宇宙論における統計的手法ノート

並河俊弥

目次

第1章 準備 3

1.1 確率分布関数 . . . 3

1.1.1 揺らぎの確率分布関数 . . . 3

1.1.2 揺らぎの和の確率分布関数 . . . 3

1.1.3 揺らぎの分散の確率分布関数 . . . 4

1.1.4 Cumulant . . . 5

1.1.5 漸近展開 . . . 7

1.1.6 Minkowski汎関数 . . . 8

1.1.7 対数正規分布 . . . 10

1.2 相関関数の性質 . . . 11

1.2.1 統計的一様性と統計的等方性 . . . 11

1.2.2 二次元の場合 . . . 11

1.2.3 球面に射影された揺らぎの統計的対称性 . . . 11

1.2.4 球面に射影された揺らぎ . . . 13

1.3 推定 . . . 14

1.3.1 事前・事後確率と尤度関数 . . . 14

1.3.2 Bayes推定と最尤推定 . . . 15

1.3.3 ガウス型尤度関数 . . . 15

第2章 Fisher解析 17

2.1 準備 . . . 17

2.1.1 共分散行列 . . . 17

2.1.2 不偏推定量 . . . 18

2.2 パラメータ決定精度 . . . 18

2.3 Fisher行列 . . . 19

2.3.1 決定精度の予測 . . . 19

2.3.2 二次元楕円 . . . 20

2.3.3 情報の和 . . . 20

2.3.4 Fisher行列とスコア関数 . . . 21

2.3.5 Fisher行列とCramér-Raoの不等式 . . . 21

2.4 Fisher行列の計算例 . . . 22

2.4.1 Gauss分布 . . . 22

2.4.2 非対角成分のみ情報をもつ場合 . . . 23

2.4.3 Wishart分布の場合でのFisher行列 24
2.4.4 弱非Gauss近似：一次元 25
2.4.5 弱非 Gauss 近似：多次元 26
2.4.6 有限観測領域でのFisher行列 27
2.5 系統誤差の評価 27

第3章 宇宙論における推定 29
3.1 揺らぎとその角度パワースペクトル 29
3.1.1 CMB観測における尤度関数 29
3.1.2 角度パワースペクトルの推定 31
3.1.3 温度揺らぎの角度パワースペクトル：最尤推定 32
3.1.4 銀河サーベイ 34
3.2 CMBの重力レンズ効果 36
3.2.1 レンズ場の推定：Quadratic近似 36
3.2.2 Bias hardened estimator 37
3.2.3 レンズ場に対する最尤推定法 39
3.2.4 レンズ場の角度パワースペクトルの推定 41

付録A 公式 45
A.1 ルジャンドル多項式 45
A.1.1 ルジャンドル多項式 45
A.1.2 Legendre陪多項式 47
A.2 球面上の回転 48
A.2.1 回転行列 48
A.2.2 スピン演算子 49
A.2.3 球面調和関数 53
A.2.4 ウィグナーd関数 58
A.2.5 ウィグナーD行列 61
A.2.6 Wigner 3j 記号 62
A.3 特殊関数 65
A.3.1 エルミート多項式 65
A.3.2 ベッセル関数 66
A.3.3 球ベッセル関数 68
A.4 超関数 71
A.4.1 デルタ関数 71
A.5 行列計算 72
A.5.1 疑似逆行列 72
A.5.2 クロネッカー積 72
A.5.3 行列のベクトル化とその応用 73

参考文献 75

宇宙論における統計的手法について

並河俊弥

Latest Version

第1章

準備

数理統計学における推定の基本事項は, 宇宙論観測で得られるデータから宇宙論的情報を引き出す手法を説明する上で不可欠となる. ここでは宇宙論観測を例に挙げながら, 確率や推定法に関する基礎事項を挙げていく.

1.1 確率分布関数

1.1.1 揺らぎの確率分布関数

これまでの観測と整合性し, 標準と考えられている宇宙論では, 我々が観測する CMB の温度揺らぎの統計的性質はほぼガウス分布で記述できる. より正確には, CMB の温度揺らぎを球面調和関数展開して得た展開係数:

$$a_{\ell m} = \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\; Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})\Theta(\hat{\boldsymbol{n}})\,, \tag{1.1}$$

は, 平均ゼロ, 分散 C_ℓ のガウス分布に従う:

$$P(a_{\ell m}|C_\ell) = \frac{1}{\sqrt{2\pi C_\ell}} \exp\left(-\frac{|a_{\ell m}|^2}{2C_\ell}\right)\,. \tag{1.2}$$

ここで C_ℓ は揺らぎ $a_{\ell m}$ の分散を表す. 等方的な揺らぎを想定し, 分散は m に依存しない. 確率変数である $a_{\ell m}$ は各 m について互いに独立なので, 各 m 全てをまとめてデータ・ベクトル $\boldsymbol{d}_\ell = \{a_{\ell,-\ell}, \cdots, a_{\ell\ell}\}$ で表すと, このデータを得る確率は以下の多次元ガウス分布となる:

$$P(\boldsymbol{d}_\ell|C_\ell) = \prod_{m=-\ell}^{\ell} P(a_{\ell m}|C_\ell) = \frac{1}{(2\pi C_\ell)^{(2\ell+1)/2}} \exp\left(-\sum_{m=-\ell}^{\ell}\frac{|a_{\ell m}|^2}{2C_\ell}\right)\,. \tag{1.3}$$

1.1.2 揺らぎの和の確率分布関数

確率変数 x, y の和 $z = x + y$ の確率分布関数は:

$$P(z) = \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}y\; \delta(x+y-z)P(x)P(y) = \int \mathrm{d}x\; P(x)P(z-x)\,, \tag{1.4}$$

で与えられる. x, y がそれぞれ平均 μ_x, μ_y, 分散 σ_x, σ_y のガウス分布に従うとすれば:

$$\begin{aligned}
P(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left[-\frac{(x-\mu_x)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(z-x-\mu_y)^2}{2\sigma_y^2}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \exp\left[\frac{-(\sigma_x^2+\sigma_y^2)x^2 + 2(\mu_x\sigma_2^y + (\mu_y - z)\sigma_x^2)x - (\mu_x^2\sigma_y^2 + (z-\mu_y)^2\sigma_x^2)}{2\sigma_x^2\sigma_y^2}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \exp\left[-\frac{(\sigma_x^2+\sigma_y^2)(x - \frac{\mu_x\sigma_y^2 + (\mu_y - z)\sigma_x^2}{\sigma_x^2+\sigma_y^2})^2 - (z-\mu_x-\mu_y)^2}{2(\sigma_x^2+\sigma_y^2)}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\sqrt{2\sigma^2\pi} \exp\left[-\frac{(z-\mu_x-\mu_y)^2}{2(\sigma_x^2+\sigma_y^2)}\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_x^2+\sigma_y^2)}} \exp\left[-\frac{(z-\mu_x-\mu_y)^2}{2(\sigma_x^2+\sigma_y^2)}\right]
\end{aligned} \tag{1.5}$$

これより, 和 $x+y$ の分布は, 平均 $\mu_x+\mu_y$, 分散 $\sigma_x^2+\sigma_y^2$ のガウス分布となる.

