

内積・エルミート行列 (2022年12月15日)

作成日：December 10, 2022 Updated：December 15, 2022

実施日：December 15, 2022

内積

定義 1. F 上の線形空間 V が、さらに次の公理をみたすとき、 V を内積空間という。

V の任意の二元 \vec{x}, \vec{y} に対し、内積と呼ばれる F の元 $\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle$ が定まり、次の性質 (1)–(4) を持つ：

$$(1) \langle \vec{x}_1 + \vec{x}_2 | \vec{y} \rangle = \langle \vec{x}_1 | \vec{y} \rangle + \langle \vec{x}_2 | \vec{y} \rangle \quad (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{y} \in V)$$

$$(2) \langle \vec{x} | \alpha \vec{y} \rangle = \alpha \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle \quad (\vec{x}, \vec{y} \in V, \alpha \in F)$$

$$(3) \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \overline{\langle \vec{y} | \vec{x} \rangle} \quad (\vec{x}, \vec{y} \in V, F = \mathbb{R} \text{ の場合, 複素共役は不要である.})$$

$$(4) \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle \text{ は常に } 0 \text{ 以上の実数であり, } \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle = 0 \text{ となるのは } \vec{x} = \vec{0} \text{ の場合に限る.}$$

$\sqrt{\langle \vec{x} | \vec{x} \rangle}$ を \vec{x} のノルムと呼び、 $\|\vec{x}\|$ で表す。

内積の例

- \mathbb{R}^n の標準的内積

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \text{ に対し, } \langle \vec{a} | \vec{b} \rangle := a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n.$$

- \mathbb{C}^n の標準的エルミート内積

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \text{ に対し, } \langle \vec{a} | \vec{b} \rangle := \bar{a}_1 b_1 + \bar{a}_2 b_2 + \cdots + \bar{a}_n b_n.$$

[注意] 内積の定義の性質 (2),(3) より、 $\langle \alpha \vec{x} | \vec{y} \rangle = \alpha \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle$ が言えるので、ここでのエルミート内積の定義には左側の \vec{a} の成分に複素共役が現れる。なお、(2) の定義が、 $\langle \alpha \vec{x} | \vec{y} \rangle = \alpha \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle$ で与えられている文献もあり、その場合は、右側の \vec{b} の成分に複素共役が現れる。

- 関数空間の標準的内積

\mathbb{R} 上で定義される関数全体のなす線形空間 V の元 $f, g \in V$ に対し、

$$\langle f | g \rangle := \int_a^b f(x)g(x)dx.$$

問題 1. (目覚まし直交基底) \mathbb{C}^3 を標準的内積 $\langle | \rangle$ の備わった線形空間とする。 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ を \mathbb{C}^3 の直交基底とする。

- (1) \mathbb{C}^3 の任意の元は $\vec{v} = c_1 \vec{e}_1 + c_2 \vec{e}_2 + c_3 \vec{e}_3$ のように一意に表される。係数 $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C}$ を与えられたベクトルと内積の言葉で表せ。
- (2) $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ が正規直交基底の場合、(1) の結果はどう書けるか。

ディラックの記号

たてベクトルの表記として(上に矢印記号を書くのではなく)以下の記号を用いると便利である： $|a\rangle \equiv \vec{a}$ これをケット (ket) ベクトルと呼ぶ。ケットベクトルのエルミート共役(転置をとって複素共役)をブラ (bra) ベクトルと呼び以下の記号で表す： $\langle a| := (|a\rangle)^* = {}^t(|\vec{a}\rangle)$ 。ブラベクトルはよこベクトルであり、 $\langle a||b\rangle (= \langle a|b\rangle)$ と書く)は上記の標準的内積を与え、名前も「ブラ・ケット」と内積 (bracket) になってしまう。

