) = -p e^{-x} x^m L_n^m(x) L_p^m(x),$$

となる。これらの数式の差をとると、

$$L_p^m(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right) - L_n^m(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_p^m}{\mathrm{d}x} \right)$$
$$= (p-n) e^{-x} x^m L_n^m(x) L_p^m(x), \tag{6.14}$$

が得られる。この両辺を0から無限大にわたって積分する。まず、左辺を積分すると、

$$\int_0^\infty \left(\text{LHS of (6.14)} \right) dx$$

$$= \int_0^\infty L_p^m(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{d}x - \int_0^\infty L_n^m(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(e^{-x} x^{m+1} \frac{\mathrm{d}L_p^m}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{d}x$$

$$= \left[e^{-x} x^{m+1} L_p^m(x) \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \right]_0^\infty - \int_0^\infty e^{-x} x^{m+1} L_p^m(x) \frac{\mathrm{d}L_p^m}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x$$

$$- \left[e^{-x} x^{m+1} L_n^m(x) \frac{\mathrm{d}L_p^m}{\mathrm{d}x} \right]_0^\infty + \int_0^\infty e^{-x} x^{m+1} L_n^m(x) \frac{\mathrm{d}L_n^m}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}L_p^m}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x,$$

のように計算できる。この数式の第 2 項と第 4 項は完全に打ち消しあう。さらに、第 1 項と第 3 項は、それぞれ、ゼロであるので、(6.14) の積分は完全にゼロとなる。したがって、

$$(p-n) \int_0^\infty e^{-x} x^m L_n^m(x) L_p^m(x) dx = 0,$$

が成立することになる。この数式に関して, p=n であればこの数式が成立するのは明らかである。しかし, $p \neq n$ の場合, この数式が成立するには,

$$\int_{0}^{\infty} e^{-x} x^{m} L_{n}^{m}(x) L_{p}^{m}(x) dx = 0, \qquad (p \neq n)$$

が成立しなければならない。したがって、異なる次数のラゲール陪多項式は直交する。

引き続き,同一次数のラゲール陪多項式の内積を計算しよう。その計算には母関数表示から派生した積分:

$$\int_0^\infty e^{-x} x^m \left[\sum_{n=0}^\infty L_n^m(x) t^n \right]^2 dx = \int_0^\infty e^{-x} x^m \left[\frac{e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{m+1}} \right]^2 dx, \tag{6.15}$$

を評価する。この数式の被積分関数は、母関数表示を自乗を $e^{-x}x^m$ 倍した関数である。この数式の左辺は、

LHS of (6.15) =
$$\int_0^\infty e^{-x} x^m \sum_{p=0}^\infty \sum_{n=0}^\infty L_n^m(x) L_p^m(x) t^{n+p} dx$$

$$= \sum_{p=0}^\infty \sum_{n=0}^\infty t^{n+p} \int_0^\infty e^{-x} x^m L_n^m(x) L_p^m(x) dx$$

$$= \sum_{n=0}^\infty t^{2n} \int_0^\infty e^{-x} x^m [L_n^m(x)]^2 dx,$$

のように計算できる。第2行目から第3行目への数式変形には、ラゲール陪多項式の直交性を利用した。一方、右辺の積分は、

RHS of (6.15) =
$$\int_0^\infty \frac{e^{-x}x^m e^{-2xt/(1-t)}}{(1-t)^{2m+2}} dx$$

$$= \frac{1}{(1-t)^{2m+2}} \int_0^\infty x^m e^{-x(1+t)/(1-t)} dx$$

$$= \frac{m!}{(1-t)^{2m+2}} \left(\frac{1-t}{1+t}\right)^{m+1} = \frac{m!}{(1-t^2)^{m+1}}$$

$$= \sum_{n=0}^\infty \frac{(m+n)!}{n!} t^{2n},$$

のように計算される。第2行目から第3行目への数式変形は,ガンマ関数の積分表現を利用した。第3行目から第4行目への数式変形は,二項展開を利用した。左辺を積分した結果の係数を比較することによって,

$$\int_0^\infty [L_n^n(x)]^2 e^{-x} x^m \, \mathrm{d}x = \frac{(n+m)!}{n!},$$

が得られる。よって、ラゲール陪多項式の直交性 (6.13) が証明できた。しかし、量子力学の水素原子におけるシュレーディンガー方程式の解法に関して、動径方向の依存関数の規格化は (6.13) が直接利用できるのではない。その代わりに、

$$\int_0^\infty [L_n^m(x)]^2 e^{-x} x^{m+1} dx = (2n+m+1) \frac{(n+m)!}{n!},$$
(6.16)

を利用する。この数式を得るには、ラゲール陪多項式の 3 項間の漸化式 (6.10a) から得られる関係式:

$$x L_n^m(x) = (2n + m + 1)L_n^m(x) - (n + 1)L_{n+1}^m(x) - (n + m)L_{n-1}^m(x),$$

に注目する。この関係式を利用し、ラゲール陪多項式の直交性に注意すると、

$$\int_0^\infty [L_n^m(x)]^2 e^{-x} x^{m+1} dx = (2m+n+1) \int_0^\infty [L_n^m(x)]^2 e^{-x} x^m dx,$$

が導かれ、その結果、(6.16) が得られる。 さらにx の次数を、もう一つ増加してみよう。 その場合も 3 項間の漸化式 (6.10a) を利用して、

$$\int_0^\infty L_n^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^{m+2} dx = (2n+m+1) \int_0^\infty L_n^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^{m+1} dx$$
$$- (n+1) \int_0^\infty L_{n+1}^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^{m+1} dx$$
$$- (n+m) \int_0^\infty L_{n-1}^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^{m+1} dx,$$

のように数式変形する。右辺の第1項は,(6.16)より,

1st term =
$$(2n + m + 1)^2 \frac{(n+m)!}{n!}$$
,

が成立する。第 2 項と第 3 項はラゲール陪多項式の媒介変数 m と x のべき指数が異なるため,直交関係が成立せず,ゼロにならない。それらの積分は,もう一度だけ漸化式 (6.10a) を適用して,

2nd term =
$$(n+1)(n+m+1) \int_0^\infty L_n^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^m dx = (n+1) \frac{(n+m+1)!}{n!},$$

3rd term = $(n+m) n \int_0^\infty L_n^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^m dx = (n+m) \frac{(n+m)!}{(n-1)!},$

のように計算できる。なお、ここで計算した第2項と第3項は、負の符号を含めて計算している。求める積分は、これら3つをすべて加算すればよいので、

$$\int_0^\infty L_n^m(x) L_n^m(x) e^{-x} x^{m+2} dx$$

$$= (2n+m+1) \frac{(n+m)!}{n!} \left[2n+m+2 + \frac{2n(n+m)}{2n+m+1} \right], \tag{6.17}$$

となる。この計算結果は、後に水素原子の電子軌道の平均半径を計算する際に利用される。

6.3 水素原子のシュレーディンガー方程式

ラゲール多項式の応用例として水素原子のシュレーディンガー方程式の解を考察しよう。古典的解釈では、電子は太陽系の惑星のように原子核を周回すると考えられてきたが、シュレーディンガー方程式を解くと、その解釈とは大きく異なることが見えてくる。一般的なシュレーディンガーの方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi = E\psi,$$

なる形をしている。ここで, V(r) は原子核による電磁ポテンシャルであるとする。この電磁ポテンシャルは, 原子核, すなわち, 点電荷による中心力に起因するので原子核からの距離 r の関数である。したがって, この方程式を解くには, 球面座標系で変数分離するのがよい。

ラプラシアンの球座標表示は第4.7.1項でヘルムホルツ方程式を解いた際に示している。 その結果を利用するとシューレディンガー方程式の球座標表示を書くことができ、

$$\frac{1}{r^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} \right) + \left[-\kappa^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \tag{6.18a}$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y_l^m}{\partial \theta} \right) + \left[l (l+1) Y_l^m + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_l^m}{\partial \varphi^2} \right] = 0, \tag{6.18b}$$

のように変数分離できる。そのうち, 前者は動径座標以外の依存性が排除できているので, 常微分方程式となっている。ここで,

$$E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m}, \qquad U(r) = \frac{2mV(r)}{\hbar^2},$$

なる置き換えを適用した。さらに、変数分離した第 2 の微分方程式の解は第 4.7.2 項で既に説明したように、球面調和関数となる。ここで、記号 Y_l^m は球面調和関数であり、天頂角 θ と方位角 φ の関数である。しかも、l と m はともに整数である。そのうち、l は電子の軌道角運動量の大きさを与える量子数であり、方位量子数と呼ばれる。一方、m は $|m| \leq 1$ なる整数であり、電子の軌道角運動量の z 成分を与える。この整数は磁気量子数と呼ばれる。ところで、球面調和関数は、ルジャンドル陪多項式 $P_l^m(\cos\theta)$ を用いて、

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\theta},$$

のように書くことができる。球面調和関数は、球面全域の θ と φ にわたって自乗積分すると 1 になるように規格化されている。

本節の主役は動径座標の依存性である。動径座標に関する微分方程式のみを抜き出すと、

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}rR(r) + \left[-\kappa^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0,$$

が得られる。ところで, U(r) は電磁ポテンシャルの $2m/\hbar^2$ 倍であるので,

$$U(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

の関係が成立する。簡単のため, $U(r) \equiv -\alpha/r$ とおこう。さらに, $\chi(r) = rR(r)$ とおくと, 動径座標に関する微分方程式は.

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left[-\kappa^2 + \frac{\alpha}{r} - \frac{l\left(l+1\right)}{r^2}\right]\chi = 0,$$

のように変形できる。この微分方程式の解は無限遠 $(r \to \infty)$ で近似的に $\chi(r) \simeq C \, e^{-\kappa r}$ となる。それは、この微分方程式に $1/r \to 0$ を代入すれば容易にわかることである。任意の距離 r では、 $\chi(r) = X(r) \, e^{-\kappa r}$ の形を仮定しよう。この仮定を (6.3) に代入すると、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}X(r) - 2\kappa \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}r} + \left[\frac{\alpha}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right]X(r) = 0,$$

なる微分方程式を得るが、動径座標の代わりに $x \equiv 2\kappa r$ を用いるほうが便利である。 すると、X(r) に関する微分方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}X(x) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}X(x) + \left[\frac{\alpha/2\kappa}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]X(x) = 0, \tag{6.19}$$

となる。そのように置き換えると、波動関数は $\chi(x)=X(x)\,e^{-x/2}$ と記述される。何度も置き換えをして面倒であるが、続いて、 $X(x)\equiv x^pu(x)$ とおき、X(x) の導関数を計算してみると、

$$X'(x) = px^{p-1}u(x) + x^{p}u(x),$$

$$X''(x) = p(p-1)x^{p-2}u(x) + 2px^{p-1}u' + x^{p}u''(x),$$

が得られる。これらを微分方程式(6.19)に代入して,数式を整理すると,

$$x u''(x) + (2p - x) u'(x) + \left[\frac{p(p-1) - l(l+1)}{x} + (n-p) \right] u(x) = 0,$$

が得られる。ここで, $n \equiv \alpha/2\kappa$ とおいた。この方程式は, p = l + 1 のとき,

$$x u''(x) + (2l + 1 + 1 - x) u'(x) + (n - l - 1) u(x) = 0,$$

となり、ラゲール陪微分方程式となる。したがって、解u(x)はラゲール陪多項式を用いて、

$$u(x) = c_{nl} L_{n-l-1}^{2l+1}(x),$$

と書くことができる。ここで, c_{nl} は量子数 n, l によって決まる定数である。さらに, X(x) まで記号を戻すと,

$$X(x) = c_{nl} x^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(x),$$

となる。この解を評価するうえで注意すべきことは、l は天頂角依存性に関する量子数であるのでゼロ以上の整数である。ラゲール陪多項式が物理学で興味ある解にならなければならないので、n-l-1 もゼロ以上の整数でなければならない。したがって、n ($=\alpha/2\kappa$)は1以上の整数でなければならない。すると、l は、ゼロから n-1 の間の整数である。水素原子の電子の波動関数を記述する量子数の取りうる範囲を整理すると、

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

 $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1,$
 $m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l,$

のように書くことができる。物理学において、量子数n は主量子数, l は軌道量子数, m は磁気量子数と呼ばれる。量子数がとり得る範囲を見ると、量子数は上位からn, l, m の順に階層化されていることがわかる。特定の軌道量子数l について、2l+1 通りの磁気量子数m の状態が存在する。量子力学では、これを2l+1 重に縮退しているという。さらに、特定の主量子数n に対して、n 通りの軌道量子数l の状態が存在する。したがって、特定の主量子数n に対して、 n^2 通りの量子数(l,m) の組合せが存在する。つまり、主量子数n の状態は n^2 重に縮退している。物理化学のテキストには、量子数n に対応する電子が $2n^2$ 個に制限されていることが書かれているが、それはここで述べた n^2 重縮退がその理由1である。

6.3.1 エネルギー固有値

調和振動子と同様に、水素原子においても電子がとり得るエネルギーは飛び飛びの値となる。そのような飛び飛びのエネルギーはエネルギー固有値と呼ばれる。量子条件 $n\equiv\alpha/2\kappa$ に含まれる κ がエネルギーに関する量である。ここで、

$$E = -\frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m}, \qquad \alpha = \frac{me^2}{2\pi\varepsilon_0 \hbar^2},$$

であることに注意し、エネルギー E_n を計算すると、

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 n^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}, \qquad (n = 1, 2, 3, ...)$$
(6.20)

が得られる。この値が水素原子のエネルギー固有値である。このエネルギー固有値は,次項で示すように,古典的解釈で計算されたポテンシャルエネルギーと一致する。

6.3.2 古典的解釈

水素原子のエネルギーが飛び飛びの値しかもてないことに関して、ド・ブロイ波を用いた古典的解釈がある。古典的解釈で計算したエネルギーが前項で計算したエネルギー固有値と一致するので紹介しておこう。

古典的なモデルでは、水素原子中の電子は惑星のように原子核を周回する。そのような 古典的なモデルでは、水素原子は安定に存在できないのだ。なぜなら、円運動のように加 速度をともなう運動をする荷電粒子は電磁波を放射することが知られているからだ。電 磁波の放射によってエネルギーを失った電子は、原子核に吸い込まれていくのだ。しかし、 ド・ブロイ波によってこの問題が解決できる。いや、解決する理由が強引に提唱された。

ド・ブロイ波は初期量子力学において、物質の運動量 mv と波長 λ の間に $mv=2\pi\hbar/\lambda$ の関係をもって、粒子性と波動性を結びつける思想である。つまり、運動量 mv の物質は波長 $\lambda=2\pi\hbar/mv$ の物質波をともなうという考え方である。

電子が原子核からr の距離を円運動しているとする。円運動の周囲長が物質波の波長の整数倍であれば、電子は自己励起され、原子核に向けて落下しないと仮定しよう。つまり、水素原子が安定する条件は $2\pi r = n\lambda$ である。この条件は、運動量と波長の関係を用いると、

$$mvr = n\hbar$$
,

のように書くことができる。この関係式は、ボーアの量子条件と呼ばれる。

原子核と電子の間にはクーロン力が作用し、原子核を周回する電子には遠心力が作用している。クーロン力と遠心力がつり合う条件で、電子は円軌道を描く。その力の釣り合いを数式で書くと、

$$\frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0\,r^2} = \frac{mv^2}{r},$$