ここで, 球面上のマップとして与えられた CMB の温度揺らぎの統計的性質についてみる. 球面上の温度揺らぎは, 球面調和関数による展開係数の和で書ける:

$$\Theta(\hat{\boldsymbol{n}}) = \sum_{\ell m} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{1.6}$$

ここで $a_{\ell m}$ は, 平均ゼロ, 分散 C_ℓ のガウス分布に従う確率変数であり, その和である温度揺らぎはガウス分布に従う. $X(\hat{\boldsymbol{n}})$ は平均ゼロであり, 分散は

$$\sigma_0^2 \equiv \langle\Theta^2(\hat{\boldsymbol{n}})\rangle = \sum_{\ell m \ell' m'} \langle a_{\ell m} a_{\ell' m'}\rangle Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}) Y_{\ell' m'}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \sum_\ell \frac{2\ell+1}{4\pi} C_\ell\,. \tag{1.7}$$

注意として, 異なる二点間の相関も存在するため, 共分散 $\langle(\Theta(\hat{\boldsymbol{n}}) - \langle\Theta(\hat{\boldsymbol{n}})\rangle)(\Theta(\hat{\boldsymbol{n}}') - \langle\Theta(\hat{\boldsymbol{n}}')\rangle)\rangle$ は対角にならない.

1.1.3　揺らぎの分散の確率分布関数

観測から宇宙論的情報を引き出すさい, 揺らぎの分散である角度パワースペクトル C_ℓ を測定し, 理論で計算したものと比較することがよく行われる. 理論における角度パワースペクトルは, その定義 ($a_{\ell m}$ の分散) から

$$C_\ell \delta_{mm'} = \langle a_{\ell m} a^*_{\ell' m'}\rangle\,, \tag{1.8}$$

で関係付けられる. ただし $\langle\cdots\rangle$ は, $P(\boldsymbol{d}_\ell|C_\ell)$ の統計平均:

$$\langle X(a_{\ell m})\rangle = \int \mathrm{d}^{(2\ell+1)} a_{\ell m}\ X(a_{\ell m}) P(\boldsymbol{d}_\ell|C_\ell) \tag{1.9}$$

を表す. C_ℓ を観測から測定するには, 式 (1.8) と m の独立性から, 安直に:

$$\widehat{C}_\ell = \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |a_{\ell m}|^2\,, \tag{1.10}$$

と $|a_{\ell m}|^2$ を m に対して平均をとったものが推定量の候補である.

ここで, 推定量 $\widehat{C}_\ell$ が従う確率分布について見る. 揺らぎの確率分布関数は

$$P(\boldsymbol{d}_\ell|C_\ell)\mathrm{d}\boldsymbol{d}_\ell = \frac{1}{(2\pi C_\ell)^{(2\ell+1)/2}} \exp\left[-(2\ell+1)\frac{\widehat{C}_\ell}{2C_\ell}\right] \mathrm{d}\boldsymbol{d}_\ell\,. \tag{1.11}$$

これを変数変換すると

$$\begin{aligned} P(\widehat{C}_\ell|C_\ell)\mathrm{d}\widehat{C}_\ell &= \frac{1}{(2\pi C_\ell)^{(2\ell+1)/2}} \exp\left[-(2\ell+1)\frac{\widehat{C}_\ell}{2C_\ell}\right] \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{d}_\ell}{\mathrm{d}\widehat{C}_\ell}\mathrm{d}\widehat{C}_\ell \\ &= A_\ell \frac{(\widehat{C}_\ell)^{\frac{2\ell-1}{2}}}{(C_\ell)^{\frac{2\ell+1}{2}}} \exp\left[-(2\ell+1)\frac{\widehat{C}_\ell}{2C_\ell}\right] \mathrm{d}\widehat{C}_\ell\,. \end{aligned} \tag{1.12}$$

ただし規格化因子A_ℓは

$$1 = \int_0^\infty \mathrm{d}\widehat{C}_\ell\ P(\widehat{C}_\ell|C_\ell) = A_\ell \int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^{\frac{2\ell-1}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2\ell+1}{2}x} = A_\ell \left(\frac{2}{2\ell+1}\right)^{\frac{2\ell+1}{2}} \Gamma\left[\frac{2\ell+1}{2}\right] \tag{1.13}$$

を満たす. 一般に多重ガウス型確率分布関数に従う確率変数に対し, その分散が従う確率分布関数は Wishart 分布と呼ばれる分布関数になる. 平均は

$$\begin{aligned} \langle \widehat{C}_\ell \rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}\widehat{C}_\ell\ \widehat{C}_\ell P(\widehat{C}_\ell|C_\ell) \\ &= C_\ell A_\ell \int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^{\frac{2\ell+1}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2\ell+1}{2}x} \\ &= C_\ell A_\ell \int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^{\frac{2\ell-1}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2\ell+1}{2}x} = C_\ell\,. \end{aligned} \tag{1.14}$$

ただし二段目から三段目の式変形では部分積分を行った. 二乗期待値は

$$\begin{aligned} \langle \widehat{C}_\ell^2 \rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}\widehat{C}_\ell\ \widehat{C}_\ell^2 P(\widehat{C}_\ell|C_\ell) \\ &= C_\ell^2 A_\ell \int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^{\frac{2\ell+3}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2\ell+1}{2}x} \\ &= C_\ell^2 A_\ell \frac{2\ell+3}{2\ell+1} \int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^{\frac{2\ell+1}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2\ell+1}{2}x} = C_\ell^2 \frac{2\ell+3}{2\ell+1}\,. \end{aligned} \tag{1.15}$$

1.1.4 Cumulant

確率分布がガウス分布の場合は, 平均と分散で確率分布が決定される. しかし上記の分散のように, 確率分布がガウス分布と異なる場合には, さらにその確率分布を特徴づける量を導入する必要がある.