正規直交基底を $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$ とすると、正規直交性は $\langle e_k|e_l\rangle = \delta_{kl}$ であるが、正規直交基底にはさらに完全性であるという条件が成り立つ。式で表すと $\sum_{k=1}^n |e_k\rangle\langle e_k| = 1_{n \times n}$ 。

実際、この n 次元ベクトル空間の任意の元 $|v\rangle$ に対し、問題 1 と同様の議論により、 $|v\rangle = |e_1\rangle\langle e_1|v\rangle + |e_2\rangle\langle e_2|v\rangle + \dots + |e_n\rangle\langle e_n|v\rangle$ が成り立つからである。 $(\langle e_k|v\rangle)$ は展開係数。あえて基底の右側に書いた $|e_k\rangle\langle e_k|$ は(たてベクトル \times よこベクトルなので) $n \times n$ 行列であることを注意すると、両辺比較して完全性の関係式が得られる。

なお、 $P_k := |e_k\rangle\langle e_k|$ は $|e_k\rangle$ 方向への直交射影を与える行列である。(実際、 P_k は $|e_k\rangle$ を $|e_k\rangle$ に写し、 $|e_l\rangle (l \neq k)$ を $|0\rangle$ に写す。) さらなる略記 $|k\rangle := |e_k\rangle$ も慣れればとても便利。

エルミート行列の性質・対角化

例題 1. $A^* := {}^t\bar{A} = A$ を満たす行列をエルミート (Hermite) 行列という。以下 $V = \mathbb{C}^n$ とし、内積 $\langle | \rangle$ は標準的なものとする。

- (1) 任意の $\vec{v}, \vec{w} \in V$ に対して、エルミート行列 A が $\langle A\vec{v}|\vec{w}\rangle = \langle \vec{v}|A\vec{w}\rangle$ を満たすことを示せ。
- (2) エルミート行列 A の固有値はすべて実数であることを示せ。
- (3) エルミート行列 A の相異なる固有値に対する固有ベクトルは互いに直交することを示せ。
- (4) エルミート行列 A の n 個の固有値がすべて相異なるとき、それらに対する n 個の固有ベクトル $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$ が一次独立であることを、前問の性質を用いて示せ。(このとき、 $P = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n)$ とすると $P^{-1}AP$ が対角行列になる。)
- (5) 固有ベクトルを正規化すれば、 P はユニタリ行列(すなわち $P^*P = E$ を満たす行列)となることを示せ。

【解答】

- (1) $\langle A\vec{v}|\vec{w}\rangle = (A\vec{v})^* \cdot \vec{w} = \vec{v}^* A^* \vec{w} = \vec{v}^* A \vec{w} = \langle \vec{v}|A\vec{w}\rangle$ 。
- (2) $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$, $\vec{v} \neq \vec{0}$ とおく。(1)より、 $\langle A\vec{v}|\vec{v}\rangle = \langle \vec{v}|A\vec{v}\rangle$ が成り立つ。ここで、 $\langle \vec{v}|A\vec{v}\rangle = \langle \vec{v}|\lambda\vec{v}\rangle = \lambda\langle \vec{v}|\vec{v}\rangle$ 。一方、 $\langle A\vec{v}|\vec{v}\rangle = \langle \lambda\vec{v}|\vec{v}\rangle = \bar{\lambda}\langle \vec{v}|\vec{v}\rangle$ 。よって、 $(\lambda - \bar{\lambda})\langle \vec{v}|\vec{v}\rangle = 0$ 。 $\vec{v} \neq \vec{0}$ より $\langle \vec{v}|\vec{v}\rangle \neq 0$ 。よって、 $\lambda = \bar{\lambda}$ 。 $(\lambda$ は実数)
- (3) $\lambda_i, \lambda_j \in \mathbb{R}$ を A の相異なる固有値とし、それらに属する固有ベクトルをそれぞれ \vec{v}_i, \vec{v}_j とする。(1)より、 $\langle A\vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle = \langle \vec{v}_i|A\vec{v}_j\rangle$ が言える。ここで、 $\langle \vec{v}_i|A\vec{v}_j\rangle = \lambda_j\langle \vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle$ 、 $\langle A\vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle = \bar{\lambda}_i\langle \vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle = \lambda_i\langle \vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle$ より、 $(\lambda_i - \lambda_j)\langle \vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle = 0$ 。 $\lambda_i \neq \lambda_j$ より、 $\langle \vec{v}_i|\vec{v}_j\rangle = 0$ 。
- (4) $k_1, k_2, \dots, k_n \in \mathbb{C}$ とする。 $k_1\vec{v}_1 + k_2\vec{v}_2 + \dots + k_n\vec{v}_n = \vec{0}$ $\cdots (*) \Rightarrow k_1 = k_2 = \dots = k_n = 0$ を示せばよい。 l を 1 から n までの任意の自然数とする。 $(*)$ の両辺と、 \vec{v}_l との内積をとると、 $\langle \vec{v}_l|\vec{v}_m\rangle = \delta_{lm}$ より、 $k_l = 0$ 。

