永長 直人 「物性論における場の量子論」 輪読資料 (宮崎担当分)

第0回:付録(数学的準備)

宮崎 優*1

^{*1} 何かあれば https://miyazaki-yu.github.io/webpage/about.html にある連絡先までご連絡願います。すぐに対応できるかはわかりませんが...

第0回(2020年4月16日)輪読(宮崎)

0 付録

0.1 Fourier 解析

離散 Fourier 変換

周期 L を持つ周期関数 f(x) を考える。 f(x+L)=f(x) であるから、 $0 \le x < L^{*1}$ の区間を考えれば f(x) という関数について全ての情報を得られることになる。

今、区間 0 < x < L を整数 $j = 0, 1, \dots N$ を用いて

$$x_j = j\Delta x \qquad \Delta x = \frac{L}{N} \tag{1}$$

のように N 個に等分して、各 $x=x_j$ での f(x) の値を集めてベクトル

$$\mathbf{f} := \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \end{pmatrix} \tag{2}$$

を定義する*2。ここで、かなり天下り的ではあるがユニタリー行列

$$U_{kl} := \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kl\right) \qquad k, l = 0, \dots N - 1$$
 (3)

^{*1} 教科書とは端点のとり方が異なるが f(0)=f(L) なので本質的ではない。 離散 Fourier 変換は通常このように取るというのと、後の説明で極限を取る際の都合上 $+\infty$ を区間に 含みたくないのでこのようにする。

^{*2} このような操作をサンプリングするという。

を考え*3、f をこの行列で変換したものを

$$\boldsymbol{F} := U\boldsymbol{f} \tag{4}$$

としてこれを離散 Fourier 変換と定義する。U がユニタリーであることからもちろん逆変換は

$$\boldsymbol{f} = U^{\dagger} \boldsymbol{F} \tag{5}$$

である。

問題なのは離散 Fourier 変換 F が一体何かということである。(5) の形を具体的に書いてみると

$$f(x_j) = \sum_{l=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(i\frac{2\pi}{N}jl\right) F_l \tag{6}$$

であるが、(1) から $x_j = \frac{L}{N} j$ を用いて

$$f(x_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi}{L}lx_j\right) F_l = \sum_{l=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} F_l e^{ik_l x_j}$$
 (7)

$$k_l := \frac{2\pi}{L}l\tag{8}$$

と表せる。 $N \to \infty$ とすれば区間 $0 \le x < L$ にあるあらゆる x は数列 $\{x_l\}_{l=1,2,\cdots,\infty}$ のうちのどれかに一致する $(x=x_j)$ と考えられて、関数 f(x) は

$$f(x) = \lim_{N \to \infty} \sum_{l=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} F_l e^{ik_l x} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l e^{ik_l x}$$
 (9)

のように三角関数 $\left\{e^{ik_lx}\right\}$ の線形和で表される。すなわち $m{F}$ は f(x) を三角関数で表した際の展開係数 $c_l:=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{\sqrt{N}}F_l$ に対応する。

$$\left(UU^{\dagger}\right)_{kl} = \sum_{j=0}^{N-1} U_{kj} U_{lj}^* = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi}{N}(k-l)j\right) = \delta_{kl}$$

であることから示される。

^{*3 *1} がユニタリーであることは

0 付録

Fourier 級数展開と Fourier 変換

5

これまでの主張は区間 $0 \le x < L$ の関数 f(x) が三角関数 $\left\{e^{ik_{\ell}x}\right\}$ で展開できるということだった。それでは f(x) が全区間 $-\infty < x < \infty$ のときはどのようになるのかという疑問は自然である。

その前に Fourier 級数展開について復習する。周期 L の実関数の Fourier 級数展開は

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} (a_j \cos(k_j x) + b_j \sin(k_j x))$$
 (10)

$$a_j = \frac{2}{L} \int_0^L dx f(x) \cos(k_j x) \tag{11}$$

$$b_j = \frac{2}{L} \int_0^L dx f(x) \sin(k_j x) \tag{12}$$

で表される。これを Euler の公式 $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ を用いて指数関数の形で表すと

$$f(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j e^{ik_j x} \tag{13}$$

$$k_j := \frac{2\pi}{L} j \qquad j \in \mathbb{Z} \tag{14}$$

である。もし f(x) が実関数であれば

$$c_{j} = \begin{cases} \frac{a_{j} - ib_{j}}{2} & (j > 0) \\ \frac{a_{0}}{2} & (j = 0) \\ \frac{a_{j} + ib_{j}}{2} & (j < 0) \end{cases}$$
 (15)