となる。この関係式を速度vについて解くと、

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 \, mr}},$$

が得られる。この結果をボーアの量子条件に代入して,rについて解くと,

$$r = \frac{4\pi n^2 \varepsilon_0 \, \hbar^2}{me^2},$$

が得られる。この数式は古典的な水素原子の半径を与える。例えば、n=1 のとき、 $r=0.53\times 10^{-10}$ m となる。この半径はボーア半径と呼ばれ、 a_0 なる記号で書かれる。さらに、量子数 n に対応した電子のポテンシャルエネルギー $E_n\equiv -mv^2/2$ を計算すると 2 、

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 n^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}, \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

が得られる。つまり、古典的な解釈に基づき自己励起状態の電子のみが存在するという考え方と、シュレーディンガーの方程式から、純粋に数学的な考察によって得られた水素原子の電子エネルギーが一致するのである。

6.3.3 波動関数の規格化

水素原子の電子の波動関数がラゲール陪多項式を用いて記述できることを学んだ。しかし、現時点では規格化係数が未知のままである。本項では、未知の規格化係数を決定し、水素原子の電子と原子核の距離、すなわち、水素原子半径の期待値を計算しよう。

²無限遠でのポテンシャルエネルギーがゼロであるとすれば、軌道半径 r でのポテンシャルエネルギーは周回電子の運動エネルギーを符号反転した値となる。

水素原子の電子に関する波動関数の動径座標依存関数は, R(r) という関数で記述してきた。この関数に球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ を乗じた関数 $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ が電子の波動関数であり、その絶対値の自乗 $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2$ は電子の確率密度を与える。この確率密度は、単位体積あたりに電子を見出す確率である。したがって、関数 R(r) は、

$$\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_l^m(\theta, \varphi) \int_0^{\infty} r^2 [R(r)]^2 dr = 1,$$

なる規格化条件を満たさなければならない。球面調和関数は, θ と φ について自乗積分すると 1 になるように規格化されているので、上記の規格化条件は、

$$\int_0^\infty r^2 [R(r)]^2 \, \mathrm{d}r = 1,\tag{6.21}$$

のように書くことができる。これが動径方向の依存関数 R(r) に関する規格化条件である。これまでの過程によって, $r^2[R(r)]^2$ は半径 r において電子を見出す確率密度を与えることがわかる。もう少し具体的に表現するなら、半径 r と $r+\mathrm{d}r$ で挟まれる球殻の中に, $r^2[R(r)]^2$ の確率で電子が見出されるのである。この数式の左辺を計算していくと、

LHS of (6.21) =
$$\int_0^\infty r^2 [R(r)]^2 dr$$

= $\int_0^\infty [\chi(r)]^2 dr = \int_0^\infty [X(r)]^2 dr$
= $\frac{1}{2\kappa} \int_0^\infty [X(x)]^2 dx = \frac{c_{nl}^2}{2\kappa} \int_0^\infty e^{-x} x^{2l+2} [L_{n-l-1}^{2l+1}(x)]^2 dx$, (6.22)

が得られる。ここで, c_{nl} は定数であり, 量子数 n と l の組合せに対応する波動関数の振幅である。また, $x \equiv 2\kappa r$ である。この式の右辺が (6.16) と同じ形になっていることに注目すると, 積分は,

LHS of (6.22) =
$$\frac{n c_{nl}^2}{\kappa} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}$$
,

のように計算される。前に述べたように、この積分は1に等しいはずなので、規格化係数は、

$$c_{nl} = \sqrt{\frac{\kappa}{n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}},$$

となる。したがって、波動関数の動径方向の依存関数は、

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{\kappa}{n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} e^{-\kappa r} (2\kappa)^{l+1} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r), \tag{6.23}$$

となる。ここで、動径方向の依存関数は量子数 n と l の組合せによって決まるので、 $R_{nl}(r)$ のように添え字を付加した。さらに、 $\kappa=1/na_0$ のようにボーア半径を用いて書くことができるので、

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{1}{n^2 a_0} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} e^{-r/na_0} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{l+1} r^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right), \tag{6.24}$$

のように書き換えることができる。したがって、水素原子における電子の波動関数は、3 の量子数 n, l, m によって決定できるので、これらを添え字として付加し、

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{6.25}$$

と書くことができる。これで水素原子におけるシュレーディンガーの方程式が解けた。動 径方向の依存関数から得られる $[r\,R_{nl}(r)]^2$ は,図 $6.2\,$ のような曲線を描く。このグラフは,水素原子の原子核から距離 r の球殻で電子を見出す確率を意味する。このグラフの横軸は,ボーア半径 $(0.53\times 10^{-10}\ \mathrm{m})$ を単位とする値で書いている。 この確率分布を見ると,

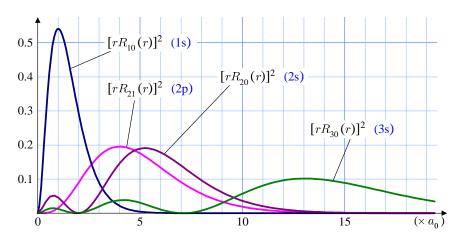


図 6.2: 水素原子の原子核からの距離と電子の確率密度 $(a_0 = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m})$

水素原子の電子が特定の軌道をもたないことがわかる。特に、2s 軌道、3s 軌道の電子は複数個所に確率密度の疎密が存在する。ド・ブロイ波による古典的解釈では、電子軌道の半径は n^2a_0 であったが、図 6.2 によると、電子軌道の平均半径はさらに外側である。電子軌道の平均半径は、後に計算する。

さらに、電子の存在確率を濃淡で描くと図 6.3 のようになる。濃い場所が電子の存在確率が高いことを意味する。量子力学によると、水素原子の電子は惑星のように原子核を周回しているのではなく、原子核の周囲に存在確率に応じた不確かな雲のような状態で存在すると考えられる。その雲は電子雲と呼ばれる。

惑星のような特定の軌道が存在しないとはいえ、量子数によって確率分布が決まっているので、原子核と電子の間には特定の平均距離が定まるはずである。原子核を中心とする半径rの球殻で電子を見出す確率密度が $[r\,R_{nl}(r)]^2$ なので、電子軌道の平均半径は、

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r \left[r R_{nl}(r) \right]^2 dr,$$

で計算できる。さらに計算を続けると、

$$\langle r \rangle = \frac{\kappa}{n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \int_0^\infty e^{-2\kappa r} (2\kappa)^{2l+2} r^{2l} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r) \right]^2 \cdot r^3 dr$$

$$= \frac{\kappa}{n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \int_0^\infty e^{-2\kappa r} (2\kappa)^{2l+2} r^{2l+3} \left[L_{n-l-1}^{2l+1} (2\kappa r) \right]^2 dr$$
$$= \frac{1}{2\kappa} \frac{1}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \int_0^\infty e^{-x} x^{2l+3} \left[L_{n-l-1}^{2l+1} (x) \right]^2 dx,$$

であることがわかる。この積分には、積分公式(6.17)を適用すると便利がよく、

$$\langle r \rangle = \frac{1}{4n\kappa} \cdot 2n \left[2n + 1 + \frac{(2n - 2l - 1)(n + l)}{2n} \right] = \frac{1}{2\kappa} \left[3n - \frac{l(l+1)}{n} \right],$$

のように計算できる。ここで、ボーア半径 a_0 を用いた関係式 $\kappa = 1/na_0$ に注意すると、

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2} \left[3n^2 - l(l+1) \right],$$
 (6.26)

が得られる。この計算結果によると、水素原子の電子の平均軌道半径はド・ブロイ波による古典的解釈による半径とは異なり、2つの量子数nとlに依存することがわかる。しかも、軌道量子数がl=0のとき、平均軌道半径はド・ブロイ波による古典的解釈の1.5倍となる。一方、軌道半径の逆数1/rの平均値は、

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a_0},$$

が同様の計算で (もう少し容易に) 得られる。これは、ド・ブロイ波による古典解釈で計算 される軌道半径の逆数と一致する。

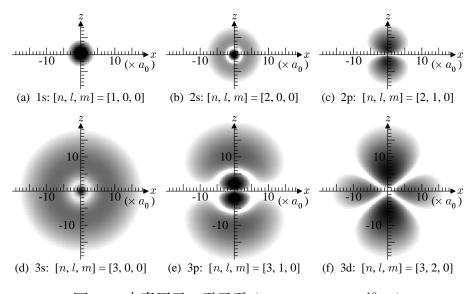


図 6.3: 水素原子の電子雲 $(a_0 = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m})$

第7章 チェビシェフ多項式

本章ではゲーゲンバウアー (Gegenbauer) 多項式, または, 超球多項式の例としてチェビシェフ多項式を取り扱う。ゲーゲンバウアー多項式は, 本書では既にルジャンドル多項式を例として取り上げた。チェビシェフ多項式は物理学での応用を見ることが少ないが, 逆三角関数などの関数近似に応用される。

7.1 ゲーゲンバウアー多項式

本章で取り扱う多項式は母関数によって導入する。ゲーゲンバウアー多項式は, 母関数表示:

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(\alpha)}(x) t^n = \frac{1}{(1 - 2xt + t^2)^{\alpha}}$$
 (7.1)

によって定義される。この定義式から容易にわかるように, $\alpha=1/2$ ではルジャンドル多項式が与えられる。本章では, ゲーゲンバウアー多項式の例として, 2つのチェビシェフ多項式を取り扱う。

7.1.1 第2種チェビシェフ多項式

母関数表示(7.1) をt について微分すると、ゲーゲンバウアー多項式の漸化式を得ることができる。結果として得られる漸化式は、

$$C_1^{(\alpha)}(x) = 2\alpha x C_0^{(\alpha)}(x),$$
 (7.2a)

$$(n+1) C_{n+1}^{(\alpha)}(x) = (2n+2\alpha) x C_n^{(\alpha)}(x) - (n+2\alpha-1) C_{n-1}^{(\alpha)}(x), \tag{7.2b}$$

である。この漸化式に $\alpha=1/2$ を代入すると, ルジャンドル多項式の漸化式と一致する。 それでは, (7.1) を t について微分して漸化式を導出しよう。母関数表示 (7.1) の左辺と右辺を t について微分して等号で結ぶと,

$$2\alpha \sum_{n=0}^{\infty} \left(x C_n^{(\alpha)}(x) t^n - C_n^{(\alpha)}(x) t^{n+1} \right)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(n C_n^{(\alpha)}(x) t^{n-1} - 2nx C_n^{(\alpha)}(x) t^n + n C_n^{(\alpha)}(x) t^{n+1} \right),\,$$

が得られる。この等式を整理すると.

$$2\alpha x C_0^{(\alpha)} - C_1^{(\alpha)} = \sum_{n=1}^{\infty} \left[(n+1) C_{n+1}^{(\alpha)}(x) - (2n+2\alpha) x C_n^{(\alpha)}(x) + (n+2\alpha-1) C_{n-1}^{(\alpha)}(x) \right] t^n,$$
 (7.3)

となる。任意の次数 n に対してこの等式が恒等的に成立するための条件として、上に書いた漸化式が導かれる。漸化式 (7.3) に $\alpha=1/2$ を代入すると、ルジャンドル多項式の漸化式と一致する。

ゲーゲンバウアー多項式において, $\alpha=1$ によって与えられる多項式は第 2 種チェビシェフ多項式と呼ばれる。第 2 種チェビシェフ多項式は,慣習として $U_n(x)$ なる記号で表記され, $U_n(x) \equiv C_m^{(1)}(x)$ のように定義される。第 2 種チェビシェフ多項式 $U_n(x)$ の具体的な展開式を得るには,母関数表示を実際に展開するとよい。計算すると,

$$\frac{1}{1 - 2xt + t^2} = \sum_{m=0}^{\infty} (2xt - t^2)^m$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{m!}{k! (m-k)!} (2x)^{m-k} t^{m+k}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k)!}{k! (n-2k)!} 2^{m-2k} x^k t^{2n-k},$$

が得られるので、第2種チェビシェフ多項式は、

$$U_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k)!}{k! (n-2k)!} 2^{n-2k} x^{n-2k}, \tag{7.4}$$

となる。第 2 種チェビシェフ多項式 $U_n(x)$ の漸化式は、(7.3) に $\alpha=1/2$ を代入して得られる数式:

$$U_1(x) = 2xU_0(x), (7.5a)$$

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x), (7.5b)$$

である。母関数表示に t=0 を代入すると, $U_0(x)=1$ が得られる。この結果を漸化式 (7.5a) と (7.5b) に代入すると,

$$U_0(x) = 1,$$
 $U_1(x) = 2x,$ $U_2(x) = 4x^2 - 1,$ $U_3(x) = 8x^3 - 4x,$ $U_4(x) = 16x^4 - 12x^2 + 1,$ $U_5(x) = 32x^5 - 32x^3 + 6x,$

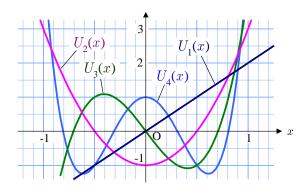


図 7.1: 第2種チェビシェフ多項式

が得られる。第2種チェビシェフ多項式は図7.2に示す曲線を描く。

母関数を利用すると, $x=0,\pm 1$ における第 2 種チェビシェフ多項式の関数値が, 前に導出した級数による計算をすることなしに定まる。その結果を書くと,

$$U_n(1) = n + 1$$
, $U_n(-1) = (-1)^n (n + 1)$, $T_{2n}(0) = (-1)^n$, $T_{2n+1}(0) = 0$, (7.6)

となる。まず、x=1については、

$$\sum_{n=0}^{\infty} U_n(1) t^n = \frac{1}{(1-t)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) t^n,$$

であることから $U_n(1) = n + 1$ が導かれる。続いてx = -1のとき

$$\sum_{n=0}^{\infty} U_n(-1) t^n = \frac{1}{(1+t)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (n+1) t^n,$$

であることから $U_n(-1) = (-1)^n$ が導かれる。 最後に, x = 0 については,

$$\sum_{n=0}^{\infty} U_n(0) t^n = \frac{1}{1+t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n t^{2n},$$

であることから(7.6)に書いた事実が導かれる。

7.1.2 第1種チェビシェフ多項式

ゲーゲンバウアー多項式をべき指数 $\alpha=0$ について考える際には注意が必要である。なぜなら、単純に $\alpha=0$ を適用すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(0)}(x) t^n = 1,$$

となるので, $n \neq 0$ について $C_n^{(0)}(x) = 0$ となる。これでは面白くないので, 代わりに,

$$T_n(x) \equiv \frac{n}{2} \lim_{\alpha \to \infty} \frac{C_n^{(\alpha)}(x)}{\alpha},$$

なる多項式 $T_n(x)$ を考えてみよう。この多項式がゼロでないためには, $C_n^{(\alpha)}(x)$ が α について 1 位の零点であることを期待している。この期待が正しいことを示すため, 母関数表示を微分してみる。すると,

$$\frac{2\alpha (x-t)}{(1-2xt+t^2)^{\alpha+1}} = \sum_{n=1}^{\infty} nC_n^{(\alpha)}(x) t^{n-1},$$

が得られる。この式に t/α を乗じ、さらに、1を加算すると、

$$1 + \frac{2xt - 2t^3}{(1 - 2xt + t^2)^{\alpha + 1}} = 1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{nC_n^{(\alpha)}(x)}{2\alpha} t^n,$$