$$(5) P^*P = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n)^*(\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n) = \begin{pmatrix} \vec{v}_1^* \\ \vec{v}_2^* \\ \vdots \\ \vec{v}_n^* \end{pmatrix} (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n) =$$

$$\begin{pmatrix} \vec{v}_1^*\vec{v}_1 & \vec{v}_1^*\vec{v}_2 & \cdots & \vec{v}_1^*\vec{v}_n \\ \vec{v}_2^*\vec{v}_1 & \vec{v}_2^*\vec{v}_2 & \cdots & \vec{v}_2^*\vec{v}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vec{v}_n^*\vec{v}_1 & \vec{v}_n^*\vec{v}_2 & \cdots & \vec{v}_n^*\vec{v}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \vec{v}_1 | \vec{v}_1 \rangle & \langle \vec{v}_1 | \vec{v}_2 \rangle & \cdots & \langle \vec{v}_1 | \vec{v}_n \rangle \\ \langle \vec{v}_2 | \vec{v}_1 \rangle & \langle \vec{v}_2 | \vec{v}_2 \rangle & \cdots & \langle \vec{v}_2 | \vec{v}_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \vec{v}_n | \vec{v}_1 \rangle & \langle \vec{v}_n | \vec{v}_2 \rangle & \cdots & \langle \vec{v}_n | \vec{v}_n \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

問題 2. (2 次のエルミート行列)

- (1) エルミート行列の和とスカラー倍はともにエルミート行列となる. したがってエルミート行列全体は, 行列全体のなすベクトル空間の部分空間となる. 2 次のエルミート行列全体のなす **実**ベクトル空間 W の基底と次元を求めよ.
- (2) W の内積を以下で定める: $A, B \in W$ に対して, $\langle A | B \rangle := \frac{1}{2} \text{Tr}(A^*B)$. 以下の 4 つの行列は, W の正規直交基底をなすことを示せ.

$$\sigma_0 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ は Pauli 行列と呼ばれ, 素粒子論, 物性理論など物理学の幅広い分野で顔を出す極めて重要な行列である. ($(\sigma_0, -i\sigma_1, -i\sigma_2, -i\sigma_3)$ が四元数 $(1, i, j, k)$ と同じ積構造を持つことにも注意.)

実対称行列の対角化と 2 次曲線・2 次曲面への応用

問題 3. (実対称行列の対角化と 2 次曲線の標準化) 例題 1 と同様, $V = \mathbb{C}^n$ とし, 内積は標準的なものとする.

${}^tA = A$ を満たす実行列を実対称行列という. 実対称行列は成分がすべて実数であるエルミート行列と解釈することができる. したがって, 実対称行列 A の固有値はすべて実数であり, 実対称行列 A の相異なる固有値に対する固有ベクトルは互いに直交する. 実対称行列 A の成分と固有値が実数であるから, 固有ベクトルの成分もすべて実数にとることができる. よって実対称行列は直交行列 P (${}^tPP = E$) によって対角化される. 以上を踏まえて以下の問いに答えよ.