確率変数 X に対し, $\phi(t) \equiv \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}tX} \rangle$ として定義される関数を特性関数 (characteristic function) という. 特性関数の対数 $\ln\phi$ を t で展開すると:

$$\ln\phi(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n}{n!}(\mathrm{i}t)^n \tag{1.16}$$

ここに現れる c_n を n 次の cumulant とよぶ. ガウス分布の場合には $n \geq 3$ の cumulant は存在しないため, 高次の cumulant $c_n\,(n \geq 3)$ はガウス分布からのずれを特徴づける. X の n 乗期待値を n 次の moment と呼ぶが, n 次の cumulant は n 次までの moment で表される. これを見るために, 特性関数と n 次の moment m_n の関係が以下で与えられることに着目する:

$$m_n = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \frac{\partial^n \phi(t)}{\partial t^n}\bigg|_{t=0} . \tag{1.17}$$

これから $\phi(t)$ の t に関する Taylor 展開は:

$$\phi(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathrm{i}^n m_n}{n!} t^n . \tag{1.18}$$

両辺の対数をとることで:

$$\ln \phi(t) = \ln\left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathrm{i}^n m_n}{n!} t^n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathrm{i}^n m_n}{n!} t^n - \frac{1}{2}\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathrm{i}^n m_n}{n!} t^n\right)^2 + \ldots \tag{1.19}$$

これと, $\ln \phi(t)$ の t に関する展開を比較することで:

$$c_1 = m_1 \tag{1.20}$$

$$c_2 = m_2^2 - m_1^2 \tag{1.21}$$

$$c_3 = m_3 - 3m_2 m_1 + 2m_1^3 \tag{1.22}$$

$$c_4 = m_4 - 4m_3 m_1 - 3m_2^2 + 12 m_2 m_1^2 - 6m_1^4 \tag{1.23}$$

などが得られる.

特性関数と似た量として以下の二つの生成関数 $M_x(t)$ および $K_x(t)$ を用いてモーメントとキュムラントを定義できる:

$$M_x(t) \equiv \langle e^{tx} \rangle \qquad K_x(t) \equiv \ln M_x(t) . \tag{1.24}$$

n 次のモーメントとキュムラントは以下のように定義できる:

$$\mu_n = \frac{\partial^n}{\partial t^n} M_x\bigg|_{t=0}, \qquad \kappa_n \equiv \frac{\partial^n}{\partial t^n} K_x\bigg|_{t=0} . \tag{1.25}$$

ここで例として, 種々の確率分布での特性関数を求めておく. Wishart分布の特性関数は:

$$\begin{aligned}
\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\widehat{C}_\ell} \rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}\widehat{C}_\ell \;\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\widehat{C}_\ell} P(\widehat{C}_\ell | C_\ell) \\
&= A_\ell \int_0^\infty \mathrm{d}x \; x^{\frac{2\ell-1}{2}} \, \mathrm{e}^{-(\frac{2\ell+1}{2} - \mathrm{i}tC_\ell)x} \\
&= A_\ell \left(\frac{2}{2\ell + 1 - 2\mathrm{i}tC_\ell}\right)^{\frac{2\ell+1}{2}} \Gamma\left[\frac{2\ell+1}{2}\right] \\
&= \left(\frac{2\ell+1}{2\ell + 1 - 2\mathrm{i}tC_\ell}\right)^{\frac{2\ell+1}{2}} \\
&= \left(\frac{1}{1 - \mathrm{i}tC_\ell/\beta_\ell}\right)^{\beta_\ell}
\end{aligned} \tag{1.26}$$

で与えられる. ただし $\beta_\ell = (2\ell+1)/2$ である.

1.1.5　漸近展開

ガウス分布から少しずれた確率分布を表現するさいに, 確率分布関数をガウス分布周りで展開しておくと便利である. ここでは, その漸近展開方法であるEdgeworth展開について述べる.

いまn個の独立変数X_nがあり, それらは平均μと分散σのガウス分布とは限らない確率分布に従うとする. このとき, 標準化された確率変数

$$S_n \equiv \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{i=1}^{n}\frac{X_i-\mu}{\sigma} \tag{1.27}$$

が従う確率分布を求めたいとする. 中心極限定理より, $n\to\infty$でガウス分布に従う確率変数となるので, 有限nであってもある程度大きいnであれば, S_nの確率分布はガウス分布に近い形となる.

標準化された確率変数$Y_i=(X_i-\mu)/\sigma$を用いると, S_nの特性関数$\phi_n(t)$とY_iの特性関数$\phi(t)$は

$$\phi_n(t)=\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}tS_n}\rangle=\prod_{i=1}^{n}\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}tY_i/\sqrt{n}}\rangle=[\phi(t/\sqrt{n})]^n \tag{1.28}$$

となる. ここで$\phi(t)$は

$$\ln\phi(t)=-\frac{1}{2}t^2+\sum_{i=3}^{\infty}\frac{c_i}{i!}(\mathrm{i}t)^i \tag{1.29}$$

と展開できるので

$$\ln\phi_n(t)=-\frac{1}{2}t^2+\sum_{i=3}^{\infty}\frac{c_i}{n^{i/2-1}i!}(\mathrm{i}t)^i \tag{1.30}$$

となる. これから

$$\phi_n(t)=\exp\left[-\frac{t^2}{2}+\sum_{i=3}^{\infty}\frac{c_i}{n^{i/2-1}i!}(\mathrm{i}t)^i\right]=\exp\left[\sum_{i=3}^{\infty}\frac{c_i}{n^{i/2-1}i!}(\mathrm{i}t)^i\right]e^{-t^2/2} \tag{1.31}$$

これを逆フーリエ変換することで, 求めたい確率分布関数が得られる:

$$\begin{aligned} f_n(x)&=\exp\left[\sum_{i=3}^{\infty}\frac{c_i}{n^{i/2-1}i!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^i\right]\mathrm{e}^{-x^2/2} \\ &=\left[1-\frac{1}{\sqrt{n}}\frac{c_3}{3!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^3+\frac{1}{n}\left(\frac{c_4}{4!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^4+\frac{1}{2}\frac{c_3^2}{3!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^6\right)+\dots\right]\mathrm{e}^{-x^2/2} \end{aligned} \tag{1.32}$$

上記の展開をEdgeworth展開と呼ぶ [*1] . $n\to\infty$でガウス分布に近づくため, $\sqrt{n}$に関してまとめられた項ごとに収束の速さが異なる. Hermite 多項式 $h_n(x)$ を

$$\mathrm{e}^{-x^2/2}h_n(x)=(-1)^n\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\mathrm{e}^{-x^2/2} \tag{1.33}$$

[*1] $n=1$としたとき, 同様の展開としてGram-Charlier A 展開がある. しかしこの展開方法では微分の次数にしたがって項がまとめられていたため, 漸近展開にはならない場合, すなわち級数が発散する状況が多い.

で定義すると

$$f_n(x) = \left[1 - \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{c_3}{3!}h_3(x) + \frac{1}{n}\left(\frac{c_4}{4!}h_4(x) + \frac{1}{2}\frac{c_3^2}{3!}h_6(x)\right) + \dots\right] \mathrm{e}^{-x^2/2} \tag{1.34}$$

と書き直せる.

1.1.6　Minkowski汎関数

平均ゼロ, 分散 C_ℓ のガウス分布に従う揺らぎ $X_{\ell m}$ が与えられたとする. 球面上の揺らぎを X, その分散を σ_0 としたとき, $u = X/\sigma_0$ は規格化されたガウス分布に従う.