となる。この数式に対して $\alpha \to 0$ の極限をとると,

$$\frac{1-t^2}{1-2xt+t^2} = T_0(x) + 2\sum_{n=0}^{\infty} T_n(x) t^n,$$
(7.7)

が得られる。ここで, $T_0(x) = 1$ とした。新たに定義した $T_n(x)$ は第1種チェビシェフ多項式, または, 単純にチェビシェフ多項式と呼ばれ, 数式 (7.1) は第1 チェビシェフ多項式の 母関数である。チェビシェフ多項式は漸化式:

$$T_1(x) = xT_0(x), \tag{7.8a}$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x),$$
 (7.8b)

を満足する。この漸化式は母関数表示をtについて微分すると導出できる。実際に母関数表示を微分すると、

$$-\frac{2t}{1-2xt+t^2} + \frac{2(1-t^2)(x-t)}{(1-2xt+t^2)^2} = 2\sum_{n=0}^{\infty} nT_n(x) t^{n-1},$$

が得られる。この数式に $1-2xt+t^2$ を乗じると、

$$-2t + 2xT_0(x) - 2T_0(x)t + 2\sum_{n=1}^{\infty} \left[2xT_n(x)t^n - 2T_n(x)t^{n+1} \right]$$
$$= 2\sum_{n=1}^{\infty} \left[nT_n(x)t^{n-1} - 2nxT_n(x)t^n + nT_n(x)t^{n+1} \right]$$

が得られ、この数式を整理すると、

$$xT_0(x) - T_1(x) - \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \left[T_{n+1}(x) - 2xT_n(x) + T_{n-1}(x) \right] t^n = 0,$$

となるのでチェビシェフ多項式の漸化式 (7.8a) と (7.8b) が導出される。その漸化式を用いてチェビシェフ多項式を順次計算すると、

$$T_0(x) = 1,$$
 $T_1(x) = x,$ $T_2(x) = 2x^2 - 1,$ $T_3(x) = 4x^3 - 3x,$ $T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1,$ $T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x,$

が得られる。チェビシェフ多項式は図 7.2 に示す曲線を描く。変数 x が区間 [-1,1] に含まれていればチェビシェフ多項式は $-1 \le T_n(x) \le 1$ となる。後に示すが, $x = \cos \theta$ とおくとチェビシェフ多項式が $T_n(x) = \cos n\theta$ であることから,その事実は正当化できる。

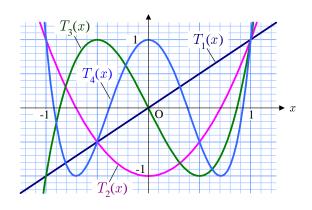


図 7.2: 第1種チェビシェフ多項式

チェビシェフ多項式は漸化式によって順次計算することができるが, $T_n(x)$ をべき級数として表現することができる。そのべき級数表現は,

$$T_n(x) = \frac{n}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(n-k-1)!}{k! (n-2k)!} (2x)^{n-2k} \qquad (n>0),$$
 (7.9)

のように書くことができる。この級数は母関数を展開することによって導出できる。それ を実演するため、母関数を実際に展開してみると、

$$\frac{1-t^2}{1-2xt+t^2} = (1-t^2) \sum_{n=0}^{\infty} \left[\sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k)!}{k! (n-2k)!} (2x)^{n-2k} \right] t^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k)!}{k! (n-2k)!} (2x)^{n-2k} - \sum_{k=0}^{\lfloor n/2-2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k-2)!}{k! (n-2k-2)!} (2x)^{n-2k-2} \right] t^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k)!}{k! (n-2k)!} (2x)^{n-2k} - \sum_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^{k-1} \frac{(n-k-1)!}{(k-1)! (n-2k)!} (2x)^{n-2k} \right] t^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{n!}{n!} (2x)^n + \sum_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k-1)!}{k! (n-2k)!} (2x)^{n-2k} \right] t^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left[n \sum_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(n-k-1)!}{k! \, (n-2k)!} (2x)^{n-2k} \right] t^n,$$

が得られる。この結果を(7.7)と比較すると(7.9)が導かれるのだ。なお、この導出過程では第2種チェビシェフ多項式のべき級数展開(7.4)を利用した。

母関数を利用すると, $x=0,\pm 1$ におけるチェビシェフ多項式の関数値が, 前に導出した級数による計算をすることなしに定まる。その結果を書くと.

$$T_n(1) = 1,$$
 $T_n(-1) = (-1)^n,$ $T_{2n}(0) = (-1)^n,$ $T_{2n+1}(0) = 0,$ (7.10)

となる。まず, x = 1 については,

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_n(1) t^n = \frac{1-t^2}{(1-t)^2} = \frac{1+t}{1-t}$$
$$= -1 + \frac{2}{1-t} = -1 + 2 \sum_{n=0}^{\infty} t^n,$$

であることから $T_n(1) = 1$ が導かれる。続いて, x = -1のとき,

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_n(-1) t^n = \frac{1-t^2}{(1+t)^2} = \frac{1-t}{1+t}$$
$$= -1 + \frac{2}{1+t} = -1 + 2\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n t^n,$$

であることから $T_n(-1) = (-1)^n$ が導かれる。 最後に, x = 0 については,

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_n(0) t^n = \frac{1 - t^2}{1 + t^2}$$

$$= -1 + \frac{2}{1 + t^2} = -1 + 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n t^{2n},$$

であることから (7.10) に書いた事実が導かれる。

7.2 チェビシェフの微分方程式

チェビシェフ多項式 $U_n(x)$ と $T_n(x)$ の母関数を x について微分すると導関数に関する漸化式が得られる。本節では、チェビシェフ多項式の導関数についての漸化式から、チェビシェフ多項式の性質を調べる。

7.2.1 ゲーゲンバウアー多項式の導関数

チェビシェフ多項式は、ルジャンドル多項式と同様に、ゲーゲンバウアー多項式の一種であるので、ゲーゲンバウアー多項式の導関数を調べておくことは有用である。ゲーゲンバウアー多項式 $C_n^{(\alpha)}(x)$ の導関数について、

$$(1 - x^2) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} C_n^{\alpha}(x) - (2\alpha + 1) x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} C_n^{(\alpha)}(x) + n (n + 2\alpha) C_n^{\alpha)}(x) = 0, \tag{7.11}$$

が成立する。特に, $\alpha=1/2$ であればこの方程式はルジャンドル微分方程式である。この 微分方程式は下に示すように母関数から得られるのだ。

微分方程式 (7.11) を得るには、本章の冒頭で紹介した母関数 (7.1) に注目する。微分方程式を証明するにあたり、簡単のため $C_n^{(\alpha)}(x)$ を C_n と表記することにしよう。また、そのx についての導関数を C_n' と表記する。母関数を x について微分すると、

$$\frac{\alpha t}{(1 - 2xt + t^2)^{\alpha + 1}} = \sum_{n=0}^{\infty} C'_n t^n,$$

が得られる。この数式の両辺に $1-2xt+t^2$ を乗じ, t^{n+1} の係数を取り出すと,

$$C'_{n+1} + C'_{n-1} = 2\alpha C_n + 2xC'_n, (7.12)$$

が得られる。一方、導関数を含まないゲーゲン多項式の漸化式:

$$(n+1) C_{n+1} = (2n+2\alpha) x C_n - (n-2\alpha-1) C_{n-1},$$
 (7.2b)

を再び書いておく。漸化式 (7.2b) を x について微分し, (7.12) との連立方程式によって, C_n' の項を消去すると,

$$C'_{n+1} - C'_{n-1} = (2n + 2\alpha) C_n, (7.13)$$

が得られる。続いて、(7.12)と(7.13)を組み合わせると、

$$C'_{n+1} = (n+2\alpha) C_n + xC'_n, (7.14)$$

$$C'_{n-1} = -nC_n + xC'_n, (7.15)$$

が得られる。得られた数式 (7.14) の添え字 n を n-1 に入れ替え, (7.15) を x 倍した数式:

$$C'_{n} = (n + 2\alpha - 1) C_{n-1} + xC'_{n-1},$$

 $xC'_{n-1} = -nxC_{n} + x^{2}C'_{n},$

によって C'_{n-1} の項を消去すると,

$$(1 - x^2) C_n' = (n + 2\alpha - 1) C_{n-1} - nxC_n, \tag{7.16}$$

が得られる。この結果を x について微分して得られる数式:

$$(1 - x^2) C_n'' = (n + 2\alpha - 1) C_{n-1}' - (n-2) x C_n' - nC_n,$$

$$(7.17)$$

に対して, (7.15) を組み合わせて C'_{n-1} の項を消去するとゲーゲンバウアー多項式の微分方程式 (7.11) が導出される。¶

7.2.2 三角関数による表現

ゲーゲンバウアー多項式の微分方程式を利用して、チェビシェフ多項式の微分方程式を得ることができる。 さらに、その微分方程式から、チェビシェフ多項式が三角関数と有用な関係があることが導かれる。 それは、物理学においてルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の変数x を $\cos\theta$ で置き換えた関数を頻繁に使っていたことと類似している。

チェビシェフ多項式の導関数はゲーゲンバウアー多項式の導関数から容易に得ることができる。まず、第 2 種チェビシェフ多項式は率直に $\alpha=1$ とすればよいのだから, $U_n(x)$ に関する微分方程式は.

$$(1 - x^2) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} U_n(x) - 3x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} U_n(x) + n(n+2) U_n(x) = 0, \tag{7.18}$$

となる。第 1 種チェビシェフ多項式についても同様である。ゲーゲンバウアー多項式の微分方程式 (7.11) に $n/2\alpha$ を乗じて $\alpha \to 0$ の極限をとると,

$$(1 - x^2) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} T_n(x) - x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} T_n(x) + n^2 T_n(x) = 0, \tag{7.19}$$

が得られる。これが (第 1 種) チェビシェフ多項式 $T_n(x)$ に関する微分方程式である。当然、この方程式は (7.11) に素直に $\alpha=0$ を代入した結果と同一である。

チェビシェフ多項式は三角関数と深い関係がある。チェビシェフ多項式の変数を $x \equiv \cos \theta$ とおくと、 微分方程式 (7.19) は、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} T_n(\cos\theta) + n^2 T_n(\cos\theta) = 0, \tag{7.20}$$

なる方程式に書き換えられる。この微分方程式の解は $\cos n\theta$ と $\sin n\theta$ の線形結合であるが、(7.10) を境界条件とすると、

$$T_n(\cos\theta) = \cos n\theta,\tag{7.21}$$

であることがわかる。この事実は、チェビシェフ多項式が余弦関数のn倍角の公式に対応していることを意味している。このことに注意して、三角関数の和と積の公式:

$$\cos A + \cos B = 2\cos\frac{A+B}{2}\cos\frac{A-B}{2},$$

を見てもらいたい。この公式C, $A = (n+1)\theta$, $B = (n-1)\theta$ を代入すると、

$$\cos(n+1)\theta + \cos(n-1)\theta = 2\cos\theta\,\cos n\theta,$$

が得られる。この結果はチェビシェフ多項式について, $x=\cos\theta$ とした場合のチェビシェフ多項式の漸化式と同一である。つまり, チェビシェフ多項式のx を $\cos\theta$ で置き換え, $T_n(x)$ を $\cos n\theta$ に置き換えた数式:

$$\cos 2\theta = 2\cos^2 \theta - 1,$$

$$\cos 3\theta = 4\cos^3 \theta - 3\cos \theta,$$

$$\cos 4\theta = 8\cos^4 \theta - 8\cos^2 \theta + 1,$$

$$\cos 5\theta = 16\cos^5 \theta - 20\cos^3 \theta + 5\cos \theta,$$

が成立するのである。さらに一般化すると、チェビシェフ多項式のべき級数展開 (7.9) を利用して、

$$\cos n\theta = \frac{n}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(n-k-1)!}{k! (n-2k)!} (2\cos\theta)^{n-2k} \qquad (n>0),$$
 (7.22)

と書くことができる。チェビシェフ多項式が余弦関数のn倍角の公式となっていることに気づけば、チェビシェフ多項式に親近感がわくことだろう。

第2種チェビシェフ多項式は、第1種ほどではないが、三角関数を用いた表現をすることができる。第2種チェビシェフの微分方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} U_n(\cos\theta) + 2\cot\theta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} U_n(\cos\theta) + n(n+2) U_n(\cos\theta) = 0, \tag{7.23}$$

のように書くことができる。この方程式は $T_n(\cot\theta)$ の方程式のように簡単な形ではない。 しかし、チェビシェフ多項式に関する方程式なので、大きく形が異なるとも思えない。と いうことで、ある関数 $f(\theta)$ を乗じて $f(\theta)$ $U_n(\cos\theta)$ としたときに、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} f(\theta) U_n(\cos \theta) + \lambda^2 f(\theta) U_n(\cos \theta) = 0,$$

となることを仮定しよう。ライプニッツの公式を用いてこの数式を変形すると、

$$U_n \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\theta^2} + 2 \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\theta} \frac{\mathrm{d}U_n}{\mathrm{d}\theta} + f \frac{\mathrm{d}^2 U_n}{\mathrm{d}\theta^2} + \lambda^2 f U_n = 0,$$

となる。ここで, $f(\theta)$ と $U_n(\cos \theta)$ を, それぞれ, f と U_n なる記号で簡略表記した。この数式の両辺に 1/f を乗じると,

$$\frac{\mathrm{d}^2 U_n}{\mathrm{d}\theta^2} + \frac{2}{f} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\theta} \frac{\mathrm{d}U_n}{\mathrm{d}\theta} + \left(\frac{1}{f} \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\theta^2} + \lambda^2\right) U_n = 0,$$

が得られる。この微分方程式は (7.23) と同一の方程式なので、

$$\frac{1}{f}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\theta} = \cot\theta, \qquad \frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}\theta^2} = -\beta^2f,$$

が成立しなければならない。ただし, $\beta^2+\lambda^2=n\,(n+2)$ である。この方程式を満たすのは, $f(\theta)=\sin(\theta)$ でなければならない。それに伴い, $\beta=1$ であることも確定した。したがって, 微分方程式 (7.23) は,

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} \left(U_n(\cos\theta) \sin\theta \right) + (n+1)^2 U_n(\cos\theta) \sin\theta = 0,$$

のように書き換えられる。つまり、この微分方程式の基本解は、

$$U_n(\cos \theta) = \frac{\cos(n+1)\theta}{\sin \theta}, \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta},$$

であることになる。解を特定するには, $U_n(\cos\theta)$ の特別な値 (7.6) を境界条件とすればよい。その結果,

$$U_n(\cos \theta) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta},\tag{7.24}$$

のように解が特定できる。

上で述べた境界条件を考慮しなければ、微分方程式 (7.19) と (7.23) は 2 階の微分方程式 であるので、それぞれ、独立な 2 つの解をもつはずである。既に書いたように、独立した 2 つの解は、微分方程式 (7.19) では、

$$T_n(\cos \theta) = \cos n\theta, \quad V_n(\cos \theta) = \sin n\theta,$$

であり、微分方程式 (7.23) では、

$$U_n(\cos \theta) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}, \quad W_n(\cos \theta) = \frac{\cos(n+1)\theta}{\sin \theta},$$

である。第2の解 $V_n(\cos\theta)$ と $W_n(\cos\theta)$ は、変数をxとすると、

$$V_n(x) = (1 - x^2)^{1/2} U_{n-1}(x), \qquad W_n(x) = (1 - x^2)^{-1/2} T_{n+1}(x),$$