- (1) 次の実対称行列を直交行列 P (${}^tPP = E$) によって対角化せよ.

$$A = \begin{pmatrix} 5 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 7 \end{pmatrix}$$

(固有ベクトルを正規化すれば, それらを並べた行列は直交行列になることに注意.)

- (2) 基底変換の行列 P がある角度の回転 (あるいは折り返し) を表す行列であることに注意して, 2 次曲線 $C := \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2 \mid 5x^2 - 2\sqrt{3}xy + 7y^2 = 4 \right\}$ の概形を描け.

(ヒント: C を表す方程式の左辺は, $(x, y)A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ と書ける. 回転の向きに注意.)

問題 4. (2 次曲面の概形)

(1) $a, b, c > 0$ とする. 3 次元空間 \mathbb{R}^3 内において以下の方程式 (a)~(f) で記述される図形は何か? それぞれ (ア)~(キ) の中から選べ. なお高次元図形の直観的理解には断面 ($z=0$ のスライスなど) を見るというのが有効である.

$$(a) \frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1 \quad (b) \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (c) x^2 + y^2 - z^2 = 1$$

$$(d) x^2 - y^2 - z^2 = 1 \quad (e) x^2 + y^2 = 1 \quad (f) z = x^2 + y^2$$

(ア) 楕円面 (イ) 一葉双曲面 (ウ) 二葉双曲面 (エ) 楕円放物面

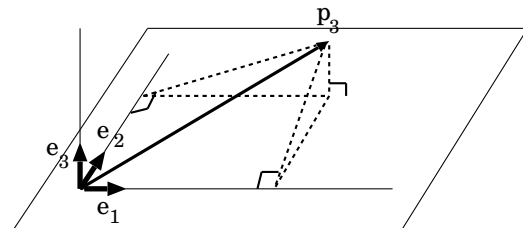
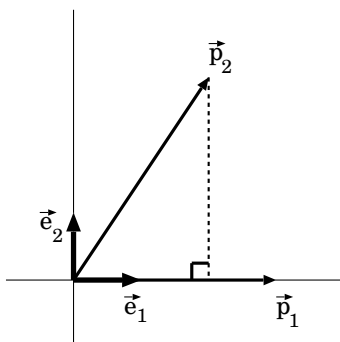
(オ) 双曲放物面 (カ) 楕円錐面 (キ) その他

(2) 2 次曲面 $S := \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid 2xz + y^2 = 1\}$ はどのような図形を表すか. 簡単な理由説明とともに, 前問の (ア)~(キ) の中から選べ.

シュミットの直交化法・直交多項式

内積を持つベクトル空間 V の与えられた基底から正規直交基底を作る方法の一つとしてシュミット (Schmidt) の直交化法というものがある. ここでは $V = \mathbb{R}^3$ とその与えられた基底 $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$ を題材にして, この方法をまとめた. 詳しい適用例は例題 2 を参照. (この方法は一般の内積空間の場合にも適用できる.)