一般に d 次元 Euclid 空間の集合 Q に対し, Minkowski汎関数は [1]

$$V_0^{(d)} \equiv \int_Q \mathrm{d}v \ , \tag{1.35}$$

$$V_k^{(d)} \equiv \frac{1}{\omega_{k-1}\binom{d}{j}} \int_{\partial Q} \mathrm{d}s\ S_k(R_1, \dots, R_{d-1}) \tag{1.36}$$

で与えられる. ここで, $\omega_k = 2\pi^{(k+1)/2}/\Gamma[(k+1)/2]$, S_kはk次の対称式, R_iは ∂Q上の主曲率である. ここでは, 特に$d = 2$次元の場合を考える (例えば [2, 3]):

$$V_0 = \int_Q \mathrm{d}S \ , \tag{1.37}$$

$$V_1 = \frac{1}{4}\int_{\partial Q} \mathrm{d}\ell \ , \tag{1.38}$$

$$V_2 = \frac{1}{2\pi}\int_{\partial Q} \mathrm{d}\ell\ \frac{1}{R}\,. \tag{1.39}$$

集合$Q_\nu = \{u \,|\, u \geq \nu\}$に対するMinkowski汎関数は

$$V_k(\nu) = \int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}\ F_k(\nu; u) \tag{1.40}$$

で与えられる. ここで, 積分範囲は全天であり, また

$$F_k(\nu; u) = \begin{cases} \theta(u-\nu) & (k=0) \\ \frac{1}{4}\delta(u-\nu)\sqrt{u_{;\theta}^2 + u_{;\varpi}^2} & (k=1) \\ \frac{1}{2\pi}\delta(u-\nu)\frac{2u_{;\theta}u_{;\varphi}u_{;\theta\varphi} - u_{;\theta}^2 u_{;\varphi\varphi} - u_{;\varphi}^2 u_{;\theta\theta}}{u_{;\theta}^2 + u_{;\varphi}^2} & (k=2) \end{cases} \tag{1.41}$$

Minkowski汎関数の期待値を求めるには, $\langle F_k(\nu; u)\rangle$を求める必要がある. まず$k = 0$の場合, 求めるべきは

$$\begin{aligned} \langle F_0(\nu; u)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}u\ \theta(u-\nu)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-u^2/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_\nu^\infty \mathrm{d}u\ \mathrm{e}^{-u^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\nu^2/2}h_{-1}(\nu) \end{aligned} \tag{1.42}$$

が得られる.

次に$k=1$について考える．確率変数uと$u_{;i}$に対し[4]

$$\langle u_{;i}\rangle = \langle u\rangle_{;i} = 0 \tag{1.43}$$

$$\langle uu_{;i}\rangle = \frac{1}{2}\langle u^2\rangle_{;i} = 0 \tag{1.44}$$

$$\langle u_{;i}u_{;j}\rangle = \langle uu_{;i}\rangle_{;j} - \langle uu_{;ij}\rangle = -\langle uu_{;ij}\rangle = \delta_{ij}\sum_{\ell}\ell(\ell+1)\frac{C_\ell}{\sigma_0^2}\frac{2\ell+1}{8\pi} \equiv \frac{\sigma_1^2}{2\sigma_0^2} \tag{1.45}$$

ただし

$$(Y_{\ell m})_{;\theta} = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{2}(Y^1_{\ell m} + Y^{-1}_{\ell m}) \tag{1.46}$$

$$(Y_{\ell m})_{;\varphi} = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{2}(Y^1_{\ell m} - Y^{-1}_{\ell m}) \tag{1.47}$$

$$\sum_m (-1)^{m+s_1} Y^{s_1}_{\ell,-m} Y^{s_2}_{\ell m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\,Y^{s_2}_{\ell s_1}(0,0) \tag{1.48}$$

$$Y^{-1}_{\ell 1}(0,0) = Y^1_{\ell 1}(0,0) = -\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \tag{1.49}$$

を用いた．これよりuと$u_{;i}$はそれぞれ分散σ_0, σ_1の独立なガウス場である．したがって，

$$\langle F_1(\nu;u)\rangle = \frac{1}{4}\langle\delta(u-\nu)\sqrt{u^2_{;\theta}+u^2_{;\varpi}}\rangle = \frac{1}{4}\langle\delta(u-\nu)\rangle\langle\sqrt{u^2_{;\theta}+u^2_{;\varpi}}\rangle \tag{1.50}$$

と分解できる．ここで

$$\langle\delta(u-\nu)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}u\;\delta(u-\nu)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-u^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\nu^2/2} \tag{1.51}$$

である．また，$u_{;\theta}$と$u_{;\varphi}$は同じ分散$\sigma \equiv \sigma_1/\sigma_0/\sqrt{2}$ に従うガウス場なので

$$\begin{aligned}\langle\sqrt{u^2_{;\theta}+u^2_{;\varpi}}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\;\sqrt{x^2+y^2}\frac{1}{2\pi\sigma^2}\mathrm{e}^{-(x^2+y^2)/2\sigma^2}\\ &= \frac{1}{\sigma^2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\;r^2\,\mathrm{e}^{-r^2/2\sigma^2} = \sqrt{\pi/2}\sigma\end{aligned} \tag{1.52}$$

最終的に

$$\langle F_1(\nu;u)\rangle = \frac{1}{8}\frac{\sigma_1}{\sqrt{2}\sigma_0}\mathrm{e}^{-\nu^2/2} \tag{1.53}$$

が得られる．

最後に$k=2$の場合について計算する．uと$u_{;i}$, $u_{;i}$と$u_{;ij}$は独立, uと$u_{;ii}$は独立ではないことに注意すると，

$$\langle F_2(\nu;u)\rangle = -\frac{1}{2\pi}\left[\langle\delta(u-\nu)u_{;\varphi\varphi}\rangle\left\langle\frac{u^2_{;\theta}}{u^2_{;\theta}+u^2_{;\varphi}}\right\rangle + \langle\delta(u-\nu)u_{;\theta\theta}\rangle\left\langle\frac{u^2_{;\varphi}}{u^2_{;\theta}+u^2_{;\varphi}}\right\rangle\right] \tag{1.54}$$

ここで

$$\langle\delta(u-\nu)u_{;ii}\rangle = -\langle\delta(u-\nu)u\rangle\langle u^2_{;i}\rangle = -\frac{\nu\,\mathrm{e}^{-\nu^2/2}}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sigma_1^2}{2\sigma_0^2} \tag{1.55}$$

また

$$\left\langle \frac{u_{;j}^2}{u_{;i}u^{;i}} \right\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \; r\,\mathrm{e}^{-r^2/2\sigma^2} \cos^2\phi \frac{1}{2\pi\sigma^2} = \frac{1}{2} \tag{1.56}$$

したがって

$$\langle F_2(\nu; u)\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\sigma_1^2}{2\sigma_0^2} \nu\,\mathrm{e}^{-\nu^2/2} \tag{1.57}$$

これらの期待値は [5] で導かれ, Tomita's formula と呼ばれている.