という形に制約される *4 が、この表式は f(x) が複素数の場合にも拡張できて、その場合はこのような制約はない。

^{*4} つまり、 $j \ge 0$ の係数を決めてしまうと残りの j < 0 の係数は自動的に決定される。自由度が減るといったほうがわかりやすいかもしれない。

0.1 Fourier 解析 6

一方で (9) を $c_l=a_l+ib_l(a_l,b_l)$ は実数)、 $e^{ik_lx}=\cos k_lx+i\sin k_lx$ として書き換えれば

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \{ (a_l \cos k_l x - b_l \sin k_l x) + i(b_l \cos k_l x + a_l \sin k_l x) \}$$
 (16)

となる。この表式は f(x) が複素数であるときに (10) と同様に実部と虚部が独立ではなく、完全ではないことがわかる *5 。したがって (13) を (複素)Fourier 級数展開と呼び、その係数 c_l を Fourier 係数と呼んで以降はこの形で議論をすすめる。この Fourier 係数は

$$c_l = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{\sqrt{N}} F_l = \lim_{N \to \infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{N} e^{-ik_l x_j} f(x_j)$$
 (17)

ここで $N\to\infty$ のとき、 $\frac{L}{N}=\Delta x\to 0$ であるから、 $\sum_{j=0}^\infty \frac{1}{N}\to \frac{1}{L}\int_0^L dx$ 、 $x_j\to x$ と置き換えられて

$$c_l = \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{-ik_l x} f(x) \tag{18}$$

となる。

本題の f(x) が全区間 $-\infty < x < \infty$ のときを考えよう。いままでのように区間 $0 \le x < L$ で考えると極限をとった際に全区間を覆わないので、(18) の積分区間を

$$c_{l} = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx e^{-ik_{l}x} f(x)$$
 (19)

^{*5} このように書くと離散 Fourier 変換も複素数のときには成り立たないと思われるかもしれないが、それは誤りである。離散 Fourier 変換は有限個数のサンプル $\{(x_j,f_j)\}_{j=0}^{N-1}$ に対して各点を通るように三角関数で補完しているだけなので、三角関数 $\{e^{ik_jx}\}_{j=0}^{N-1}$ があれば十分である。一方で Fourier 級数展開というのは無限個の三角関数の和で f(x) に「関数として」一致させる操作なので離散 Fourier 変換とは質的に異なる。

のようにシフトさせる*6。ここで $\frac{L}{N} \to 0$ を保ちながら $L \to \infty$ とすると、 $\{k_l\}$ は緻密になっていき、 k_l は実数 k と置き換えられる。このときに $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ik_l x} f(x)$ が収束するならば c_l は 0 に収束してしまうため、 $\frac{c_l L}{\sqrt{2\pi}}$ という量* 7 を k の関数 $\hat{F}(k)$ に対応させると

$$\hat{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x)$$
 (20)

この $\hat{F}(k)$ を f(x) の Fourier 変換と呼ぶ。

それでは一方でこれを (13) に対応させると

$$f(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \frac{c_l L}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_l x}$$
 (21)

ここで $\Delta k:=k_l-k_{l-1}=\frac{2\pi}{L}$ とおいて $L\to\infty$ とすれば $k_l\to k$ 、 $\frac{c_lL}{\sqrt{2\pi}}\to \hat{F}(k)$ 、 $\sum_{l=-\infty}^\infty \frac{1}{L}=\sum_{l=-\infty}^\infty \frac{\Delta k}{2\pi}\to \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty dk$ と対応するので

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \hat{F}(k)$$
 (22)

となり*8、これが逆変換に対応することがわかる。

$$\int_{a}^{+\infty} (\cdots) dx$$

となる。そのように考えてどの程度議論が進められるかわからないが、ここでの議論はあくまで Fourier 級数の立場から Fourier 変換を説明しているだけであり、Fourier 変換の定義は (20) で与えられている以上のものではない。