なる式で第1の解と関係づけられる。この関係式は、第2の解は有限項の多項式で記述で きないことを意味している。

7.3 直交性と級数展開

チェビシェフ多項式には直交があり、それを利用して任意の関数をチェビシェフ多項式の級数で表現することができる。チェビシェフ多項式による級数展開は、近似の最大誤差がほかの級数に比べて小さいため、計算機による関数計算で応用される。本節では、直交性を紹介した後、級数展開について解説する。

7.3.1 直交性

チェビシェフ多項式の直交性は三角関数の直交性と簡単な対応がある。前節で示したように, $T_n(x)$ と $W_n(x)$ は余弦関数に対応し, $U_n(x)$ と $V_n(x)$ は正弦関数と対応する。チェビシェフ多項式の直交性は、結果を書くと、

$$\int_{-1}^{1} T_m(x) T_n(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx = \begin{cases} 0 & \text{if } m \neq n, \\ \pi/2 & \text{if } m = n \neq 0, \\ \pi & \text{if } m = n = 0, \end{cases}$$
 (7.25a)

$$\int_{-1}^{1} V_m(x) V_n(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx = \begin{cases} 0 & \text{if } m \neq n, \\ \pi/2 & \text{if } m = n \neq 0, \\ 0 & \text{if } m = n = 0, \end{cases}$$
 (7.25b)

$$\int_{-1}^{1} U_m(x) U_n(x) (1 - x^2)^{1/2} dx = \frac{\pi}{2} \delta_{mn},$$
 (7.25c)

$$\int_{-1}^{1} W_m(x) W_n(x) (1 - x^2)^{1/2} dx = \frac{\pi}{2} \delta_{mn},$$
 (7.25d)

なる数式で表現できる。これらの関係式の導出は簡単である。関係式を導出するには、 $x \equiv \cos \theta$ で置き換え、三角関数の積と和の公式:

$$\cos \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} \left[\cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha + \beta) \right],$$

$$\sin \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} \left[\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta) \right],$$

を用いればよい。チェビシェフ多項式 $T_n(x)$ の直交性 (7.25a) に関して, $x \equiv \cos \theta$ で置き換えると、

LHS of (7.25a) =
$$\int_0^{\pi} \cos n\theta \cos m\theta \, d\theta$$
$$= \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \left[\cos(n-m)\theta + \cos(n+m)\theta \right] \, d\theta,$$

が得られる。第 2 行目への数式変形に三角関数の積と和の公式を適用した。この数式は, n=m=0 ならば π , $n=m\neq 0$ ならば $\pi/2$, その他の場合は 0 である。したがって, $T_n(x)$ に関する直交性 (7.25a) が証明できた。他の関数の直交性については証明を省略するが,三角関数の積とわの公式を利用して,同様の手順で証明できる。

7.3.2 チェビシェフ級数展開

定義域が [-1,1] がである関数はチェビシェフ多項式で級数展開することができる。その級数展開における展開係数は、直交性を利用して、フーリエ変換と同様の手法で決定できる。

ある関数 f(x) を考えよう。この関数をチェビシェフ多項式 $T_n(x)$ で級数展開しよう。級数展開するには、関数 f(x) が、

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n T_n(x),$$
 (7.26)

のように展開できることを仮定する。チェビシェフ多項式で級数展開するとは、展開係数 F_n を求めることである。展開係数は、

$$F_n = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 f(x) T_n(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx, \qquad (7.27)$$

によって決定できる。展開式を得るためのこの公式は, チェビシェフ多項式の直交性によって証明できる。つまり,

$$\int_{-1}^{1} f(x) T_n(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} F_m \int_{-1}^{1} T_m(x) T_n(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\pi F_m}{2} \delta_{mn} = \frac{\pi F_n}{2},$$

が成立することを利用して展開係数が得られるのである。この直交性を利用した展開係数の決定法はフーリエ変換と同一の手法である。

展開係数を計算する公式 (7.27) は, $x=\cos\theta$ とおいたとき, $T_n(\cos\theta)=\cos n\theta$ であることを利用すると,

$$F_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(\cos \theta) \cos n\theta \, d\theta, \qquad (7.28)$$

なる式で書くことができる。このように書くとチェビシェフ多項式による多項式展開が、 フーリエ級数に似ているように思えてくる。

この公式の簡単な応用例として、逆余弦関数 $\arccos x$ をチェビシェフ多項式によって展開しよう。 $x=\cos\theta$ とおくと、 $\arccos x=\theta$ であるので、 展開係数は、

$$F_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \theta \cos n\theta \, \mathrm{d}\theta,$$

なる式によって計算できる。さらに計算を進めると,

$$F_0 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \theta \, d\theta = \frac{\pi}{2},$$

$$F_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \theta \cos n\theta \, d\theta = -\frac{2}{\pi n} \int_0^{\pi} \sin n\theta \, d\theta = -\frac{2}{\pi n^2} \qquad (n \neq 0),$$

が得られる。第2行目の積分は部分積分を適用すれば計算できる。この計算結果から、逆余弦関数 $\arccos x$ は、

$$\arccos x = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{T_{2n+1}(x)}{(2n+1)^2},$$

のようにチェビシェフ多項式で展開できることがわかった。さらに、この結果から、逆正 弦関数 $\arcsin x$ は、

$$\arcsin x = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{T_{2n+1}(x)}{(2n+1)^2},$$

となる。逆正弦関数のチェビシェフ展開は、単に $\arccos x = \pi/2 - \arcsin x$ なる関係を利用してもよいし、公式 (7.28) において、 $f(\cos \theta) = \pi/2 - \theta$ として真面目に積分計算しても同様の結果を得る。ところで、 $\arcsin 1 = \pi/2$ であり、 $T_n(1) = 1$ であることに注意すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} = 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \dots = \frac{\pi^2}{8},$$

なる事実が導かれる。この事実から、さらに、 $\zeta(2) = 1 + 2^{-2} + 3^{-2} + \cdots = \pi^2/6$ なる関係式、すなわち、第 2.2 節で取り扱ったバーゼル問題の解が得られる。

7.3.3 正弦関数のチェビシェフ級数展開

応用例として, 正弦関数 $\sin(\pi x/2)$ をチェビシェフ級数展開しよう。チェビシェフ級数展開は, 必ずしも, 最小二乗法のように平均誤差が小さくする近似法ではないが, 最大誤差を小さくできる性質がある。本稿では, 正弦関数を例にして, そのようなチェビシェフ級数展開の特徴を説明する。

チェビシェフ級数展開の対象となる関数の定義域は [-1,1] である。正弦関数をチェビシェフ級数展開するには、 $\sin(\pi x/2)$ のように変数を π 倍しておけば正弦関数の一周期をチェビシェフ級数展開することができる。チェビシェフ展開の n 次の展開係数を F_n としたとき、展開係数を計算する公式 (7.28) は、

$$F_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin(\pi \cos \theta) \cos n\theta \, d\theta,$$

によって計算される。この公式からはわかりづらいが、偶数次のチェビシェフ多項式 $T_{2m}(x)$ は偶関数であるので、奇関数である $\sin(\pi x/2)$ を展開する場合、偶数次の展開係数 F_{2m} は必ずゼロになる。したがって、ゼロでない展開係数は奇数次のみである。数値積分によって、上の積分を実行して展開係数を決定すると、7次近似で、

$$\sin(\pi x/2) \simeq 1.133648177811748T_1(x) - 0.138071776587192T_3(x) + 0.004490714246555T_5(x) - 0.000067701275842T_7(x),$$

となる。この級数を計算すると正弦関数の近似値が得られるのであるが、他の級数と比較したくなるであろう。そこで、マクローリン級数、最小自乗法による級数展開、チェビシェフ級数における展開級数を表 7.1 に比較してみた。この表は、関数をx のべき級数として

n	Maclaurin	Least square	Chebyshev
1	1.570796326794897	1.570792231703370	1.570790987736990
3	-0.645964097506246	-0.645904393119443	-0.645892662727028
5	0.079692626246167	0.079460659203287	0.079433970839205
7	-0.004681754135319	-0.004349816639261	-0.004332881653902
9	0.000160441184787	_	_

表 7.1: 正弦関数 $\sin(\pi x/2)$ の級数表現における展開係数

展開したときの x^n の係数を表している。 チェビシェフ級数展開の場合, チェビシェフ多項式 $T_n(x)$ をx の多項式として展開して x^n の展開係数を計算した結果を表に記載した。マクローリン級数は9 次までの展開係数を,最小自乗法とチェビシェフ級数は7 次までの展開係数を表に示した。各近似法における展開係数は互いに,近い値となっているが,次数が高くなるにつれ,マクローリン級数の係数が他の2 つと次第に離れていくことがわかる。これらの係数を用いた級数近似と真値 $\sin(\pi x/2)$ の誤差は,図7.3 のような曲線を描く。マクローリン級数については,7 次近似と9 次近似に対する誤差を,最小自乗法とチェビシェフ級数については7 次近似に対する誤差をプロットした。マクローリン級数は,|x|

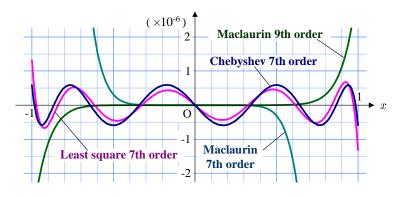


図 7.3: 正弦関数 $\sin(\pi x/2)$ の近似誤差

が小さい場合に最も誤差が小さいが, |x| の増加とともに急激に誤差が増大する。最小自乗法とチェビシェフ級数は, ほぼ同じように誤差が振動するが, 全体的にみるとわずかに最小二乗法の方が誤差が小さい。変数 |x| が小さいときマクローリン級数の精度が最も良好であるが, ± 1 付近で誤差が急激に増大するため, 平均誤差は最小自乗法やチェビシェフ級数にはかなわない。チェビシェフ級数は定義域全体にわたって一定の幅で誤差が振動しているのが特徴である。さらに, $x=\pm 1$ での誤差は最小自乗法より小さい。その特徴があるため, チェビシェフ級数は関数の近似に用いられることが多い。

第8章 積分形式で定義される関数

ガンマ関数のように、既存関数の積分形式によって新たな関数を定義すると、様々な数 学や物理の問題を数学的な記法によって解決できるようになる。そのような新しい関数 は、従来解けなかった微分方程式の解を記号で表記するだけに見えるかもしれない。しか し、その定義に沿って性質を調べていくと、計算手法も確立する。計算手法が確立すれば、 新たに定義された関数は、正弦関数や指数関数のように取り扱うことができるはずだ。本 章では、積分形式によって定義される関数を取り扱う。

8.1 誤差関数

誤差関数は、正規分布に従う確率事象の累積確率を計算するための関数である。誤差関数は、 $\operatorname{erf} x$ なる記号を用いて記述され、

$$\operatorname{erf} x \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \qquad \operatorname{erfc} x \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt, \tag{8.1}$$

のように定義されている。後者の関数 $\operatorname{erfc} x$ は相補誤差関数と呼ばれる。これらの関数の間には、 $\operatorname{erf} x + \operatorname{erfc} x = 1$ なる関係がある。誤差関数は、標準偏差が $\sqrt{1/2}$ の正規分布について、確率変数の絶対値が x より小さい確率を与える。視覚的には、図 8.1 の中央の領域 $-x \leq t \leq x$ で確率密度関数 $e^{-t^2}/\sqrt{\pi}$ がつくる面積が $\operatorname{erf} x$ であり、両端の網掛け部の面積が $\operatorname{erfc} x$ である。

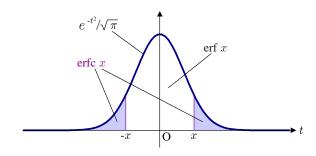


図 8.1: 正規分布の累積確率としての誤差関数の解釈

8.1.1 マクローリン級数と漸近展開

誤差関数 $\operatorname{erf} x$ を計算する簡単な方法は、(8.1) における被積分関数をマクローリン展開して得られた級数を項別積分することである。そのような方法によって、

$$\operatorname{erf} x = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{n! (n+1/2)},$$
(8.2a)

erfc
$$x = 1 - \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{n! (n+1/2)},$$
 (8.2b)

が得られる。相補誤差関数 $\operatorname{erf} x$ については, $\operatorname{erf} x + \operatorname{erfc} x = 1$ なる関係を利用した。この関係は, $x \to \infty$ の極限で $\operatorname{erf} x \to 1$ となることが前提である。これは, 上に述べたような正規分布における累積確率の解釈から明らかであるが, 念のため, $x \to \infty$ の極限で $\operatorname{erf} x \to 1$ となることを示しておこう。

無限遠における誤差関数が erf $x \to 1$ となることは, $(\text{erf } x)^2$ を評価することによって証明できる。誤差関数の自乗は $x \to \infty$ の極限で,

$$\lim_{x \to \infty} (\operatorname{erf} x)^2 = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi \cdot \int_0^\infty e^{-\eta^2} d\eta = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(\xi^2 + \eta^2)} d\xi d\eta,$$

のように書くことができる。ここで, $\xi \equiv \rho \cos \theta$, $\eta \equiv \rho \sin \theta$ のように置き換えると,

$$\lim_{x \to \infty} (\operatorname{erf} x)^2 = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \rho e^{-\rho^2} d\theta d\rho = 2 \int_0^\infty \rho e^{-\rho^2} d\rho$$
$$= \int_0^\infty e^{-u} du = 1,$$

となる。この数式の第1行目は、2次元の直交座標系 $[\xi,\eta]$ における面積分を、2次元の極座標系 $[\rho,\theta]$ に変換した数式変形である。なお、積分範囲が $[\xi,\eta]$ における第 I 象限全体であるので、極座標に変換した際、積分範囲が $0 \le \theta \le \pi/2$ となっている。第2行目への数式変形は、 $u \equiv \rho^2$ なる置き換えを適用した。この数式の両辺の平方根をとると、 $x \to \infty$ の極限で、 $\operatorname{erf} x \to 1$ となることが示された。¶

誤差関数のマクローリン級数の収束半径は無限大であるが、大きなxについては漸近展開を利用する方が便利である。誤差関数は、

$$\operatorname{erf} x = 1 - \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{2x^3} + \frac{1 \cdot 3}{2^2 x^5} - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2^3 x^7} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{2^4 x^9} - \cdots \right), \tag{8.3a}$$

$$\operatorname{erfc} x = \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{2x^3} + \frac{1 \cdot 3}{2^2 x^5} - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2^3 x^7} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{2^4 x^9} - \cdots \right), \tag{8.3b}$$

のように漸近展開できる。十分に大きなxを与えた場合, $\operatorname{erfc} x \simeq e^{-x^2}/\sqrt{\pi}x$ が成立することを意味する。そのような第1項目だけの近似でもx=5であれば誤差は2% 以内に抑え

8.1. 誤差関数 205

られる。さらに、第2項目までを使うと誤差は0.06% 以内に減少できる。漸近展開は加算する項を増やしすぎると発散するので注意が必要である。これらの漸近展開の場合、使用する項の数をnとしたとき、 $2n+1>2x^2$ となる場合、nの増加で誤差が増えるのだ。

誤差関数の漸近展開を得るには,

$$I_n(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t^2}}{t^n} \, \mathrm{d}t,$$