$x = X_{\ell,m}$として, 確率変数の絶対値に対し

$$\begin{aligned} \langle |x|\rangle = \langle x(2\theta(x)-1)\rangle = 2\langle x\theta(x)\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}x \; \frac{x}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)} \\ &= \frac{-\sigma}{\sqrt{2\pi}} [\mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)}]_0^\infty = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned} \tag{1.58}$$

1.1.7　対数正規分布

宇宙大規模構造の密度揺らぎは非線形成長するため, ガウス分布とは異なり, 対数正規分布に従うことが N 体シミュレーションを用いて示唆されている. 対数正規分布は以下で定義する:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma x} \exp\left[-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right], \qquad N(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]. \tag{1.59}$$

任意の$n \in \boldsymbol{R}$に対し

$$\begin{aligned} I_n &\equiv \int_0^\infty dx x^n P(x) dx = \int_{-\infty}^\infty dy\, e^{ny} N(y) dy \\ &= \exp\left[n\mu + n^2\frac{\sigma^2}{2}\right] \int_{-\infty}^\infty dy \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(y-\mu-\sigma^2 n)}{2\sigma^2}\right] dy = \exp\left[n\mu + n^2\frac{\sigma^2}{2}\right] \end{aligned} \tag{1.60}$$

特に

$$E(x) \equiv \langle x\rangle = I_1 = e^{\mu+\frac{\sigma^2}{2}}\,, \tag{1.61}$$

$$V(x) \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{I_2 - I_1^2} = e^{\mu+\frac{\sigma^2}{2}} \sqrt{e^{\sigma^2}-1}\,. \tag{1.62}$$

xが正規分布に従う確率変数の場合, $1/x$の分散を定義できない. 一方で, 対数正規分布であれば, 平均, 分散は

$$E(x^{-1}) = I_{-1} = (I_1)^{-1} e^{\sigma^2} = [E(x)]^{-1} e^{\sigma^2}\,, \tag{1.63}$$

$$V(x^{-1}) = \sqrt{I_{-2} - I_{-1}^2} = e^{-\mu+\frac{\sigma^2}{2}} \sqrt{e^{\sigma^2}-1} = [E(x)]^{-2} V(x) e^{-\sigma^2}\,. \tag{1.64}$$

もしσ^2が小さい場合, 上式は期待される式となる. すなわち, $x = \langle x\rangle + \delta x$および$\delta x \ll 1$がランダムな確率変数とすると, 逆数は

$$\frac{1}{x} \simeq \frac{1}{\langle x\rangle} - \frac{\delta x}{x^2}\,. \tag{1.65}$$

歪度は

$$\langle (x - \langle x\rangle)^3\rangle = \exp(3\mu)\left[\exp\frac{9\sigma^2}{2} - 3\exp\frac{5\sigma^2}{2} + 2\exp\frac{3\sigma^2}{2}\right] \tag{1.66}$$

平均μと分散σが1より十分小さいとき, $\langle (x - \langle x\rangle)^3\rangle$は正規分布の場合と同じになる.

1.2 相関関数の性質

1.2.1 統計的一様性と統計的等方性

揺らぎ X が統計的に一様であるとは, 平行移動 $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}_0$ に対し, X の統計量が不変であるときに言う. ただし変数 $\boldsymbol{x}$ は三次元座標である. X はそのいたるところで定義されているとする. 例えば, ある揺らぎ $X(\boldsymbol{x})$ のフーリエ変換を考え, その二点相関関数を考えると:

$$\xi(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}' + \boldsymbol{x}_0) = \xi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'), \tag{1.67}$$

が任意の $\boldsymbol{x}_0$ に対して成り立つ. これより, 相関関数は二点の差 $\boldsymbol{\Delta x} \equiv \boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}$ にのみ依存する. また統計量が任意の座標回転によって不変であるときは統計的に等方と言う.

このときのフーリエ空間での二点相関:

$$\langle X_{\boldsymbol{k}} X_{\boldsymbol{k}'} \rangle = \int \mathrm{d}\boldsymbol{x} \int \mathrm{d}\boldsymbol{x}' \, \xi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{x}'\cdot\boldsymbol{k}'}, \tag{1.68}$$

の性質を考える. 統計的に一様な揺らぎのフーリエ空間での二点相関は:

$$\begin{aligned}
\langle X_{\boldsymbol{k}} X_{\boldsymbol{k}'} \rangle &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{x} \int \mathrm{d}\boldsymbol{\Delta x} \, \xi(\boldsymbol{\Delta x}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{x}\cdot(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\Delta x}\cdot\boldsymbol{k}'} \\
&= \delta(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}') \int \mathrm{d}\boldsymbol{\Delta x} \, \xi(\boldsymbol{\Delta x}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\Delta x}\cdot\boldsymbol{k}'} \\
&\equiv \delta(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}') P(\boldsymbol{k}')
\end{aligned} \tag{1.69}$$

となる. さらに $\xi(\boldsymbol{\Delta x})$ が $\boldsymbol{\Delta x}$ の方向にも依存しなければ (統計的に等方であれば)

$$\langle X_{\boldsymbol{k}} X_{\boldsymbol{k}'} \rangle = \delta(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}') P(|\boldsymbol{k}'|) \tag{1.70}$$

となる.

1.2.2 二次元の場合

CMB の観測での非一様な観測ノイズの異なる点での相関

$$\xi(\hat{\boldsymbol{n}}, \hat{\boldsymbol{n}}') = S(\hat{\boldsymbol{n}}) \delta(\hat{\boldsymbol{n}} - \hat{\boldsymbol{n}}') \tag{1.71}$$

を考える. 平面近似で二次元フーリエ変換すると

$$\langle X_{\boldsymbol{\ell}} X_{\boldsymbol{\ell}'} \rangle = \int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}} \, S(\hat{\boldsymbol{n}}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{n}}\cdot(\boldsymbol{\ell}+\boldsymbol{\ell}')} \tag{1.72}$$

であり, $\boldsymbol{\ell} \neq \boldsymbol{\ell}'$の値が存在する.