^{*6} この範囲のとり方は全く恣意的で例えば実数 a に対して $a \leq x < a + L$ で考えると $L \to +\infty$ で

^{*7} $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ は単なる係数で本質的な意味はない。1 や $\frac{1}{2\pi}$ と取る本もあるが、今回は教科書に合わせた。

^{*8} 前の注の Fourier 変換の係数に対応して、逆変換の係数も変化する。具体的には両方の 係数の積が $\frac{1}{2\pi}$ となる。

0.2 汎関数と変分法

汎関数の例

汎関数とは「関数の関数」であるとよく説明される。数学的な定義はひとまずおいておくとして、区間 (a,b) で定義された関数 f(x) の汎関数 $F[f]^{*9}$ となる 2 つの例を挙げてみよう。

- 関数 w(x) に対して $F_w[f] = \int_a^b w(x) f(x) dx$
- α を実数として $F_{\alpha}[f] = \int_{a}^{b} (f(x))^{\alpha} dx$

これらの例を見れば明らかに関数 f(x) の Fourier 変換 $\hat{F}(k)$ を取るという操作は汎関数

$$\mathcal{F}_k[f] := \hat{F}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x)$$
 (23)

で定義できる。

無限次元の線形空間

 ξ_k を実数あるいは複素数として無限数列

$$u = (\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_k, \cdots) \tag{24}$$

を考える。このとき条件

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left| \xi_k \right|^2 < \infty \tag{25}$$

を満たすuの全体を l^2 という。 α を実数あるいは複素数、 $u=(\xi_k)_{k=1}^\infty\in l^2$ 、 $v=(\eta_k)_{k=1}^\infty\in l^2$ とすると

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\alpha \xi_k|^2 = |\alpha|^2 \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_k|^2 < \infty$$
 (26)

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\xi_k + \eta_k|^2 \le \sum_{k=1}^{\infty} (|\xi_k| + |\eta_k|)^2 \le \sum_{k=1}^{\infty} 2 |\xi_k|^2 + 2 |\eta_k|^2 < \infty$$
 (27)

より、定数倍 $\alpha u := (\alpha \xi_k)_{k=1}^\infty \in l^2$ と和 $u + v := (\xi_k + \eta_k)_{k=1}^\infty \in l^2$ を定義できるので l^2 は無限次元の線形空間とみなせる (つまり u を無限次元のベクトルとみなせる)。

より一般には $1 \le p < \infty$ について $u = (\xi_k)_{k=1}^{\infty}$ のうちで

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\xi_k|^p < \infty \tag{28}$$

を満たすものの全体を l^p と呼び、これも線形空間となる。

これに対して lp ノルムを

$$||u||_{l^p} := \left(\sum_{k=1}^{\infty} |\xi_k|^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{29}$$

を定義できる。これがノルムの公理を満たすのは明らかである。一般にノルム $\|\cdot\|$ が定義された線形空間 X をノルム空間 $(X,\|\cdot\|)^{*10*11}$ と呼ぶ。

ノルムは距離を誘導する。ノルム空間の 2 点の元 $u,v\in X$ について、距離 d(u,v) を

$$d(u, v) = ||u - v|| \tag{30}$$

で与えることにする。これは距離の公理を満たす。

距離を与えたことで収束という概念が定義できるようになる。 つまりノルム空間 X における点列 $\{u_n \in X\}_{n=1}^\infty$ が点 $w \in X$ に収束するとは

$$||u_n - w|| \to 0 \qquad (n \to 0) \tag{31}$$

^{*10 ()} 内の $\|\cdot\|$ は線形空間 X にある種の構造を入れたということを意味する。この場合は直後に述べる距離の構造を入れたという意味である。一般に集合 (空間) に定義された構造を位相 (topology) といい、位相は考える集合の部分集合に対して開集合であるか否かを決める事によって定まる。例えば Euclid 空間 (\mathbb{R}^3,d) 、 $d(x,y)=\sqrt{\sum_{i=1}^3(x_i-y_i)^2}$ であれば、点 $a\in\mathbb{R}^3$ から距離 ε 未満の点の集合 (開球) $D_\varepsilon(a)\subset\mathbb{R}^3$ が開集合として定まる。