を評価すればよい。部分積分を利用して積分 $I_n(x)$ を計算すると、

$$I_n(x) = \frac{e^{-x^2}}{x^{n+1}} - \frac{n+1}{2} \int_x^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{t^{n+2}} dt = \frac{e^{-x^2}}{x^{n+1}} - \frac{n+1}{2} I_{n+2}(x),$$

なる漸化式が得られる。この漸化式に注意して $\operatorname{erfc} x = 2I_0(x)/\sqrt{\pi}$ を計算すると、漸近展開 (8.3b) が得られる。さらに、 $\operatorname{erf} x + \operatorname{erfc} x = 1$ を利用して漸近展開 (8.3a) が得られる。 \P

マクローリン級数と漸近展開を用いて誤差関数を計算すると、誤差関数は図 8.2 に示す曲線を描く。誤差関数は奇関数であり、無限遠 $x\to\pm\infty$ で ±1 に漸近する。 誤差関数 erf x,

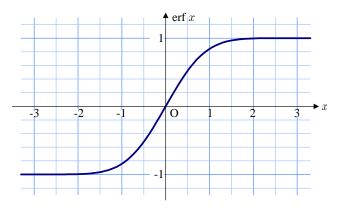


図 8.2: 誤差関数

あるいは、相補誤差関数 $\operatorname{erfc} x$ は工学における雑音解析に有用な関数である。相補誤差関数 $\operatorname{erfc} x$ は、本節の冒頭で述べたように、標準偏差 $\sqrt{1/2}$ の正規分布にしたがう確率変数の絶対値が x を超える確率を与える。この解釈が雑音解析に有用なのである。

8.1.2 不完全ガンマ関数との関係

誤差関数 $\operatorname{erf} x$ と相補誤差関数 $\operatorname{erfc} x$ は不完全ガンマ関数を用いた簡単な数式で表現できる。その関係式は、

$$\operatorname{erf} x = \frac{1}{\pi} \gamma \left(\frac{1}{2}, x^2\right), \qquad \operatorname{erfc} x = \frac{1}{\pi} \Gamma \left(\frac{1}{2}, x^2\right), \tag{8.4}$$

である。簡単な数式どころか、不完全ガンマ関数そのものである。誤差関数の積分による定義式 (8.1) の積分変数を, $u \equiv t^2$ のように置き換えると、

erf
$$x = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x^2} u^{-1/2} e^{-u} du$$
,

のように計算できる。この式の右辺が不完全ガンマ関数になっているため、誤差関数は不完全ガンマ関数を用いて記述できるのだ。不完全関数は本書で、既に級数展開を与えているので、誤差関数の級数展開を即座に得ることができる。結果を書くと、

$$\operatorname{erf} x = \frac{x}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k}}{k! (k+1/2)},$$
(8.5a)

erfc
$$x = \frac{e^{-x^2}}{\pi x} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Gamma(k+1/2)}{x^{2k}},$$
 (8.5b)

となる。ここで, $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ を用いた。前者の級数展開は x = 0 を中心にしたマクローリン級数であり,後者は漸近展開である。これは,前項で導出したマクローリン級数と漸近展開と一致する。

8.1.3 逆誤差関数

雑音解析などにおいて、検出率を特定の値に収めるためのしきい値設定が必要な場合がある。その場合、誤差関数を逆に解く、すなわち、誤差関数の逆関数を計算することによってしきい値を設定する。その問題の解法となる誤差関数の逆関数は逆誤差関数と呼ばれる。逆誤差関数を inverf x なる記号で記述すると、その逆関数は、

inverf
$$x = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(x + \frac{\pi}{12} x^3 + \frac{7\pi^2}{480} x^5 + \frac{127\pi^3}{40320} x^7 + \frac{4369\pi^4}{5806080} z^9 + \cdots \right),$$
 (8.6)

マクローリン級数で計算できる。

逆誤差関数のマクローリン級数を導出してみよう。まず, y = inverf x とおくと,

$$x = \text{erf } y = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-t^2} dt,$$

と書くことができる。この関係式から, x を y について微分すると,

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}e^{-y^2},$$

であることが容易にわかる。この数式の逆数をとると,

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}e^{y^2},$$

8.1. 誤差関数 207

である。逆誤差関数, すなわちyをマクローリン展開するには, y をx について微分した高次導関数が必要である。そのため, まず, x についての微分演算子を準備すると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y},$$

となる。これを利用して, 高次導関数をいくつか計算すると,

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}y^2} = \frac{\pi}{4} \cdot 2y \, e^{2y^2}, \qquad \qquad \frac{\mathrm{d}^3 y}{\mathrm{d}x^3} = \frac{\pi^{3/2}}{8} \left(2 + 8y^2\right) e^{3y^2},$$

$$\frac{\mathrm{d}^4 y}{\mathrm{d}x^4} = \frac{\pi^2}{16} \left(28y + 48y^3\right) e^{4y^2}, \qquad \frac{\mathrm{d}^5 y}{\mathrm{d}x^5} = \frac{\pi^{5/2}}{32} \left(28 + 368y^2 + 384y^4\right) e^{5y^2},$$

が得られる。これらの結果から, n 階の導関数が,

$$\frac{\mathrm{d}^{n} y}{\mathrm{d} x^{n}} = \frac{\pi^{n/2}}{2^{n}} e^{ny^{2}} \sum_{k=0}^{n-1} c_{nk} y^{k},$$

なる形で書けることは容易に予想できるだろう。この数式をもう一度xについて微分すると、

$$\frac{\mathrm{d}^{n+1}y}{\mathrm{d}x^{n+1}} = \frac{\pi^{(n+1)/2}}{2^{n+1}}e^{(n+1)y^2} \left\{ c_{n1} + \sum_{k=0}^{n-1} \left[(k+1)c_{n,k+1} + 2nc_{n,k-1} \right] y^k + 2nc_{n,n-1}y^n \right\},\,$$

が得られる。これは展開係数 c_{nk} に関する漸化式を与える。その漸化式は、具体的に書くと、

$$c_{n+1,0} = c_{n1}, \quad c_{n+1,k} = (k+1)c_{n,k+1} + 2nc_{n,k-1}, \quad c_{n+1,n} = 2nc_{n,n-1},$$

である。この漸化式を用いて導関数の展開係数 c_{nk} を計算すると、した表のようになる。この表の第n 行がn 階微分の展開係数をである。この表に示すように、n+k が偶数となる展開係数はゼロとなっている。

表 8.1: 逆誤差関数の展開係数計算 c_{nk} のための表

$n \setminus k$	0	1	2	3	4	5	6
1	1						
2	0	2					
3	2	0	8				
4	0	28	0	48			
5	28	0	368	0	384		
6	0	1016	0	5216	0	3840	
7	1016	0	27840	0	81792	0	46080

これでマクローリン展開ができる材料がそろったので、逆誤差関数のマクローリン展開 に移ろう。一般の関数 y(x) のマクローリン展開は、

$$y(x) = y(0) + y'(0) x + \frac{y''(0)}{2!} + \frac{y'''(0)}{3!} + \cdots,$$

と記述される。逆誤差関数の場合, x=0 に対応する関数値は y(0)=0 である。したがって, x=0 における逆誤差関数の n 階微分は,

$$\left. \frac{\mathrm{d}^n y}{\mathrm{d}x} \right|_{x=0} = \frac{\pi^{n/2}}{2^n} c_{n0},$$

となる。これをマクローリン級数の公式に代入すると、

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi^{n/2}}{n! \, 2^n} c_{n0} \, x^n,$$

が得られる。上で計算した展開係数 c_{n0} に代入すると, 逆誤差関数のマクローリン展開 (8.6) が導出される。

上に示した漸化式と表によってマクローリン展開の展開係数を計算できたのであるが,表 8.1 に示すように n+k が偶数であるとき $c_{n+k}=0$ となるので,表を小さくすることができる。ここで, $C_{nk}\equiv c_{n+k,n-k}$ のように係数を置き換えて表をつくると,表 8.2 が得られる。この表は配置が変わっただけで,記載される数値は表 8.1 と同一である。この表

表 8.2: 逆誤差関数の展開係数計算 C_{nk} のための表

$n \setminus k$	0	1	2	3	4
0	1				_
1	2	2			
2	8	28	28		
3	48	368	1016	1016	
4	384	5216	27840	69904	69904

の場合、マクローリン展開に使用する係数は対格成分 C_{nn} に現れる。しかも、その係数は 2n+1 次の係数である。つまり、この表で計算された係数を用いてマクローリン展開を記述すると、

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi^{n+1/2}}{(2n+1)! \, 2^{2n+1}} C_{nn} \, x^{2n+1},$$

と書くことができる。なお、表8.2を得るための漸化式は、

$$C_{n0} = 2nC_{n-1,0}, \quad C_{nk} = 2nC_{n-1,k} + (n-k+1)C_{n,k-1}, \quad C_{nn} = C_{n,n-1},$$

となる。さらに、この漸化式を、

$$\hat{C}_{n0} = n\hat{C}_{n-1,0}, \quad \hat{C}_{nk} = n\hat{C}_{n-1,k} + (n-k+1)\hat{C}_{n,k-1}, \quad \hat{C}_{nn} = \hat{C}_{n,n-1},$$

改めてみよう。ただし, $\hat{C}_{00}=C_{00}=1$ であるとする。漸化式をこのように書き換えると,表 8.3 のようになる。このように書き換えた係数との関係は $C_{nn}=2^n\hat{C}_{nn}$ となっている。

$n \setminus k$	0	1	2	3	4
0	1				
1	1	1			
2	2	7	7		
3	6	46	127	127	
4	24	326	1740	4369	4369

表 8.3: 逆誤差関数の展開係数計算 \hat{C}_{nk} のための表

前に記述した表 8.2 と比較すると、小さい値で記述できることがわかる。この事実は、計算機で展開係数を計算するうえでもオーバフローしにくいので、表 8.3 の方が係数決定に有利である。新たに置き換えた係数 \hat{C}_{nn} を用いてマクローリン級数を記述すると、

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi^{n+1/2}}{(2n+1)! \, 2^{n+1}} \hat{C}_{nn} \, x^{2n+1},$$

となる。

8.2 マーカムの Q 関数

実部と虚部がゼロ平均の正規分布にしたう複素雑音の振幅はレイリー分布にしたがう。その雑音に正弦波が重畳すると、振幅は仲上-ライス分布にしたがう。仲上-ライス分布の確率密度関数は第3.7.4項で導出したが、その累積確率はマーカムのQ関数と呼ばれる関数によって計算できる。マーカムのQ関数は1つの媒介変数と、2つの変数をもつ関数であり、

$$Q_n(a,b) \equiv \int_b^\infty \frac{x^n}{a^{n-1}} \exp\left(-\frac{x^2 + a^2}{2}\right) I_{n-1}(ax) \, dx, \tag{8.7}$$

によって定義される。

8.2.1 Q関数の計算

変形ベッセル関数の微分を伴う漸化式 (3.40) に注目すれば、マーカムの Q 関数を定義する積分を部分積分することができ、その結果として、

$$Q_n(a,b) = \left[-\frac{x^{n-1}}{a^{n-1}} \exp\left(-\frac{x^2 + a^2}{2}\right) I_{n-1}(ax) \right]_b^{\infty} + \int_b^{\infty} \frac{x^{n-1}}{a^{n-2}} \exp\left(-\frac{x^2 + a^2}{2}\right) I_{n-2}(ax) dx,$$

のように数式変形できる。第1項のブラケット内の関数は $x\to\infty$ の極限でゼロになる。 その事実は第1種の変形ベッセル関数の漸近展開 $I_n(z)\sim e^z\,(2\pi x)^{-1/2}$ であることに注意 すれば導くことができる。それを示してみると、

$$\lim_{x \to \infty} x^{n-1} \exp\left(-\frac{x^2 + a^2}{2}\right) I_{n-1}(ax)$$

$$= \lim_{x \to \infty} \frac{x^{n-1} e^{ax}}{\sqrt{2\pi x}} \exp\left(-\frac{x^2 + a^2}{2}\right)$$

$$= \lim_{x \to \infty} \frac{x^{n-1}}{\sqrt{2\pi x}} \exp\left(-\frac{(x - a)^2}{2}\right) = 0,$$

となる。右辺を得るには、指数関数 $e^{-(x-a)^2/2}$ がいかなるべき多項式よりも早くゼロに収束する事実を利用した。したがって、マーカムの Q 関数は、

$$Q_n(a,b) = \left(\frac{b}{a}\right)^{n-1} \exp\left(-\frac{x^2 + a^2}{2}\right) I_{n-1}(ax) + Q_{n-1}(a,b),$$

なる漸化式にしたがうことがわかる。この漸化式を繰り返すと、

$$Q_n(a,b) = \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{k=1-n}^{\infty} \left(\frac{a}{b}\right)^k I_k(ab),$$
 (8.8)

が得られる。なお、この公式を得るには、 $I_{-n}(x) = I_n(x)$ なる関係を用いた。変形ベッセル 関数による $Q_n(a,b)$ の展開が、変数 b について正の実数全体で収束することを示そう。そのために、

$$c_k^{(n)}(a,b) \equiv \exp\left(-\frac{a^2+b^2}{2}\right) \left(\frac{a}{b}\right)^k I_k(ab)$$

とおいてみよう。当然, $c_k^{(n)}(a,b)$ の無限級数が $Q_n(a,b)$ となることを期待している。ここで, 隣り合う項の比 $c_{k+1}^{(n)}(a,b)/c_k^{(n)}(a,b)$ を計算すると,

$$\frac{c_{k+1}^{(n)}(a,b)}{c_k^{(n)}(a,b)} = \frac{a}{b} \frac{I_{k+1}(ab)}{I_k(ab)},$$

が得られる。ここで、漸化式 $I_{k-1}(x) - I_{k+1}(x) = 2k I(x)/x$ を利用すると、

$$\frac{I_{k+1}(x)}{I_k(x)} = \frac{k}{x} \left(\sqrt{1 + \frac{x^2}{k^2}} - 1 \right),$$

が得られる 1 。この関係を利用し, $k \to \infty$ における $c_{k+1}^{(n)}(a,b)/c_k^{(n)}(a,b)$ の極値を計算すると,

$$\lim_{k \to \infty} \frac{c_{k+1}^{(n)}(a,b)}{c_k^{(n)}(a,b)} = \lim_{k \to \infty} \frac{a}{b} \frac{ab}{2k} = 0,$$

 $^{^1}$ 隣り合う項の比 $I_{k+1}(x)/I_k(x)$ が $k\to\infty$ で極値 r をもつと仮定すると, $I_{k-1}(x)/I_k(x)$ の極値は 1/r となるはずである。その仮定を利用して極値が導出できる。

が得られる。この結果は、いかなるbにおいても無限級数が収束することを意味している。つまり、この級数の収束半径は $|b| = \infty$ で表される。

級数が収束することがわかった。特別な関数値として, $Q_n(a,0)=1$, $Q_n(a,\infty)=0$ が 導出できる。それらのの関数値を導出してみよう。まず, $b\to 0$ として関数の極限を計算すると.