- まず, \vec{p}_1 を正規化する (長さを 1 にする) ことで 1 つ目の単位ベクトル (長さ 1 のベクトル) \vec{e}_1 を求める.
- 次に, \vec{p}_2 と \vec{e}_1 の張る平面上で, \vec{e}_1 と直交する単位ベクトル \vec{e}_2 を求めよう (下図の左図参照). \vec{p}_2 を \vec{e}_1 と \vec{e}_2 の 1 次結合として $\vec{p}_2 = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2 \cdots (*)$ と表したとき, $a_1\vec{e}_1$ を \vec{p}_2 の \vec{e}_1 方向への正射影ベクトルという. (*) の両辺と \vec{e}_1 の内積をとることで係数 a_1 を (\vec{p}_2 と \vec{e}_1 から) 求めることができる. このとき, $\vec{p}_2 - a_1\vec{e}_1$ は \vec{e}_1 と直交しており, したがってこれを正規化すれば 2 つ目の単位ベクトル \vec{e}_2 (\vec{e}_1 と直交) が具体的に求まる.
- 最後に, \vec{p}_3 と \vec{e}_1 と \vec{e}_2 の張る空間で, \vec{e}_1 と \vec{e}_2 とも直交する単位ベクトル \vec{e}_3 を求めよう (下図の右図参照). (2) と同様に, $\vec{p}_3 = b_1\vec{e}_1 + b_2\vec{e}_2 + b_3\vec{e}_3 \cdots (**)$ と表したとき, 係数 b_1, b_2 は \vec{p}_3 と \vec{e}_1 と \vec{e}_2 から求めることができる. このとき, $\vec{p}_3 - (b_1\vec{e}_1 + b_2\vec{e}_2)$ は \vec{e}_1 と \vec{e}_2 とも直交しており, したがってこれを正規化すれば 3 つ目の単位ベクトル \vec{e}_3 (\vec{e}_1 と \vec{e}_2 とも直交) が具体的に求まる.



例題 2. 2 次以下の実係数多項式全体のなすベクトル空間 $P_2(\mathbb{R})$ を考える. 単項式の列 ($P_2(\mathbb{R})$ の基底) $1, x, x^2$ にシュミットの直交化法を適用し, 内積 $\langle f|g \rangle := \int_0^1 f(x)g(x)dx$ に関する $P_2(\mathbb{R})$ の正規直交基底 $e_0(x), e_1(x), e_2(x)$ を 1 つ求めよ.
(このようにして得られる多項式を直交多項式という.)

【解答】 Dirac の記号を導入し, $|p_0\rangle := 1, |p_1\rangle := x, |p_2\rangle := x^2$ とおく. また求める正規直交基底を $|e_0\rangle := e_0(x), |e_1\rangle := e_1(x), |e_2\rangle := e_2(x)$ と書く.

$|e_0\rangle$ は $|p_0\rangle$ のノルムを 1 に規格化することで得られる: $|e_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle p_0|p_0\rangle}} \cdot |p_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}} \cdot 1$.

次に, $|p_1\rangle$ と $|e_0\rangle$ から $|e_1\rangle$ を構成する. 2 つのベクトル $|p_0\rangle$ と $|p_1\rangle$ が生成する線形空間において, その正規直交基底 $|e_0\rangle, |e_1\rangle$ は以下の (完全性の) 関係式を満たす: $|e_0\rangle\langle e_0| + |e_1\rangle\langle e_1| = 1 \cdots (*)$. ($|e_1\rangle\langle e_1|$ は $|e_1\rangle$ 方向への直交射影を表す線形写像.) $|p_1\rangle$ を $|e_1\rangle$ 方向に直交射影したベクトルを $|e_1'\rangle$ とすると, $|e_1'\rangle = |e_1\rangle\langle e_1|p_1\rangle \stackrel{(*)}{=} (1 - |e_0\rangle\langle e_0|)|p_1\rangle = |p_1\rangle - |e_0\rangle\langle e_0|p_1\rangle = x - \frac{1}{2}$. $|e_1\rangle$ は $|e_1'\rangle$ のノルムを 1 に規格化することで得られる: $|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle e_1'|e_1'\rangle}} |e_1'\rangle = \sqrt{3}(2x - 1)$.