 $^{*^{11}}$ ノルムが明らかなときは単に X と書くことにする。

が成り立つことを言う。

内積

以上の議論からベクトルの「長さ」を定義できた。これを更に拡張した概念として内積を定義する。内積 (\cdot,\cdot) とは X を複素線形空間* 12 としたとき、 $u,v\in X$ に対して複素数 (u,v) が定まり、

- 1. (u,v) > 0
- 2. $(u, u) = 0 \iff u = 0$
- 3. $(u, v)^* = (v, u)$
- $4. \alpha, \beta$ を複素数、 $w \in X$ として

$$(\alpha u + \beta v, w) = \alpha^*(u, w) + \beta^*(v, w)$$
$$(w, \alpha u + \beta v) = \alpha(w, u) + \beta(w, v)$$

を満たすことをいう*13。また、 $\|u\| = \sqrt{(u,u)}$ とすれば $\|\cdot\|$ はノルムとなる。高校で習うような内積を考えると、内積は「長さ」という構造に更に「角度」を付加した 2 つのベクトルの「重なり」のような量であるといえる。 例えば、 l^2 においては $u=(\xi_k)_{k=1}^\infty\in l^2$ 、 $v=(\eta_k)_{k=1}^\infty\in l^2$ に対して、

$$(u,v)_{l^2} = \sum_{k=1}^{\infty} \xi_k^* \eta_k \tag{32}$$

は内積の公理を満たし、この内積から導かれたノルムは l^2 ノルムに一致 する。

関数空間

関数解析とは関数空間を線形空間と同一視して、関数をベクトルのように扱う考え方である。上で議論したノルムや内積といった量を適用することで、関数の大きさや重なりといった量を議論できる。

^{*12} 実線形空間の場合は複素共役(*)を取り除けばよい。

 $^{*^{13}}$ 数学の教科書では 4 の定義が異なる (α, β) の複素共役が逆) 場合がある。

関数をベクトルと見なす最も典型的な例が前節で扱った Fourier 解析である。 区間 $0 \le x < L$ における Fourier 級数展開 (13) は $(e^{ik_lx})_{l=1}^\infty$ を基底として表示した際に

$$f(x) = \left(\cdots, e^{ik_{-1}x}, e^{ik_0x}, e^{ik_1x}, \cdots\right) \begin{pmatrix} \vdots \\ c_{-1} \\ c_0 \\ c_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$(33)$$

と表せ、関数 f(x) と無限次元のベクトル $\mathbf{c}=(\cdots,c_{-1},c_0,c_1,\cdots)^T$ は同じ情報を持つ。

それでは関数をどのようにベクトルとして扱っていくか議論する。まず、 l^2 の拡張として L^2 を定義する。領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ で定義された f(x) に対して

$$\int_{\Omega} |f(x)|^2 \, dx < \infty \tag{34}$$

を満たす関数の全体を $L^2(\Omega)$ と定義する。これも線形空間となることは $f(x), g(x) \in L^2(\Omega)$ 、 α を複素数として

$$\int_{\Omega} dx \left| \alpha f(x) \right|^2 = \left| \alpha \right|^2 \int_{\Omega} dx \left| f(x) \right|^2 < \infty \tag{35}$$

$$\int_{\Omega} dx |f(x) + g(x)|^2 \le \int_{\Omega} dx \left(2|f(x)|^2 + 2|g(x)|^2 \right) < \infty \tag{36}$$

より、 l^2 の場合と同様に示せる。 l^2 の場合と比べると、 ξ_k が各 x での f(x) に、 $\sum_{k=1}^\infty$ が $\int_\Omega dx$ に対応する。これは離散 Fourier 変換と Fourier 級数展開の対応とほとんど同じである。あのときは区間 $0 \le x < L$ を分割し、それぞれの代表点 $\{x_n\}$ での f の値を集めてあたかもベクトルのように扱っていた。この立場からみると関数から Fourier 級数を得るという操作は関数と同じ情報を持つ無限次元ベクトルに無限次元ユニタリー行列* 14 を作用させることをいう。

^{*14} 今回の定義では正確には定数倍ずれている。

やはりノルムも同様に $\|f(x)\|_{L^2}=\sqrt{\int_\Omega dx\,|f(x)|^2}$ で定義でき、これを L^2 ノルムという *15 。