$$\lim_{b \to 0} Q_n(a, b) = \lim_{b \to 0} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \left[\sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{b}{a}\right)^k I_k(ab) + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{a}{b}\right)^k I_k(ab)\right]$$

$$= \lim_{b \to 0} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \left[\sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{b}{a}\right)^k \frac{a^k b^k}{2^k k!} + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{a}{b}\right)^k \frac{a^k b^k}{2^k k!}\right]$$

$$= \lim_{b \to \infty} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \left[\sum_{k=1}^{n-1} \frac{b^{2k}}{2^k k!} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^{2k}}{2^k k!}\right]$$

$$= \lim_{b \to \infty} e^{-b^2/2} = 1,$$

が得られる。この計算では、 $|x| \ll 1$ において $I_k(x) \simeq x^k/2^k k!$ なる近似が成立することを利用した。第 3 行目のブラケット内の第 1 項は $b \to 0$ で極致としてゼロになる。ブラケット内の第 2 項は $e^{a^2/2}$ のテイラー展開である。その結果、右辺を得ることができるのだ。したがって、 $Q_n(a,0)=1$ が導出できた。続いて $b\to\infty$ の極値を調べてみよう。極値として、 $I_k(x)\sim e^x (2\pi x)^{-1/2}$ であることに注意すると、

$$\lim_{b \to \infty} Q_n(a, b) = \lim_{b \to \infty} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \left[\sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{b}{a}\right)^k I_k(ab) + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{a}{b}\right)^k I_k(ab)\right]$$

$$= \lim_{b \to \infty} \frac{e^{ab}}{\sqrt{2\pi ab}} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \left[\sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{b}{a}\right)^k + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{a}{b}\right)^k\right]$$

$$= \lim_{b \to \infty} \frac{e^{-(a-b)^2/2}}{\sqrt{2\pi ab}} \left[\sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{b}{a}\right)^k + \frac{b}{b-a}\right] = 0,$$

が導かれる。第 2 行目のブラケット内の第 2 項は b/(b-a) のテイラー展開である。第 3 行目では, $e^{-(a-b)^2/2}$ にいかなるべき級数を乗じても $b\to\infty$ の極限でゼロになることを利用した。その結果, $Q_n(a,b)\to 0$ が導出できた。マーカムの Q 関数を第 2 変数 b を横軸としてグラフ表示すると図 8.3 に示す曲線を描く。次数 n と第 1 変数 a に関わらず, $Q_n(a,0)=1$ となり, $b\to\infty$ の極限で $Q_n(a,b)$ はゼロになる。

別の級数表現 マーカムの Q 関数の定義式を部分積分して得られる級数は 1 つだけではない。導出過程は上とほぼ同じなので省略するが、マーカムの Q 関数は、

$$Q_n(a,b) = 1 - \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{b}{a}\right)^k I_k(ab),$$
 (8.9)

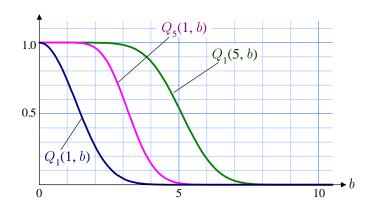


図 8.3: マーカムの Q 関数

のように書くこともできるのだ。実は、この級数もbについて収束半径が無限大となる。しかし、その条件が (8.8) とは違うのだ。級数 (8.8) の収束条件は $b^2/2k < 1$ であり、級数 (8.9) の収束条件は $a^2/2k < 1$ である。これを $k \to \infty$ としたとき、いかなるb に対しても収束条件を満たすのだ。しかし、収束条件を満たす最小のk が異なる。これらの収束条件から、a < b のとき (8.8) の方が都合がよく、そうでない場合は (8.9) が都合がよい。

8.2.2 数値計算

前項で導出した級数展開 (8.8), または, (8.9) によってマーカムの Q 関数が計算できる。しかし, その級数には変形ベッセル関数 $I_k(ab)$ が含まれ, 変形ベッセル関数も級数展開によって計算されるので, 前項で導出した級数展開は計算機のおける計算では二重級数となる。本項では, その二重級数をできるだけ少ない項数で計算する手法を考察する。

計算機での演算には級数 (8.9) が取り扱いやすい。級数に含まれる変形ベッセル関数を級数展開すると、

$$Q_n(a,b) = 1 - \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{b}{a}\right)^{k+n} I_{k+n}(ab)$$
$$= 1 - \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \left(\frac{b}{a}\right)^{k+n} \frac{(ab/2)^{k+2p+n}}{p! (k+p+n)!},$$

のように書くことができる。本書でしばしば用いた添え字の変換 $m \equiv k + p$ を利用する と、この数式は、

$$Q_n(a,b) = 1 - \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{b}{a}\right)^{k+n} \frac{(ab/2)^{2m-k+n}}{(m-k)! (m+n)!}$$
$$= 1 - \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} \frac{a^{2m-2k} b^{2m+2n}}{2^{m+n} 2^{m-k} (m-k)! (m+n)!}$$

$$=1-\exp\left(-\frac{a^2+b^2}{2}\right)\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\frac{a^{2k}\,b^{2m+2n}}{2^{m+n}\,2^{2k}\,k!\,(m+n)!},$$

のように変形できる。この数式をもう少し整理すると、

$$Q_n(a,b) = 1 - \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2}\right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(m+n)!} \left(\frac{b^2}{2}\right)^{m+n} \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!} \left(\frac{a^2}{2}\right)^k, \tag{8.10}$$

が得られる。得られた数式は, k についての総和に m が含まれていないので, k と m について総和が個別に計算できることを意味している。この数式も二重級数であることに変わりはないのであるが, この結果を計算機のプログラムとして書けば, (8.9) を計算するよりも演算量を小さくすることができる。

8.2.3 雑音に重畳する信号の検出確率

ゼロ平均の正規分布にしたがう複素雑音に正弦波が重畳したとき,ある観測値の絶対値に対する確率密度関数は,第3.7.4項で取り扱った仲上-ライス分布にしたがう。正弦波と雑音が重畳した観測値に対し,その絶対値があるしきい値を超える確率は仲上ライス分布の確率密度関数を積分した値となる。その積分は,マーカムのQ関数で与えられるのである。

実部と虚部が、それぞれ、ゼロ平均で標準偏差が σ の雑音の環境で、振幅Aの正弦波 $Ae^{i\omega_0t}$ が重畳したとき、観測される信号の絶対値がxとなる確率密度関数は、第3.7.4項で導出した関数:

$$p(x) = \frac{x}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{A^2 + x^2}{2\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{Ax}{\sigma^2}\right),\,$$

によって与えられる。電磁波を用いた通信が雑音から信号を抽出する処理によって実現されているので、仲上-ライス分布は通信工学で利用される。例えば、観測値がある振幅を超過したとき信号が存在すると判定し、超過しなければ無信号状態であると判定する場合を考えよう。視覚的には、図 8.4 に示す確率密度関数 (probability density function; PDF) を考えればよい。この図のうち、左側の関数が、信号が存在しない雑音の振幅の観測確率密度関数であり、その右側に最大値をもつ関数が雑音と信号が重畳したときの観測値に対する確率密度関数である。 信号が重畳したときの確率密度関数は、すでに述べたように仲上-ライス分布にしたがう。観測値が振幅xを超えたときに信号が検出されたとすると、信号の検出確率 (probability of detection) は、確率密度関数を $[x,\infty)$ で積分して得られる累積確率 (図中の $P_{\rm d}$) である。信号の検出確率 $P_{\rm d}$ を計算すると、

$$P_{d} = \int_{x}^{\infty} \frac{u}{\sigma^{2}} \exp\left(-\frac{A^{2} + u^{2}}{2\sigma^{2}}\right) I_{0}\left(\frac{Au}{\sigma^{2}}\right) du$$
$$= Q_{1}\left(\frac{A}{\sigma}, \frac{x}{\sigma}\right) = Q_{1}(\sqrt{2(S/N)}, x/\sigma),$$

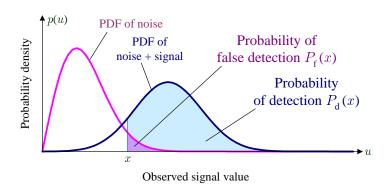


図 8.4: 観測値とその観測確率の密度

が得られる。ここで、記号 (S/N) は工学で頻繁に用いられる信号対雑音電力比 $(=A^2/2\sigma^2)$ である。一方、信号が存在しない場合でも、その判定処理によって信号が誤って検出されることがある。その誤りの確率、すなわち、誤検出確率 (probability of false detection) は、レイリー分布の確率密度関数を $[x,\infty)$ で積分して得られる累積確率 (図中の P_f) である。誤検出確率 P_f は、

$$P_{\rm f} = \int_x^\infty \frac{u}{\sigma^2} e^{-u^2/2\sigma^2} \, \mathrm{d}u = e^{-x^2/2\sigma^2},$$

となる。導出した数式を使って信号の振幅と検出確率の関係をグラフとして表現すると、図 8.5 に示す曲線を描く。この図において信号振幅を、雑音との電力比として横軸にとっている。 このグラフによると、誤検出確率検出が $P_{\rm f}=10^{-4}$ となるように検出のためのし

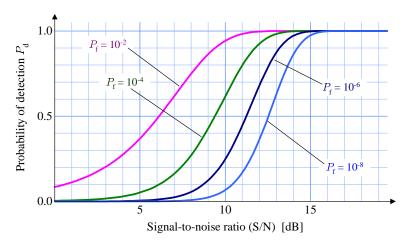


図 8.5: 信号の振幅と検出確率

きい値を選ぶと、信号対雑音電力比が $11.0~\mathrm{dB}$ のとき検出確率は 0.8 となる。さらに、誤検出確率検出が $P_\mathrm{f}=10^{-6}$ となるようにしきい値を選ぶと、信号対雑音電力比が $13.2~\mathrm{dB}$ のとき検出確率は 0.9 となる。信号レベル (信号対雑音電力比) が一定の条件で、検出確率を大きくするようにしきい値を設定すると、誤検出確率も大きくなることがこのグラフから読み取れる。

8.3 フレネル積分

球ベッセル関数に関する興味深い性質として,フレネル積分が球ベッセル関数の級数で表現できることを紹介しよう。フレネル積分は、回折理論に現れる積分あり、

$$x(t) = \int_0^t \cos v^2 \, dv, \qquad y(t) = \int_0^t \sin v^2 \, dv,$$
 (8.11)

のように定義される。前者はフレネル余弦積分,後者はフレネル正弦積分と呼ばれる。フレネル積分は、図 8.6 に示す曲線を描く。被積分関数が偶関数であるので、余弦積分と正弦積分はともに奇関数である。双方の関数は、図に示したように振動しながら |t| の増加とともに収束する。フレネル積分は、負の無限遠において $-\sqrt{\pi/8}$ に収束する。なお、この積分の応用例を本項の後半で紹介する。

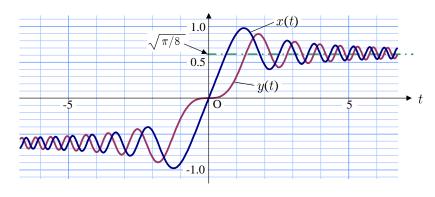


図 8.6: フレネル積分

8.3.1 球ベッセル関数との関係

上で述べたように、フレネル積分は球ベッセル関数の級数で表現することができる。実際のその級数を書いてみると、

$$x(t) = \frac{1}{2} \int_0^{t^2} j_{-1}(u) u^{1/2} du = t \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n}(t^2),$$
 (8.12a)

$$y(t) = \frac{1}{2} \int_0^{t^2} j_0(u) u^{1/2} du = t \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n+1}(t^2),$$
 (8.12b)

となる。フレネル積分が球ベッセル関数の級数で表現できることは, 前項で導出した漸化式を用いて証明できる。

フレネル積分のうち、フレネル余弦積分についての等式が成立することを証明しよう。 証明するには、まず、フレネル余弦積分 (8.11) の積分変数を $u \equiv v^2$ のように置き換え、

$$x(t) = \frac{1}{2} \int_0^{t^2} \frac{\cos u}{\sqrt{u}} du = \frac{1}{2} \int_0^{t^2} j_{-1}(u) u^{1/2} du,$$

のように書き換えられる。この数式の被積分関数は、実は、

$$\frac{1}{2}j'_{-1}(u)u^{1/2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \left(u^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n}(u) \right), \tag{8.13}$$

なる関係があるので、これを被積分関数して積分を実行すると、

$$x(t) = \int_0^{t^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \left(u^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n}(u) \right) \mathrm{d}u = \left[u^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n}(u) \right]_0^{t^2},$$

のように計算され、その結果として級数表現 (8.12a) が導出される。証明を完了するには、 等式 (8.13) が成立することを示さなければならない。等式の右辺から出発して数式変形を すると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(x^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n}(x) \right) = \frac{x^{-1/2}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} j_{2n}(x) + x^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} j'_{2n}(x)$$

$$= x^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{j_{2n}(x)}{2x} + j'_{2n}(x) \right)$$

$$= x^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{j_{2n}(x)}{2x} + j_{2n-1}(x) - \frac{2n+1}{x} j_{2n}(x) \right)$$

$$= x^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(j_{2n-1}(x) - \frac{4n+1}{2x} j_{2n}(x) \right)$$

$$= x^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left[j_{2n-1}(x) + \frac{1}{2} \left(j_{2n+1}(x) + j_{2n-1}(x) \right) \right]$$

$$= \frac{x^{1/2}}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(j_{2n-1}(x) - j_{2n+1}(x) \right) = \frac{x^{1/2}}{2} j_{-1}(x),$$

のように計算できる。第 3 行目への数式変形には、漸化式 (3.68c) を利用した。第 4 行目で $j_{2n}(x)$ の項を整理し、第 5 行目への数式変形では漸化式 (3.68a) を利用した。第 6 行目で再び項を整理し、その総和が畳み込み級数 2 になっていることに気づけば右辺が得られる。よって、等式 (8.12a) は成立する。フレネル正弦積分 (8.12b) についても同様に証明できる。¶

球ベッセルの級数 (8.12a) と (8.12a) が収束するかを疑問に思う読者もいるだろう。その級数の収束半径は無限大である。それは隣り合う項の比を評価すれば正当性を示すことができる。フレネル余弦積分の場合,隣り合う項の比は $j_{2n+2}(t^2)/j_{2n}(t^2)$ である。ベッセル関数の級数表現 (3.7) に注意して,その比を評価すると,

$$\left| \frac{j_{2n+2}(t^2)}{j_{2n}(t^2)} \right| = \left| \frac{J_{2n+5/2}(t^2)}{j_{2n+1/2}(t^2)} \right| < \frac{(t^2/2)^2}{(2n+3/2)(2n+5/2)} < \frac{t^4}{16n^2}, \tag{8.14}$$

 $^{^2}$ 英語では telescoping sum と呼ばれ、「畳み込み」という日本語のわりに convolution (畳み込み演算) とは無関係である。畳み込み級数とは、 $(1-1/2)+(1/2-1/3)+(1/3+1/4)+\cdots=1$ のように、隣り合う項が打ち消しあい、結局、両端の数字しか残らない級数である。

となる。つまり, n>t/4 であればこの比は 1 より小さくなる。ダランベールの収束判定によると, $n\to\infty$ の極限の意味で隣り合う項の比が 1 より小さければ, その級数は絶対収束する。したがって, いかなる t に対して級数 (8.12a) は収束する。また, 同様の理由で級数 (8.12b) も絶対収束する。

8.3.2 フレネル積分の数値計算

フレネル積分は、上に述べたように球ベッセル関数の級数で計算できるのだが、球ベッセル関数自体が級数で計算されるので、その方法では演算量に難がある。そのため、実際の数値計算では別の方法を用いる。ここでは、フレネル積分のべき級数と漸近展開を紹介する。