最後に, $|p_2\rangle$ と $|e_0\rangle, |e_1\rangle$ から $|e_2\rangle$ を構成する. 3 つのベクトル $|p_0\rangle, |p_1\rangle, |p_2\rangle$ が生成する線形空間において, その正規直交基底 $|e_0\rangle, |e_1\rangle, |e_2\rangle$ は以下の (完全性の) 関係式を満たす: $|e_0\rangle\langle e_0| + |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| = 1 \cdots (**)$. $|p_2\rangle$ を $|e_2\rangle$ 方向に直交射影したベクトルを $|e_2'\rangle$ とすると, $|e_2'\rangle = |e_2\rangle\langle e_2|p_2\rangle \stackrel{(**)}{=} (1 - |e_0\rangle\langle e_0| - |e_1\rangle\langle e_1|)|p_2\rangle = |p_2\rangle - |e_0\rangle\langle e_0|p_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_1|p_2\rangle = x - \frac{1}{2}$. $|e_2\rangle$ は $|e_2'\rangle$ のノルムを 1 に規格化することで得られる: $|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle e_2'|e_2'\rangle}} |e_2'\rangle = \sqrt{5}(6x^2 - 6x + 1)$. (**【注意】** ノルムの計算は必ず内積の定義に立ち戻って行なうこと!)

今週の宿題・ボーナス問題 (提出期限はすべて 12 月 18 日 (日) 23 時 55 分です)

締め切りを 5 分繰り上げましたのでご注意ください!

問題 5. (宿題：2 次曲線の標準化)

(1) 実対称行列 $A = \begin{pmatrix} 5 & -3 \\ -3 & 5 \end{pmatrix}$ を直交行列によって対角化せよ.

(2) 曲線 $C := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid 5x^2 - 6xy + 5y^2 - 8\sqrt{5}(x - y) + 16 = 0\}$ の概形を描け.

問題 6. (宿題：ラゲール多項式) 区間 $[0, \infty)$ 上で定義された x の一変数多項式 $f(x), g(x)$ の内積を $\langle f|g \rangle := \int_0^\infty e^{-x} f(x)g(x)dx$ で定める.

(1) 自然数 m, n に対して, $\langle x^m|x^n \rangle = (m+n)!$ を示せ.

(ヒント: たとえば, a を正の数として, $I(a) := \int_0^\infty e^{-ax}$ を考える. 積分値を a の関数として求め, 両辺を a で $(m+n)$ 回微分して, $a = 1$ とする. この解法を採用する場合は積分と微分の順序交換は気にしなくてよい.)

(2) 単項式の列 $1, x, x^2, x^3, \dots$ にシュミットの直交化法を適用し, 順次得られる多項式 $L_0(x), L_1(x), L_2(x), \dots$ ($L_k(x)$ は x の k 次式. x^k の係数は正.) を $L_2(x)$ まで求めよ. ($L_k(x)$ をラゲール (Laguerre) 多項式と呼ぶ.)

フーリエ展開

一変数関数 $f(x)$ に対して、これまでテイラー展開なるものを学んだ：

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x-a)^n, \quad a_n = \frac{f^{(n)}(a)}{n!}$$

一般の複雑な関数をシンプルなべき関数 $(x-a)^n$ の和 (線形結合) で表示することで、 $x=a$ 近傍の $f(x)$ の振る舞いを近似的に調べたり、さまざまな応用を考えることができた。関数全体の空間は無限次元のベクトル空間として扱うことができ、 $1, (x-a), (x-a)^2, \dots$ が一つの基底をなすわけであったが、 $(x-a)^n$ は標準的な内積に関して直交していないため実は扱いづらい面もある。

ここでは一変数周期関数 $f(x)$ に対して、フーリエ展開なるものを考える。周期は 2π とし、基本周期の範囲を $[-\pi, \pi]$ にとると、 $f(x)$ は三角関数の和 (線形結合) として以下のように展開される：

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx). \quad (1)$$

これを $f(x)$ のフーリエ展開あるいはフーリエ級数と呼ぶ。この展開の利点は、三角関数 $\cos nx, \sin nx$ が標準的な内積 $\langle f|g \rangle := \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)g(x)dx$ に関して正規直交基底となっているところである：

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cos nx dx = 0, \quad \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nx dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nx dx = \delta_{m,n}. \quad (2)$$