関数空間という線形空間にノルムが定まったなら、収束の定義は上述の場合と全く同様である。 L^2 ノルム空間の場合は、関数列 $\left\{f_n(x)\in L^2(\Omega)\right\}_{n=1}^\infty$ に対して、 $g(x)\in L^2(\Omega)$ への収束は

$$||f_n(x) - g(x)||_{L^2} \to 0 \qquad (n \to \infty)$$
 (37)

であり、 L^2 ノルムでの収束を L^2 収束という。

最も最たる例が Fourier 級数であり、任意の $f(x) \in L^2(0,L)$ に対し、 Fourier 級数 (13) は $f(x) \land L^2$ 収束する。すなわち

$$\lim_{\substack{N \to \infty \\ M \to -\infty}} \left(\sum_{l=M}^{N} c_l e^{ik_l x} \right) = f(x)$$
 (38)

が L^2 収束の意味で成り立つ。

 $L^2(\Omega)$ での内積 (f,g)、 $f(x),g(x)\in L^2(\Omega)$ は量子力学で学んだように、

$$(f,g) = \int_{\Omega} dx f^*(x)g(x) \tag{39}$$

で定義される。

このように L^p と l^p という構造を入れることで関数と無限次元のベクトルは同一視できることがわかった。

$$\int_{\Omega} |f(x)|^2 dx \stackrel{?}{\Longrightarrow} \forall x, f(x) = 0$$

は厳密には成り立たない。例えば区間 [a,b] において

$$f(x) = \begin{cases} 1 & (x \in \mathbb{Q}) \\ 0 & (x \notin \mathbb{Q}) \end{cases}$$

($\mathbb Q$ は有理数の集合) のような関数では Lebesgue 積分の意味で $L^2(\Omega)$ であるが、明らかに $\forall x, f(x)=0$ ではない。

 $^{^{*15}}$ これを厳密に扱うには、測度論的に扱う必要がある。なぜなら

例 1 よく知られた定理に Parseval の定理がある。これは区間 $0 \le x < L$ で定義された複素 L^2 関数 A(x) および B(x) の Fourier 級数

$$A(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \alpha_j e^{i\frac{2\pi j}{L}x}$$

$$B(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \beta_j e^{i\frac{2\pi j}{L}x}$$
(40)

に対して

$$\frac{1}{L} \int_0^L dx A^*(x) B(x) = \sum_{j=-\infty}^\infty \alpha_j^* \beta_j \tag{41}$$

が成り立つというものである。これは関数 $A(x), B(x) \in L^2$ と数列空間 $\{\alpha_j\}, \{\beta_j\} \in l^2$ で定義された内積が (定数倍を除いて* 16) 等しいことを表す。

Banach 空間と Hilbert 空間

厳密さにこだわらなければ以上の内容で物理として汎関数を理解する前提知識としてはこれで十分かと思うが、量子力学の数学的基板である、これらの「ベクトル」空間について少しだけ触れる。実数 \mathbb{R} の範囲では実数列 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ の収束判定において最も基本的なのは Cauchy の判定法

$$x_n - x_m \to 0 \Longrightarrow \lim_{n \to \infty} x_n$$
が存在する (42)

である。一方で有理数 $\mathbb Q$ ではこの定理は成り立たない。この概念を線形空間に拡張しよう。

ノルム空間 $(X, \|\cdot\|)$ の点列 $\{u_n\} \in X$ が Cauchy 列であるとは

$$||u_n - u_m|| \to 0 \qquad (n, m \to 0) \tag{43}$$

であることをいう。

^{*16} 前述したように Fourier 級数は定数倍だけユニタリからずれているため。

「 $\{u_n\}$ が収束列である」 \Longrightarrow 「 $\{u_n\}$ は Cauchy 列」というのは明らかである。 なぜなら、極限 $\lim_{n\to\infty}u_n=w$ が存在すれば

$$0 \le ||u_n - u_m|| = ||(u_n - w) - (u_m - w)|| \le ||(u_n - w)|| + ||(u_m - w)|| \to \infty$$
(44)