フレネル積分のべき級数は (8.11) において, 三角関数をマクローリン展開した級数を積分することによって導出できる。その結果は,

$$x(t) = \int_0^t \cos u^2 \, du = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n t^{4n+1}}{(4n+1)(2n)!},$$
(8.15)

$$y(t) = \int_0^t \sin u^2 \, du = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n t^{4n+3}}{(4n+3)(2n+1)!},$$
(8.16)

となる。この級数の収束半径は無限大である。数学的にはいかなるtに対しても級数は収束するのだが、計算機には有効桁があるので、極度に大きなtについては収束性を保証できない。その場合には、次に示す漸近展開を使用する。その漸近展開によると、

$$P(t) = \frac{1}{2t} - \frac{1 \cdot 3}{2^2} \frac{1}{2t^5} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{2^3} \frac{1}{2t^9} - \dots$$
 (8.17a)

$$Q(t) = \frac{1}{2} \frac{1}{2t^3} - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2^3} \frac{1}{2t^7} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 9}{2^5} \frac{1}{2t^{11}} - \dots$$
 (8.17b)

なる P(t) と Q(t) を定義したとき,

$$x(t) = \sqrt{\frac{\pi}{8}} + P(t) \sin t^2 - Q(t) \cos t^2, \tag{8.18a}$$

$$y(t) = \sqrt{\frac{\pi}{8}} - P(t) \cos t^2 - Q(t) \sin t^2, \tag{8.18b}$$

によってフレネル積分が計算できる。この漸近展開は、被積分関数 $\cos v^2$ と $\sin v^2$ を区間 $[0,\infty)$ で積分した結果が $\sqrt{\pi/8}$ であることと、その被積分関数の区間 $[t,\infty)$ における積分 に部分積分を適用することによって導出される。

フレネル積分の積分範囲を $[0,\infty)$ としたとき、その積分が $\sqrt{\pi/8}$ となることを示そう。 その証明にあたって、被積分関数を e^{iv^2} とすると都合がよい。そうすると、オイラーの関 係式によって,

$$\int_0^\infty e^{iv^2} \, \mathrm{d}v = x(\infty) + iy(\infty),$$

のように、正弦積分と余弦積分が評価できる。さらに、積分を評価するには図 8.7 に示す積分路を設定するとよい。積分路は、実軸上を原点から R までたどる経路 C_0 、複素平面上を半径 R の円弧に沿って $Re^{\pi i/4}$ までたどる経路 C_R 、複素平面上を $Re^{\pi i/4}$ から原点までの直線をたどる経路 $C_{\pi/4}$ によって構成される。 被積分関数 e^{iv^2} が正則であるので積分路を周

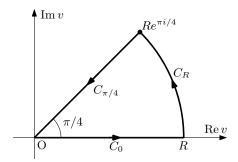


図 8.7: 被積分関数 e^{iv^2} の積分路

回した積分結果はゼロになる。また、経路 C_R に沿った積分は $R \to \infty$ の極限の極限でゼロになる。それを示すには、積分変数を $v \equiv Re^{i\theta}$ で置き換えればよい。すると、

$$\left| \int_{C_R} e^{iv^2} \, dv \right| = \left| iR \int_0^{\pi/4} e^{iR^2 e^{2i\theta}} e^{i\theta} \, d\theta \right| = \left| iR \int_0^{\pi/4} e^{iR^2 \cos 2\theta - R^2 \sin 2\theta} e^{i\theta} \, d\theta \right|$$

$$\leq R \int_0^{\pi/4} e^{-R^2 \sin 2\theta} d\theta < R \int_0^{\pi/4} e^{-4R^2 \theta/\pi} d\theta = \frac{\pi}{4R} \left(e^{-R^2} - 1 \right),$$

となるので、確かに、 $R\to\infty$ の極限で C_R に沿った積分はゼロになる。なお、第 2 行目の不等式の変形には、 $0\le\theta\le\pi/4$ で $\sin 2\theta\ge 4\theta/\pi$ が成立することを利用した。次に、経路 $C_{\pi/4}$ における積分を評価しよう。その場合、 $v\equiv r\,(1+i)/\sqrt{2}$ のように置き換える。その置き換えによって、

$$\lim_{R \to \infty} \int_{C_{\pi/4}} e^{iv^2} \, \mathrm{d}v = \lim_{R \to \infty} \frac{1+i}{\sqrt{2}} \int_{R}^{0} e^{-r^2} \, \mathrm{d}r = -\sqrt{\frac{\pi}{8}} \, (1+i),$$

が得られる。被積分関数 e^{iv^2} を経路 $C_0 + C_R + C_{\pi/4}$ に沿って周回積分した結果がゼロとなるので、

$$\int_0^\infty e^{iv^2} dv = \lim_{R \to \infty} \int_{C_0} e^{iv^2} dv = \sqrt{\frac{\pi}{8}} (1+i),$$

が得られる。したがって,

$$x(\infty) = y(\infty) = \sqrt{\frac{\pi}{8}},$$

が導かれた。次に、漸近展開を求めるためのステップとして、

$$\xi_n(t) = \int_t^\infty \frac{\cos v^2}{v^n} dt, \qquad \eta_n(t) = \int_t^\infty \frac{\sin v^2}{v^n} dt,$$

を部分積分によって評価しよう。これらの積分について,部分積分を1回だけ適用すると,

$$\xi_n(t) = \left[\frac{\sin v^2}{2v^{n+1}}\right]_t^{\infty} + \frac{n+1}{2} \int_t^{\infty} \frac{\sin v^2}{x^{n+2}} dt = -\frac{\sin t^2}{2t^{n+1}} + \frac{n+1}{2} \eta_{n+2}(t), \quad (8.19a)$$

$$\eta_n(t) = -\left[\frac{\cos v^2}{2v^{n+1}}\right]_t^{\infty} - \frac{n+1}{2} \int_t^{\infty} \frac{\cos v^2}{x^{n+2}} dt = \frac{\cos t^2}{2t^{n+1}} - \frac{n+1}{2} \xi_{n+2}(t), \quad (8.19b)$$

が得られる。この結果を繰り返し適用することによって、

$$\int_{t}^{\infty} \cos v^{2} dv = \xi_{0}(t) = -P(t) \sin t^{2} + Q(t) \sin t^{2},$$

$$\int_{t}^{\infty} \sin v^{2} dv = \eta_{0}(t) = P(t) \cos t^{2} + Q(t) \cos t^{2},$$

が導かれる。なお、P(t) と Q(t) は (8.17a) と (8.17b) で定義された級数である。ここで、 $x(t)=x(\infty)-\xi(t),\,y(t)=y(\infty)-\eta(t)$ に注意すればフレネル積分の漸近展開が得られる。

8.3.3 スリットを通過する光の回折

フレネル積分の応用例としてスリットを通過する光の回折を取り扱おう。壁に幅Dのスリットが設けられ,壁に対して垂直に照射された光がスリットを通過する場合を考えよう。壁から距離Lを隔てた位置にスクリーンが設置され,そのスクリーン上の光の波動関数を算出する。スリット内の位置を座標uによって表し,スクリーン上の位置を座標aによって表すことにする。これらの座標は図8.8のように設定されている。

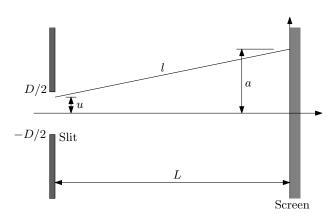


図 8.8: スリットとスクリーンの位置関係

図の左から到達した光は、スリット上ですべての位置で同一位相である。スリットの開口から光は回折し、スクリーン上の点aに到達する。つまり、aにおける光の波動関数は、開口部の座標uを通過する光の積分である。開口部の点uとスクリーン上の点aの距離は、

$$l = \sqrt{L^2 + (a-u)^2} \simeq L + \frac{(a-u)^2}{2L},$$

である。光の波数を k とすると、距離 l を隔ててた 2 点間で光の位相は kl だけ異なる。開口部での位相を ϕ とすると、スクリーン上での位相は $\phi-kl$ である。よって、スクリーン上の点 x での波動関数は、

$$E(a) = E_0 \int_{-D/2}^{D/2} \exp i \left[\phi - k \left(L + \frac{(a-u)^2}{2L} \right) \right] du$$
$$= E_0 e^{i(\phi - kL)} \int_{-D/2}^{D/2} \exp i \left[-\frac{ik (a-u)^2}{2L} \right] du,$$

によって計算できる。なお, E_0 は適当に設定した振幅である。ここで, $\xi^2 \equiv k (a-u)^2/2L$ なる置き換えをすると, 波動関数は,

$$E(a) = \sqrt{\frac{2L}{k}} e^{i(\phi - kL)} \int_{\xi_0}^{\xi_1} e^{-i\xi^2} d\xi$$
$$= \sqrt{\frac{2L}{k}} e^{i(\phi - kL)} \int_{\xi_0}^{\xi_1} (\cos \xi^2 - i \sin \xi^2) d\xi,$$

のように書くことができる。ここで、積分範囲の境界 ξ_0 と ξ_1 は、

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{k}{2L}} \left(a + \frac{D}{2} \right), \qquad \xi_1 = \sqrt{\frac{k}{2L}} \left(a - \frac{D}{2} \right),$$

である。積分範囲の境界 ξ_0 と ξ_1 をそのまま使用して波動関数を記述すると、

$$E(a) = \sqrt{\frac{2L}{k}} e^{i(\phi - kL)} \left[x(\xi_1) - x(\xi_0) + i \left(y(\xi_0) - y(\xi_1) \right) \right], \tag{8.20}$$

となる。この計算結果から具体的な光 (電磁波) の回折を計算すると図 8.9 が得られる。この図は、薄い壁に幅 1 mm のスリットを開け、その 100 mm 奥にスクリーンを設けたときの電磁波の強度分布を表している。電磁波はスリットを開けた壁に垂直に照射される。その電磁波は、波長 $0.1 \, \mu\text{m}$ から $30 \, \mu\text{m}$ の範囲で変化させたときの強度分布を描いている。波長が短いときはスリットの開口部に大部分の電磁波が集中するが、波長が長くなると強度分布が波打ち、さらに長くなると、電磁波は開口部より外側へ分散することがわかる。

8.3.4 アンテナの放射パターン

直線状に配列した多数の放射源で構成されたアンテナから放射される電磁波の強度分布を取り扱おう。観測される電磁波は,直線状に並ぶ放射源からの寄与を積分した結果であるので,計算方法はスリットによる光の回折と同様である。とはいえ,前項で用いた数式をそのまま用いることはできないので,本項では修正を加えて電磁界を計算する。

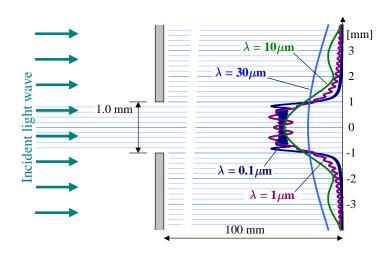


図 8.9: スリットを通過する光の強度分布

前項での定式化は、光の回折を前提にし、スリットの前方の狭い角度範囲しか取り扱わなかった。具体的に述べると、スリットからスクリーンまでの距離 L とスクリーン上の座標 a について、 $a \ll L$ であることを前提にしていたのだ。光よりも波長が長い電波における問題、しかも、アンテナの放射パターンを取り扱う問題で $a \ll L$ を前提条件にするのは適切でない。

アンテナの放射パターンを取り扱うことを前提に、図 8.10 に示すアンテナと観測点の位置関係を考えよう。アンテナは長さがDであり、中央が原点に位置するようにしてa軸上に配置されている。アンテナから見た奥行き方向をz軸に設定し、観測点Pがz軸と θ をなす方向に、原点からRの距離に位置する。この設定のもと、アンテナ上の座標uに位置

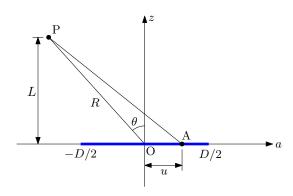


図 8.10: 直線アンテナと観測点の関係

する点Aから点Pまでの距離は、三角形OAPにおける余弦定理によると、

$$\overline{AP} = \sqrt{R^2 + u^2 + 2xR\sin\theta},$$

となる。ここで、二項定理を用いて AP を展開すると、

$$\overline{AP} \simeq R + u \sin \theta + \frac{x^2}{2R} \cos^2 \theta + \frac{x^3}{2R^2} \sin \theta \cos^2 \theta + \cdots$$

が得られる。ここで、アンテナから放射される信号の位相が、放射源の位置uによって異なると仮定しよう。原点から放射される信号の位相が ϕ のとき、放射源 A から放射される信号の位相が $\phi+ku\sin\varphi$ であると仮定する。ここで、k は電磁波の波数であり、 φ は任意の定数である。このとき、放射源 A から放射され、観測点 P で観測される電磁波の位相は、距離 \overline{AP} の距離に相当する遅れが観測されるはずだ。つまり、放射源 A から放射され、観測点 P で観測される電磁波の波動関数は、

$$E_0 \exp i \left(\phi + ku \sin \varphi - kR - ku \sin \theta - \frac{ku^2}{2R} \cos^2 \theta - \frac{u^3}{2R^2} \sin \theta \cos^2 \theta - \cdots \right),$$

となるだろう。この波動関数を,積分変数uを区間 [-D/2,D/2] にわたって積分すれば,観測点Pにおける電磁波の波動関数が計算できる。ところが,フレネル積分で取り扱うことができるのは,位相が積分変数の2次関数で表される範囲までである。そのため,uの3次以降の項は無視できるくらい小さいことを前提条件とする。その前提条件の意味は後に考察する。つまり,直線状のアンテナが放射した電磁波を観測点Pで観測すると,

$$f(R,\theta) = E_0 \int_{-D/2}^{D/2} \exp i \left(\phi - kR - ku(\sin \theta - \sin \varphi) - \frac{ku^2}{2R} \cos^2 \theta \right) du, \tag{8.21}$$

となるわけだ。数式を変形していくと.

$$f(R,\theta) = E_0 e^{i(\phi - kR)} \int_{-D/2}^{D/2} \exp i \left[-\frac{k \cos^2 \theta}{2R} \left(u^2 + 2Ru \frac{\sin \theta - \sin \varphi}{\cos^2 \theta} \right) \right] du$$
$$= \hat{E}_0 \int_{-D/2}^{D/2} \exp i \left[-\frac{k \cos^2 \theta}{2R} \left(u + \frac{R \left(\sin \theta - \sin \varphi \right)}{\cos^2 \theta} \right)^2 \right] du,$$

が得られる。ここで.

$$\hat{E}_0 = E_0 \exp i \left[\phi - kR \left(1 - \frac{(\sin \theta - \sin \varphi)^2}{2\cos^2 \theta} \right) \right],$$

とおいた。指数関数の指数が準虚数であるので, $|\hat{E}_0| = |E_0|$ が成立する。ここで,

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{k}{2R}} \cos \theta \left(u + \frac{R \left(\sin \theta - \sin \varphi \right)}{\cos^2 \theta} \right),$$

なる置き換えを適用すると、上記積分は、

$$f(R,\theta) = \sqrt{\frac{2R}{k}} \frac{\hat{E}_0}{\cos \theta} \int_{\xi_0}^{\xi_1} (\cos \xi^2 - i \sin \xi^2) \,d\xi, \tag{8.22}$$