1.2.3 球面に射影された揺らぎの統計的対称性

まず, 球面に射影された揺らぎ$a(\hat{\boldsymbol{n}})$の展開係数$a_{\ell m}$が, 球に対する回転に対してどのように振る舞うか見る. 定義より

$$a_{\ell m} = \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}} \, Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}) a(\hat{\boldsymbol{n}}) \tag{1.73}$$

である. $\hat{\boldsymbol{n}}$を$R\hat{\boldsymbol{n}}$になるように球を回転させると$a(\hat{\boldsymbol{n}})$は$a(R\hat{\boldsymbol{n}})$に移る. この回転された揺らぎに対する展開係数を考え, そのさいに積分変数をR^{-1}だけもどすと

$$\begin{aligned} a^R_{\ell m} &= \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}'\ Y^*_{\ell m}(R^{-1}\hat{\boldsymbol{n}}')a(\hat{\boldsymbol{n}}') \\ &= \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}'\ \sum_{m'} D^{\ell *}_{m'm}(R)Y^*_{\ell m'}(\hat{\boldsymbol{n}}')a(\hat{\boldsymbol{n}}') = \sum_{m'} D^{\ell *}_{m'm}(R)a_{\ell m'} \end{aligned} \tag{1.74}$$

となる. すなわち回転によって異なるm成分が混ざり合う.

同様のことを二つの揺らぎの相関についても考えてみる. 回転により二つの揺らぎの相関は

$$\langle a^R_{\ell_1 m_1} a^R_{\ell_2 m_2}\rangle = \sum_{m'_1 m'_2} D^{\ell_1 *}_{m'_1 m_1}(R) D^{\ell_2}_{m'_2 m_2}(R)\langle a_{\ell_1 m'_1} a_{\ell_2 m'_2}\rangle\,. \tag{1.75}$$

となる. ここで相関は回転に対して不変であるとする. このとき, 上式左辺は変換前の相関と同一視できる. 任意のRについて成り立つので, 両辺を式(A.155)で定義される積分を作用させると

$$C^{\ell_1\ell_2}_{m_1 m_2} \equiv \langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2}\rangle = \int \mathrm{d}\Omega \sum_{m'_1 m'_2} D^{\ell_1 *}_{m'_1 m_1}(\Omega) D^{\ell_2}_{m'_2 m_2}(\Omega) C^{\ell_1\ell_2}_{m'_1 m'_2}\,. \tag{1.76}$$

ここでウィグナーD行列の直交性(A.156)を使うと

$$C^{\ell_1\ell_2}_{m_1 m_2} = \delta_{\ell_1\ell_2}\delta_{m_1 m_2}\sum_{m'_1}\frac{\delta_{m'_1 m'_2}}{2\ell_1+1}C^{\ell_1\ell_2}_{m'_1 m'_2}\,. \tag{1.77}$$

右辺はmに依存しない量なので, 等式が成り立つためには相関はmに依存せず

$$C^{\ell_1\ell_2}_{m_1 m_2} = C_\ell \delta_{\ell_1\ell_2}\delta_{m_1 m_2} \tag{1.78}$$

となる必要がある.

三つの揺らぎの相関は

$$\langle a^R_{\ell_1 m_1} a^R_{\ell_2 m_2} a^R_{\ell_3 m_3}\rangle = \sum_{m'_1 m'_2 m'_3} D^{\ell_1 *}_{m'_1 m_1}(R) D^{\ell_2 *}_{m'_2 m_2}(R) D^{\ell_3 *}_{m'_3 m_3}(R)\langle a_{\ell_1 m'_1} a_{\ell_2 m'_2} a_{\ell_3 m'_3}\rangle\,. \tag{1.79}$$

となる. この相関も回転不変だとすると, 両辺を式(A.155)で定義される積分を作用させて

$$B^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1 m_2 m_3} \equiv \langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} a_{\ell_3 m_3}\rangle = \int \mathrm{d}\Omega \sum_{m'_1 m'_2 m'_3} D^{\ell_1 *}_{m'_1 m_1}(\Omega) D^{\ell_2 *}_{m'_2 m_2}(\Omega) D^{\ell_3 *}_{m'_3 m_3}(\Omega) B^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m'_1 m'_2 m'_3}\,. \tag{1.80}$$

上式に式(A.157)を用いると

$$B^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1 m_2 m_3} = \sum_{m'_1 m'_2 m'_3}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m'_1 & m'_2 & m'_3\end{pmatrix} B^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m'_1 m'_2 m'_3}\,. \tag{1.81}$$

ここで

$$B_{\ell_1\ell_2\ell_3} \equiv \sum_{m_1 m_2 m_3}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix} B^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1 m_2 m_3} \tag{1.82}$$

を定義すると

$$B^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1 m_2 m_3} = \begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix} B_{\ell_1\ell_2\ell_3}\,. \tag{1.83}$$

であり, m依存性はウィグナー3j記号に押し込められる.

1.2.4　球面に射影された揺らぎ

以下のように球面に射影された揺らぎを考える:

$$\phi(\hat{\boldsymbol{n}}) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}\chi\ W(\chi)\psi(\chi\hat{\boldsymbol{n}},\eta) \tag{1.84}$$

ただし$W(\chi)$はz方向への重み, ψはもとの3次元空間で定義された揺らぎである. $\phi(\hat{\boldsymbol{n}})$を球面調和関数$Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})$で展開すると

$$\phi(\hat{\boldsymbol{n}}) = \int_0^\infty \mathrm{d}\chi\ W(\chi)\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^{3/2}}\,\psi(\boldsymbol{k},\eta)\,\mathrm{e}^{i\chi\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}} \tag{1.85}$$

$$= \int_0^\infty \mathrm{d}\chi\ W(\chi)\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^{3/2}}\,\psi(\boldsymbol{k},\eta)\sum_{\ell m}4\pi i^\ell j_\ell(k\chi)Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}}) \tag{1.86}$$

となる. 球面調和関数による展開係数を用いれば

$$\phi_{\ell m} = 4\pi i^\ell\int_0^\infty \mathrm{d}\chi\ W(\chi)\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^{3/2}}\,\psi(\boldsymbol{k},\eta)j_\ell(k\chi)Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}}) \tag{1.87}$$

が得られる.