となるためである。

では逆はどうなのか。実は「 $\{u_n\}$ は Cauchy 列」 $\stackrel{?}{\Longrightarrow}$ 「 $\{u_n\}$ が収束列である」というのは一般には成り立たない。逆説的に言えばこれが成り立つようなノルムは性質のよい (あるいは、都合の良い) 特殊なものであるといえる。「 $\{u_n\}$ は Cauchy 列」 \Longrightarrow 「 $\{u_n\}$ が収束列である」が成り立つようなノルム空間を完備であるという。

定義 1 完備なノルム空間を Banach 空間と呼ぶ。

定義 2 内積が定義され、内積から定義されたノルムが完備な内積空間を Hilbert 空間と呼ぶ。

最初に説明した 1 次元で実数では Cauchy の収束判定が成立するが、有理数では成立しないので、完備とは「隙間がない」というイメージで説明される場合がある *17 。

いくつか例を (結果だけ) 挙げる。 $1 \le p \le \infty$ 、 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ とする。

- 例 2 数列空間 l^p は Banach 空間である。
- 例 3 関数空間 $L^p(\Omega)$ は Banach 空間である。
- 例 4 数列空間 l^2 は Hilbert 空間である。
- 例 5 関数空間 $L^2(\Omega)$ は Hilbert 空間である。

^{*17} 清水明「量子論の基礎」

15 0 付録

量子論では一般的な Hilbert 空間の上に理論を構築することで抽象的なベクトル $|\psi\rangle \in l^2$ で計算を行っても実空間の波動関数 $\psi(x) \in L^2$ で行っても同じ理論の枠組みで議論できる。

汎関数と変分法

関数が無限次元のベクトルとみなせることがわかったので、この方針に従って汎関数について調べていく。汎関数 F[f] は関数空間 \mathcal{H}^{*18} の元 f を入力として実数を出力する。関数 f(x) はとりあえず 1 次元の区間 $[\alpha,\beta]$ で定義されているとする。ここで離散 Fourier 変換のときと同様にこの区間を $\alpha=x_1< x_2< \cdots x_N=\beta$ のように分割する。関数 f(x) に対応するベクトルを

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{pmatrix} \tag{45}$$

で定義すると、汎関数は $N \to \infty$ とした際に

$$F[f] \rightarrow F(f_1, f_2, \cdots f_N) = F(\mathbf{f})$$
 (46)

のようなベクトルを引数にとる関数とみなせる。もしFが Fourier 変換のような線形汎関数であればFは無限次元の行列である。

Lagrange 形式の作用などで

$$F[f] = \int_{\alpha}^{\beta} K\left(f(x), \frac{df}{dx}, x\right) dx \tag{47}$$

のような形の汎関数が現れる。離散化した形で書くと

$$F(f_1, f_2, \dots) = \sum_{j=1}^{N-1} K\left(f(x_j), \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{x_{j+1} - x_j}, x_j\right) (x_{j+1} - x_j)$$
(48)

^{*18} とりあえず Banach 空間と考えておく。このあとの変分法の議論では f だけでなくその 微分 f' についても L^p であることを要求する Sobolev 空間を厳密には考える必要がある。

今、 $f(x) \to f(x) + \delta f(x)$ のように関数 f(x) を少しだけずらした際の F の変化分 (変分)

$$\delta F := F[f + \delta f] - F[f] \tag{49}$$

を考える。離散化した場合だと $f_i \rightarrow f_i + \delta f_i$ であるから

$$\delta F = \sum_{j=1}^{N-1} \left(\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a} \Big|_{j} \delta f_{j} + \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \Big|_{j} \frac{\delta f_{j+1} - \delta f_{j}}{x_{j+1} - x_{j}} \right) (x_{j+1} - x_{j}) + O\left((\delta f)^{2}\right)$$

$$\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a} \Big|_{j} := \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a} \Big|_{a=f_{j},b=\frac{f_{j+1}-f_{j}}{x_{j+1}-x_{j}},c=x_{j}}$$
(51)

 $\Delta x = x_{j+1} - x_j$ として更に変形すると

$$\delta F = \sum_{j=2}^{N-1} \left(\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a} \Big|_{j} \Delta x + \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \Big|_{j-1} - \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \Big|_{j} \right) \delta f_{j}$$

$$+ \left(\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a} \Big|_{1} \Delta x - \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \Big|_{1} \right) \delta f_{1}$$

$$+ \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \Big|_{N-1} \delta f_{N}$$
(52)