のように書き換えられる。ここで、記号 ξ_0 と ξ_1 は、それぞれ、

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{k}{2R}} \cos \theta \left(\frac{R \left(\sin \theta - \sin \varphi \right)}{\cos^2 \theta} - \frac{D}{2} \right),\,$$

$$\xi_1 = \sqrt{\frac{k}{2R}} \cos \theta \left(\frac{R(\sin \theta - \sin \varphi)}{\cos^2 \theta} + \frac{D}{2} \right),$$

である。積分(8.22)に対してフレネル積分を実行すると、

$$f(R,\theta) = \sqrt{\frac{2R}{k}} \frac{\hat{E}_0}{\cos \theta} \left[x(\xi_1) - x(\xi_0) - i \left(y(\xi_1) - y(\xi_0) \right) \right], \tag{8.23}$$

が得られる。この数式によって, 直線上に配列された複数の放射源によって構成されたアンテナから放射される電磁波の波動関数が計算できるのだ。

波長 $3.75\,\mathrm{mm}$ で,アンテナの長さ $45\,\mathrm{mm}$ としたときの例を図 8.11 に示す。この例では,放射される電磁波の位相が,放射源の場所によって異なる。放射源の位置 x に対して,位相が $\phi + ku\sin\varphi$ となるように設定されていると仮定し, $\varphi = 10^\circ$ なる条件で図 $8.11\,\mathrm{が計算されている}$ 。この図は,近距離から遠距離を見わたせるように,z 軸の値を対数スケールで並べている。そのとき,原点から見た方角 θ が一定のもとで一直線に並ぶように a 軸方向の縮尺を適切に調整している。 本項の最後で説明するように,導出した数式で有効に

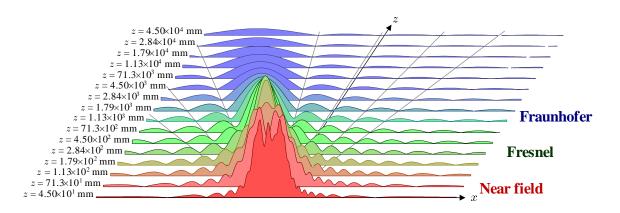


図 8.11: アンテナの放射パターン ($\lambda = 3.75 \, \text{mm}, D = 45 \, \text{mm}, \varphi = 10^{\circ}$)

計算できるのは $R>100\,\mathrm{mm}$ の場合である。その距離の近辺では放射強度の山が $1\,\mathrm{mm}$ に集結していることがわかる。しかし, $100\,\mathrm{mm}$ 程度の距離ではその周辺の強度が距離によって変動している。距離が $1000\,\mathrm{mm}$ 程度になると,放射強度が放射状に一定のパターンを描くようになる。その距離を超えると,放射される電磁波は平面波とみなすことができるのだ。放射状に描かれる放射パターンは,z 軸から 10° の方向に最大強度の山が存在する。その最大強度の方角は,パラメータ φ によって与えられる。

本項の計算が近似計算であることを振り返ろう。その近似計算として、位相に現れるuの 3 次以降の項が無視できるくらい小さいことを仮定した。慣習として、無視できるくらい小さいとは $\lambda/16$ より小さいという条件を用いる。つまり、これまでの定式化は、

$$\frac{u^3}{2R^2}\sin\theta\cos^2\theta<\frac{\lambda}{16},$$

が成立する条件を前提としていたわけだ。座標uがアンテナ内部の座標であることから、

 $|u| \le D/2$ である。 さらに, $|\sin\theta\cos^2\theta| < 2/3\sqrt{3}$ である事実に注意すると,

$$R > \sqrt{\frac{2D^3}{3\sqrt{3}\lambda}} \simeq 0.620\sqrt{\frac{D^3}{\lambda}},$$

なる条件が導かれる。この不等式は、本項の計算が有効である条件を表している。上の計算で用いた波長と開口の条件では、 $R>100\,\mathrm{mm}$ で本項の計算が有効ということだ。本項の計算が有効な電磁波の回折は、フレネル回折と呼ばれる。

観測点がさらに遠くなると、信号位相についてuの2次の項でさえ無視できるようになる。そのような遠方では、

$$\frac{u^2}{2R}\cos^2\theta < \frac{\lambda}{16},$$

が成立するのだ。この不等式を満足する Rを求めると、

$$R > \frac{2D^2}{\lambda},$$

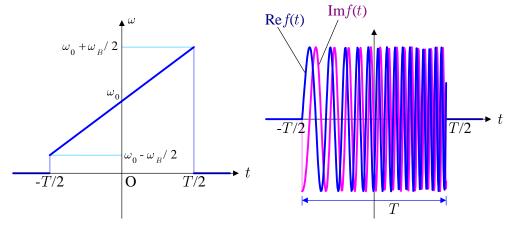
となる。この条件を満たす場合,アンテナ上のuから放射される電磁波は,位相が $\phi-kR-ku(\sin\theta-\sin\varphi)$ となるので,平面波とみなすることができる。その条件における電磁波の回折はフラウンホーファー回折と呼ばれる。もしくは,遠方界と呼ばれる。上の計算で用いた条件設定では, $R>1157\,\mathrm{mm}$ がその境界である。電磁波が遠方界となる距離はフラウンホーファー領域と呼ばれる。逆に,フレネル領域よりアンテナの近傍,すなわち, $R<0.62\sqrt{D^3/\lambda}$ の領域は近傍界領域と呼ばれる。言い換えると,フレネル領域は近傍界領域と遠方界領域の間に存在する遷移領域である。

8.3.5 線形周波数変調信号のスペクトル

フレネル積分の第2の応用例として、線形周波数変調信号のスペクトルを計算してみよう。線形周波数変調信号とは、図8.12 (a) に示すように、時間の経過とともに周波数が1次関数で変化するように周波数変調された信号である。その信号波形は、図8.12 (b) に示すような曲線を描く。この図は、複素信号として実部と虚部を描いている。信号が正の周波数で振動しているならば、実部は虚部より 90° だけ位相が進んでいる。線形周波数変調信号は、時間の関数として書くと、

$$f(t) = \exp i \left(\omega_0 t + \frac{\zeta}{2} t^2\right) \qquad (-T/2 \le t \le T/2),$$

のようになる。なお、信号は信号は $-T/2 \le t \le T/2$ の期間だけ送信されるとした。信号の角周波数はt=0のとき ω_0 であり、送信機関の間に $\omega_0-\omega_B/2$ から $\omega_0+\omega_B/2$ の間を遷移すると仮定した。すなわち、中心角周波数は ω_0 であり、角周波数の変位幅は ω_B である。



- (a) Frequency change versus time.
- (b) Waveform of linear frequency modulation.

図 8.12: 線形周波数変調信号の例

さらに、上の数式では、 $\zeta \equiv \omega_B/T$ で定義される変調速度を用いた。この信号の角周波数は位相を t で微分すれば得られ、 $\omega(t) = \zeta t$ である。確かに、時間の経過とともに周波数が 1 次関数で変化し、図 8.12 (a) と合致する。線形周波数変調信号の周波数成分 (スペクトル) をフーリエ変換:

$$F(\omega) = \int_{-T/2}^{T/2} f(t) e^{-i\omega t} dt,$$

によって調べてみよう。信号の波動関数 $f(t) = e^{i(\omega_0 t + \zeta t^2/2)}$ を代入して計算すると,

$$F(\omega) = \int_{-T/2}^{T/2} \exp i \left(\frac{\zeta}{2} t^2 - (\omega - \omega_0) t \right) dt$$

$$= \int_{-T/2}^{T/2} \exp \frac{i\zeta}{2} \left(t - \frac{\omega - \omega_0}{\zeta} \right)^2 \cdot e^{-i(\omega - \omega_0)^2/2\zeta} dt$$

$$= \sqrt{\frac{2T}{\omega_B}} e^{-i(\omega - \omega_0)^2 T/2\omega_B} \left\{ x(\tau_0) - x(\tau_1) + i \left[y(\tau_0) - y(\tau_1) \right] \right\}, \tag{8.24}$$

が得られる。いうまでもなく, $x(\tau)$ と $y(\tau)$ は, ともに, フレネル積分である。フレネル積分の計算に用いる変数 τ_0 と τ_1 は,

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left(\omega - \omega_0 + \frac{\omega_B}{2} \right), \qquad \tau_1 = \sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left(\omega - \omega_0 - \frac{\omega_B}{2} \right),$$

である。フーリエ変換で計算されるスペクトル (8.24) は、周波数スペクトルは角周波数の区間 $[\omega_0 - \omega_B/2, \omega_0 + \omega_B/2]$ にわたって分散し、その振幅は $\sqrt{2\pi T/\omega_B}$ となる。このスペクトルの振幅は、次のように推察することができる。フレネル積分 $x(\tau)$ と $y(\tau)$ はともに、 $\tau \to \pm \infty$ の極限で $\pm \sqrt{\pi/8}$ で近似できる (複合同順)。この事実から、(8.24) に含まれる $x(\tau_0) - x(\tau_1)$ と $y(\tau_0) - y(\tau_1)$ はともに、最大値が $\sqrt{\pi/2}$ 程度の値となる。この事実に注目

すると, (8.24) のブレース $(\{\})$ の中の値は, 絶対値にして $\sqrt{\pi}$ 程度の値になる。フーリエ変換 $F(\omega)$ の絶対値は, その $\sqrt{2T/\omega_B}$ であるので, $\sqrt{2\pi T/\omega_B}$ となるのだ。

数式 (8.24) で計算されるスペクトルは、図 8.13 に示す曲線を描く。この曲線は大雑把 にモデル化すると、同図に重ねて描いた台形で表すことができる。台形の下底の長さは、 $\omega_B + 2\sqrt{\pi\omega_B/T}$ である。それに対し、上底の長さは $\omega_B - 2\sqrt{\pi\omega_B/T}$ である。 図を見ても

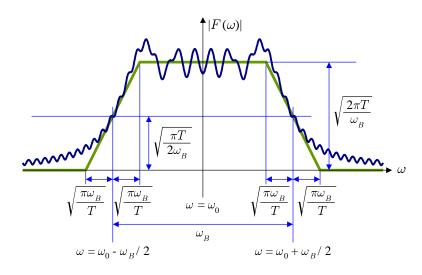


図 8.13: 線形周波数変調信号のスペクトル

明らかなように、スペクトルの最大値の半分の値をとる幅、すなわち、半値幅は角周波数の 遷移幅 ω_B と等しい。台形でモデル化したスペクトルの立ち上がりから測った角周波数の 帯域幅は、モデルとなる台形の下底の長さ:

$$\hat{\omega}_B = \omega_B + 2\sqrt{\frac{\pi\omega_B}{T}},$$

である。この値は、スペクトルの絶対値 $|F(\omega)|$ を ω について微分し、 $\omega = \omega_0 - \omega_B/2$ におけるスペクトルの傾きを評価することによって導出できる。

スペクトルの絶対値の導関数を調べ,スペクトルを台形モデルで描いてみよう。スペクトルの絶対値を簡潔に記述するため,

$$X(\omega) = x \left(\sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left(\omega - \omega_0 + \frac{\omega_B}{2} \right) \right) - x \left(\sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left(\omega - \omega_0 - \frac{\omega_B}{2} \right) \right),$$

$$Y(\omega) = y \left(\sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left(\omega - \omega_0 + \frac{\omega_B}{2} \right) \right) - y \left(\sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left(\omega - \omega_0 - \frac{\omega_B}{2} \right) \right),$$

を定義する。前にも補足したように, $x(\tau)$ と $y(\tau)$ はフレネル積分である。新たに定義した関数 $X(\omega)$ と $Y(\omega)$ を用いると, スペクトルの振幅 $|F(\omega)|$ は,

$$|F(\omega)| = \sqrt{\frac{2T}{\omega_B} \left\{ [X(\omega)]^2 + [Y(\omega)]^2 \right\}},$$

のように記述できる。この記法を用いると、絶対値 $|F(\omega)|$ の導関数は、

$$\frac{\mathrm{d}|F|}{\mathrm{d}\omega} = \sqrt{\frac{2T}{\omega_B}} \frac{XX' + YY'}{\sqrt{X^2 + Y^2}},\tag{8.25}$$

によって計算することができる。ここで、右肩に付したプライム (') は ω についての導関数を与える。フレネル積分の定義によると、 導関数 X' と Y' は、

$$X'(\omega) = \sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left[\cos \frac{T}{2\omega_B} \left(\omega - \omega_0 + \frac{\omega_B}{2} \right)^2 - \cos \frac{T}{2\omega_B} \left(\omega - \omega_0 - \frac{\omega_B}{2} \right)^2 \right],$$

$$Y'(\omega) = \sqrt{\frac{T}{2\omega_B}} \left[\sin \frac{T}{2\omega_B} \left(\omega - \omega_0 + \frac{\omega_B}{2} \right)^2 - \sin \frac{T}{2\omega_B} \left(\omega - \omega_0 - \frac{\omega_B}{2} \right)^2 \right],$$

となる。得られた導関数 (8.25) は,図 8.14 に示すように厄介な曲線を描く。図に示したように,導関数は大きくうねっているので安定した接線を特定できないのだ。方針として,

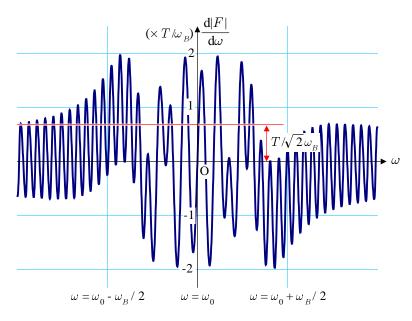


図 8.14: 線形周波数変調信号のスペクトルの導関数

 $\omega = \omega_0 - \omega_B/2$ における平均的な導関数を求め、台形の立ち上がり部の傾きを特定する。まず、導関数 (8.25) に $\omega = -\omega_B/2$ を代入すると、

$$\frac{\mathrm{d}|F|}{\mathrm{d}\omega}\bigg|_{\omega = \omega_B - \omega_B/2} = \frac{T}{\sqrt{2}\,\omega_B} \left(1 - \cos\frac{(\omega_0 - \omega_B)^2 T}{2\omega_B} - \sin\frac{(\omega_0 - \omega_B)^2 T}{2\omega_B} \right),\tag{8.26}$$

が得られる。この計算において, $X(\omega_0-\omega_B/2)\simeq Y(\omega_0-\omega_B/2)\simeq \sqrt{\pi/8}$ とした。得られた結果において, 上に述べた導関数のうねりは右辺に含まれる三角関数によってもたらされる。その考察から, 平均的な導関数は三角関数を取り除いた値, すなわち,

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}|F|}{\mathrm{d}\omega} \right\rangle_{\omega=\omega_0-\omega_B/2} = \frac{T}{\sqrt{2}\,\omega_B},$$

によって与えられると考えてよいだろう。なお、左辺がブラケット ($\langle \ \rangle$) で囲まれているのは、傾きの期待値の意味を表現するためである。線形周波数変調信号のスペクトルの立ち上がりが、この傾きを保持して立ち上がると考えよう。スペクトルの高さが $\sqrt{2\pi T/\omega_B}$ であるので、スペクトル立ち上がりの角周波数の幅は、 $2\sqrt{\pi\omega_B/T}$ であることが導かれる。したがって、図 8.13 に示した台形型のスペクトルモデルが得られたわけだ。