次にϕの二点相関角度スペクトルを考える. 3次元での揺らぎの無次元パワースペクトルΔ_ψを以下のように定義する:

$$\langle\psi(\boldsymbol{k},\eta)\psi(\boldsymbol{k}',\eta')\rangle \equiv \frac{2\pi^2}{k^3}\Delta_\psi(\boldsymbol{k},\eta,\eta')\delta_D(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,, \tag{1.88}$$

上記パワースペクトルは統計的非等方であるが統計的一様である. これを用いれば, ϕの相関角度スペクトルは

$$\langle\phi^*_{\ell m}\phi_{\ell' m'}\rangle = (4\pi)^2\int_0^\infty \mathrm{d}\chi\ \int_0^\infty \mathrm{d}\chi'\ W(\chi)W(\chi')$$

$$\times\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^{3/2}}\ \int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^{3/2}}\,\langle\psi^*(\boldsymbol{k},\eta)\psi(\boldsymbol{k}',\eta')\rangle Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}})Y^*_{\ell' m'}(\hat{\boldsymbol{k}}')j_\ell(k\chi)j_\ell(k'\chi') \tag{1.89}$$

$$= 4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}\chi\ \int_0^\infty \mathrm{d}\chi'\ W(\chi)W(\chi')$$

$$\times\int\mathrm{d}\ln k\ j_\ell(k\chi)j_{\ell'}(k\chi')\int\mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{k}}\ \Delta_\psi(\boldsymbol{k},\eta,\eta')Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}})Y^*_{\ell' m'}(\hat{\boldsymbol{k}}) \tag{1.90}$$

が得られる. 非等方のパワースペクトルの角度依存性を球面調和関数で展開すると (例えば[6])

$$
\begin{aligned}
\langle\phi^*_{\ell m}\phi_{\ell' m'}\rangle &= 4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}\chi \int_0^\infty \mathrm{d}\chi'\ W(\chi)W(\chi')\int \mathrm{d}\ln k\ j_\ell(k\chi)j_{\ell'}(k\chi') \\
&\quad\times\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{k}}\ \sum_{LM}\Delta_{\psi,LM}(k,\eta,\eta')Y_{LM}(\hat{\boldsymbol{k}})Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{k}})Y^*_{\ell' m'}(\hat{\boldsymbol{k}}) \\
&= 4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}\chi \int_0^\infty \mathrm{d}\chi'\ W(\chi)W(\chi')\int \mathrm{d}\ln k\ j_\ell(k\chi)j_{\ell'}(k\chi') \\
&\quad\times\sum_{LM}\Delta_{\psi,LM}(k,\eta,\eta')(-1)^{m'}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)(2L+1)}{4\pi}}\begin{pmatrix}\ell & \ell' & L\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell & \ell' & L\\ m & m' & M\end{pmatrix} \\
&= \sum_{LM}D^{\ell\ell'}_{\psi,LM}(-1)^{m'}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)(2L+1)}{4\pi}}\begin{pmatrix}\ell & \ell' & L\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell & \ell' & L\\ m & m' & M\end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{1.91}
$$

ここで

$$
D^{\ell\ell'}_{\psi,LM} \equiv 4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}\chi \int_0^\infty \mathrm{d}\chi'\ W(\chi)W(\chi')\int \mathrm{d}\ln k\ j_\ell(k\chi)j_{\ell'}(k\chi')\Delta_{\psi,LM}(k,\eta,\eta') \tag{1.92}
$$

例えば非等方スペクトルは $g_*\mu^2 \sim Y_{20}$ などを含む.

1.3 推定

CMB観測から, 各天球面上での温度揺らぎ$\Theta(\hat{\boldsymbol{n}})$が与えられたとする. 宇宙論では, この温度揺らぎから構成される角度パワースペクトルなどの統計量を測り, さらに宇宙論的に興味のあるパラメータを推定する.

温度揺らぎΘはある確率分布に従い生成される. これに伴い, Θから構成される統計量の推定量(estimator)$\widehat{X}$も, ある確率分布に従って値がばらつくことになる. 宇宙をいくつも観測した場合, Θは真の値に近づく. このとき, $\widehat{X}$も真の値Xに近づくべきである. これは

- 不偏性(unbiased): $\langle\widehat{X}\rangle_\Theta = X$

を意味する. ただし, $\langle\cdots\rangle_\Theta$は$\Theta$に対する統計平均である. 現実の観測では, 一度の観測でできるだけ真に近い値を推定したい. したがって,

- 最小分散(optimal): $\langle|\widehat{X}-X|^2\rangle_\Theta$ができるだけ小さい

ものが, 推定量として好まれる. どのような不偏推定量を用いても, ある分散以下に分散を抑えることはできないことが知られている (Cramer-Raoの不等式) .

これらの条件を満たす推定量が, 特定の確率分布関数の形状を仮定したときにどのように導かれるか, 以下で見ていくことにする.

1.3.1 事前・事後確率と尤度関数

例えば, 温度揺らぎ$\widehat{\boldsymbol{\Theta}}$を観測し, それから角度パワースペクトル$\boldsymbol{C}^{\Theta\Theta}$を得る場合, その確率は

$$
P(\boldsymbol{C}^{\Theta\Theta}|\widehat{\boldsymbol{\Theta}})P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}})\,, \tag{1.93}
$$

で表される. 一方, これは

$$P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})P(\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})\,, \tag{1.94}$$

とも表せる. これから, Bayesの定理と呼ばれる等式が導かれる:

$$P(\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}|\widehat{\boldsymbol{\Theta}}) = \frac{P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})P(\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})}{P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}})}\,. \tag{1.95}$$

左辺は事後確率 (Posterior probability), 左辺の $P(\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})$ と $P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}})$ は事前確率分布 (Prior probability) と呼ばれる. また, $P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})$は尤度関数 (Likelihood function) という.

1.3.2 Bayes推定と最尤推定

Bayes推定では, 事後確率分布 (この場合は角度パワースペクトルの分布) を求める. このさい, 平均値などをもとにして点推定が行われる. もう一つの推定量構築の指針は最尤原理である. これは, 我々が推定すべき量は, 尤度関数を最大とするものである. 最尤推定では, 尤度関数を最大にする角度パワースペクトルを推定する. 従って事前確率が一様である場合には, 両者の推定法は同じ結果を与える. またBayes推定では, 事前確率分布を何かしらの方法で与える必要がある.

1.3.3 ガウス型尤度関数

n個のデータs_iが, 平均μ, 分散σ^2のガウス型尤度関数にしたがって得られる場合を考える:

$$P(\boldsymbol{s}|\mu,\sigma) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}}\exp\left\{-\sum_{i=1}^{n}\frac{(s_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{1.96}$$

データから平均μと分散σ^2を推定したいとする. 最尤原理に従うと, 最尤推定量は

$$\widehat{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}s_i\,, \tag{1.97}$$

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(s_i-\widehat{\mu})^2 \tag{1.98}$$

が得られる.

注意として, $\widehat{\mu}$は不偏推定量であるが, $\widehat{\sigma^2}$は不偏推定量ではなく

$$\langle\widehat{\sigma^2}\rangle = \frac{n-1}{n}\sigma^2 \tag{1.99}$$

となる. もし平均がゼロだと分かっている場合は, 尤度関数において$\mu=0$とすることで, 分散の最尤推定は

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}s_i^2 \tag{1.100}$$

となる. これは不偏推定量である.

第2章

Fisher解析

ここでは, Fisher情報行列を利用した, パラメータの決定精度を理論的に見積もる統計的解析手法について述べる.

2.1　準備

観測から得られるn個のデータ$d_i(i=1,2,\ldots,n)$に対して, データベクトル$\boldsymbol{d}$を

$$\boldsymbol{d} \equiv \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

とする. また, 理論のm個のパラメータ$p_i(i=1,2,\ldots,m)$に対して, ベクトル

$$\boldsymbol{p} \equiv \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_m \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

を定義する.