テイラー展開のときと同様、無限和の収束性などが問題となるが、ここではそれは認めて以下の問題を解いてみよう。(解答に、 $c_n(x) := \cos nx, s_n(x) := \sin nx$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) なる記号を用いてよい。)

例題 3. (フーリエ展開)

- (1) フーリエ展開可能な関数 $f(x)$ が与えられたとき展開係数は以下のように書けることを示せ。

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx, \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx dx.$$

- (2) 周期関数 $f(x) = \begin{cases} 1 & (0 < x < \pi) \\ 0 & (-\pi < x < 0) \end{cases}$ を (1) 式のようにフーリエ級数展開し、展開係数を計算してフーリエ展開級数を求めよ。また $x = \pi/2$ を代入すると何が得られるか？
- (3) 周期関数 $f(x) = |\sin x|$ ($-\pi < x < \pi$) を (1) 式のようにフーリエ級数展開し、展開係数を計算してフーリエ展開級数を求めよ。また $x = \pi/2$ を代入すると何が得られるか？

【解答】

(1) 正規直交性の (2) 式は、内積の記号を用いて、 $\langle s_m | c_n \rangle = 0, \langle s_m | s_n \rangle = \langle c_m | c_n \rangle = \delta_{mn}$ のように表される。 $f(x)$ のフーリエ展開の式 (1) の両辺と、 $c_n(x)$ との内積をとると、 $n \geq 1$ のとき、 $\langle s_m | c_n \rangle = 0, \langle c_m | c_n \rangle = \delta_{mn}$ より $a_n = \langle f | c_n \rangle$ 、 $n = 0$ のとき、 $\langle 1 | c_n \rangle = \langle 1 | s_n \rangle = 0$ より $a_0 = \langle f | c_0 \rangle$ 。同様に、すべての自然数 n に対して、 $b_n = \langle f | s_n \rangle$ が示される。

(2) まず展開係数を計算すると以下のようになる： $a_n = \delta_{n0}$ 、 $b_n = \frac{1}{n\pi}(1 - (-1)^n)$ 。

フーリエ展開の式 (1) に代入すると、求めるフーリエ展開級数が得られる：

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n} \sin nx = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n-1} \sin(2n-1)x \\ &= \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \left(\sin x + \frac{1}{3} \sin 3x + \frac{1}{5} \sin 5x + \frac{1}{7} \sin 7x + \cdots \right). \end{aligned}$$

この式に $x = \pi/2$ を代入すると $f(\pi/2) = 1$ より Leibniz の級数が得られる。

$$\frac{\pi}{4} = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \cdots$$

(3) 展開係数： $a_0 = \frac{4}{\pi}$ 、 $a_1 = 0$ 、 $a_n (n \geq 2) = \frac{-2}{\pi} \frac{(-1)^n + 1}{(n-1)(n+1)}$ 、 $b_n = 0$ 。

フーリエ級数： $f(x) = \frac{2}{\pi} - \frac{4}{\pi} \left(\frac{1}{1 \cdot 3} \cos 2x + \frac{1}{3 \cdot 5} \cos 4x + \frac{1}{5 \cdot 7} \cos 6x + \cdots \right)$ 。この式に $x = \pi/2$ を代入すると、 $f(\pi/2) = 1$ より、以下の等式が得られる：

$$\frac{\pi}{4} - \frac{1}{2} = 1 + \frac{1}{1 \cdot 3} + \frac{1}{3 \cdot 5} + \frac{1}{5 \cdot 7} + \cdots$$

問題 7. (ボーナス問題) 例題 3 (1) の結果を既知としてよい。

周期関数 $f(x) = |x|$ ($-\pi < x < \pi$) を (1) 式のようにフーリエ級数展開し、展開係数を計算してフーリエ展開級数を求めよ。また $x = 0$ を代入し $\pi^2/8$ の無限和表示を求めよ。