任意の $\delta f_1, \cdots \delta f_N$ に対して $\delta F = 0$ を課すと

$$\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a}\Big|_{j} - \frac{\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\Big|_{j} - \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\Big|_{j-1}}{\frac{\Delta x}} = 0 \quad (j = 2, \dots N - 1) \quad (53)$$

$$\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a} \bigg|_{1} \Delta x - \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \bigg|_{1} = 0 \tag{54}$$

$$\left. \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b} \right|_{N=1} = 0 \tag{55}$$

永長 直人 「物性論における場の量子論」 輪読資料 (宮崎担当分) 第0回

ここで $N \to \infty$ 、 $\Delta x \to 0$ の連続極限を取ると

$$\frac{\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\Big|_{j} - \frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\Big|_{j-1}}{\Delta x} \to \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\Big|_{x} \right)$$
(56)

に注意して

$$\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial a}\bigg|_{x} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\bigg|_{x} \right) = 0$$
 (57)

$$\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\bigg|_{\alpha} = 0 \tag{58}$$

$$\frac{\partial K(a,b,c)}{\partial b}\bigg|_{\beta} = 0 \tag{59}$$

これが変分法における Euler-Lagrange 方程式である。

汎関数微分

(46) を見ると、f はベクトルなのでベクトル解析の方法を展開できると考えられる。まずは F[f] について先程と同様に $f \to f + \delta f$ をとる。ベクトルの形で書くと

$$\delta F(\mathbf{f}) = F(\mathbf{f} + \delta \mathbf{f}) - F(\mathbf{f}) = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{f}} \cdot \delta \mathbf{f} + O\left((\delta f)^{2}\right)$$

$$= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\partial F}{\partial f_{j}} \delta f_{j} + O\left((\delta f)^{2}\right)$$
(60)

である。関数空間の形に戻すとベクトルの内積が関数空間では積分に対応することに注意して、汎関数微分 $\frac{\delta F}{\delta f}$ を

$$\delta F = \int_{\alpha}^{\beta} dx \frac{\delta F}{\delta f} \delta f(x) \tag{61}$$

で定義する。(60) と(61) を比較すると汎関数微分は汎関数の勾配に対応することがわかる。

関数をベクトルとして見た際の基底について考える。ベクトルを扱うときに基底として最も扱いやすいのは正規直交基底である。離散的なベクトル表示に戻ると、正規直交基底を $(e_m)_{m=1}^\infty$ として

$$\mathbf{f} \cdot \mathbf{e}_m = f_m \tag{62}$$

である。関数空間に戻した際に $x_m \to x' \in [\alpha, \beta]$ と対応するとして、 $e_m \to \delta_{x'}(x)$ と書くことにすると

$$I_{\delta_{x'}}[f] := \int_{\alpha}^{\beta} dx f(x) \delta_{x'}(x) = f(x')$$

$$\tag{63}$$

であり、基底 $\delta_{x'}(x) = \delta(x-x')$ はデルタ関数であることがわかる。これは単位ベクトル e_m の第 m 成分が 1、ほかが 0 であるのに対し、デルタ関数 $\delta(x-x')$ が x' を含む十分小さい領域での積分が 1、含まない領域での積分が 0 であることを考えると自然である。これについて変分を取ると

$$\delta I_{\delta_{x'}}[f(x)] = \int_{\alpha}^{\beta} dx \frac{\delta I_{\delta_{x'}}[f(x)]}{\delta f(x)} \delta f(x) = \int_{\alpha}^{\beta} dx \delta f(x) \delta(x - x')$$
 (64)

であり (63) より $I_{\delta_{x'}}[f(x)] = f(x')$ と形式的に置き換えると

$$\frac{\delta f(x')}{\delta f(x)} = \delta(x - x') \tag{65}$$

とかける。

参考文献

- 1. 西森 秀稔 「物理数学 II フーリエ解析とラプラス解析・偏微分方程 式・特殊関数」 丸善出版 (2015)
- 2. 藤田 宏 「岩波講座 応用数学 関数解析」 岩波書店 (1995)
- A. Altland and B. Simons "Condensed Matter Field Theory Second editon" Cambridge University Press (2010)