理論のパラメータ$\boldsymbol{p}$が与えられたときに観測データ$\boldsymbol{d}$が得られる確率をを尤度関数という. これを$\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})$と表すことにする. 尤度関数は$\boldsymbol{d}$と$\boldsymbol{p}$の二変数関数である. ただし

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{d}\ \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p}) = 1 \qquad (\forall \boldsymbol{p}) \tag{2.3}$$

が成り立つように規格化する. 以下では, 簡単のために尤度関数による平均操作を

$$\langle X \rangle \equiv \int \mathrm{d}\boldsymbol{d}\ X(\boldsymbol{d})\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p}) \tag{2.4}$$

と表す. $\langle X \rangle$は$\boldsymbol{p}$の関数である.

2.1.1　共分散行列

観測データから計算される角度パワースペクトル, あるいは一般にデータの関数である統計量の誤差について考える. データ$\boldsymbol{d}$から計算されるi次元の量 $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{d}) = (X_1(\boldsymbol{d}), X_2(\boldsymbol{d}), \ldots, X_i(\boldsymbol{d}))$に対して

$$\mathbf{C}(\boldsymbol{X}) \equiv \langle {}^t[\boldsymbol{X} - \langle \boldsymbol{X} \rangle][\boldsymbol{X} - \langle \boldsymbol{X} \rangle] \rangle \tag{2.5}$$

で定義される行列$\mathbf{C}$を共分散行列（covariance matrix）とよぶ．これは, 一次元における分散をi次元に拡張したものである.

2.1.2　不偏推定量

あるデータから理論のパラメータp_iを推定する状況を考える．データから求められた推定量を$\hat{\boldsymbol{p}}$ としたとき, $\hat{\boldsymbol{p}}$の期待値が理論のパラメータ$\boldsymbol{p}$に一致する場合, $\hat{\boldsymbol{p}}$は不偏推定量とよばれる．これを式で表すと

$$\langle \hat{\boldsymbol{p}} \rangle \equiv \int \mathrm{d}\boldsymbol{d}\ \hat{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{d})\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p} \tag{2.6}$$

となる.

2.2　パラメータ決定精度

宇宙論ではモンテカルロ・マルコフ連鎖法によって推定したいパラメータの事後確率分布を求めることがよく行われている．ここでは, Bayes推定に基づくパラメータ決定精度について考察する.

まず, 特定のrealizationでの事後確率分布を得たとし, それから平均$\boldsymbol{p}_0$を求めたとする（事後確率分布を最大にするものとしても結果は同じとなる）．平均値まわりで対数事後確率分布を展開しておくと

$$\begin{aligned}\ln P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d}) = \ln P(\boldsymbol{p}_0|\boldsymbol{d}) &+ \left.\frac{\partial \ln P(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i}\right|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0} (\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) \\ &+ \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)^t \left.\frac{\partial^2 \ln P(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i \partial p_j}\right|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0} (\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) + \mathcal{O}(|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0|^3)\end{aligned} \tag{2.7}$$

ここで$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0$における対数事後確率分布のHessianを$\mathbf{H}(\boldsymbol{p}_0)$とおいた．上式において$|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0|$の三次以上の寄与を無視する, すなわち事後確率分布がパラメータ$\boldsymbol{p}$ に対するGauss分布であるとする．事後確率分布は

$$P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d}) = P(\boldsymbol{p}_0|\boldsymbol{d}) \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)^t \mathbf{H}(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{d})(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)\right] \tag{2.8}$$

ただし, $\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0$に比例する項は

$$\begin{aligned} 0 &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\ (\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d}) \\ &= \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\ (\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) P(\boldsymbol{p}_0|\boldsymbol{d}) \exp\left[\alpha(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)^t \mathbf{H}(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{d})(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)\right] \end{aligned} \tag{2.9}$$

から消える.

パラメータp_1に対する事後確率分布関数は, p_1への射影

$$P(p_1|\boldsymbol{d}) = \int \mathrm{d}^{m-1} p_2 p_3 \cdots p_m\ P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d}) \tag{2.10}$$

で与えられる．この確率分布から, パラメータp_1への決定精度が求められる.

ここで, 一般にパラメータp_iに対する決定精度σ_iが$\{\{\mathbf{H}^{-1}\}_{ii}\}^{1/2}$で与えられることを示す. このために, 数理統計でよく用いられる特性関数を利用する. これは, 確率分布関数のFourier変換で与えられる：

$$\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{d}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\ P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)\cdot\boldsymbol{k}} \tag{2.11}$$

特性関数を用いる利点としては, 例えば両辺をk_iで二回微分して$\boldsymbol{k}=0$とおくことで,

$$\left.\frac{\partial^2\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{d})}{\partial k_i^2}\right|_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\ (p_i - p_{i,0})^2 P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d}) = \sigma_i^2 \tag{2.12}$$

が得られる. 異なるk_iとk_jで微分した場合は二つのパラメータの相関を表す. 今の場合, 特性関数は

$$\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{d}) = P(\boldsymbol{p}_0|\boldsymbol{d})\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\ \exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{p}^t\mathbf{H}(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{d})\boldsymbol{p} - \mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{k}\right] \tag{2.13}$$

である. 右辺の積分はGauss積分であることは, あるいは単にGauss積分のFourier変換であることから

$$\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{d}) = P(\boldsymbol{p}_0|\boldsymbol{d})\exp\left[-\frac{1}{2}\boldsymbol{k}^t\mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{d})\boldsymbol{k}\right] \tag{2.14}$$

が導かれる. したがって, $\sigma_i^2 = \{\mathbf{H}^{-1}\}_{ii}$である. あるいは一般に, パラメータ間の共分散行列は$\mathbf{H}^{-1}$である.

2.3 Fisher行列

2.3.1 決定精度の予測

パラメータの決定精度は, さらにpriorに仮定を置くことでFisher行列を用いて表すことができる. Bayseの関係式から, 対数事後確率分布のパラメータ微分は対数尤度関数のパラメータ微分に加えて対数priorのパラメータ微分で書ける：

$$\frac{\partial \ln P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d})}{\partial p_i} = \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i} + \frac{\partial \ln P(\boldsymbol{p})}{\partial p_i}\,. \tag{2.15}$$

宇宙論ではパラメータのpriorとして区間一様分布がよく仮定される. $\boldsymbol{p}_0$がこの区間に入っていれば, $\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0$においては, 対数事後確率分布のパラメータ微分と対数尤度関数のパラメータ微分は等しくなる. したがって, $\mathbf{H}$の対数事後確率分布は対数尤度関数に置き換えられる. $\mathbf{H}$の期待値, すなわち$\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})$に従う確率分布で$\boldsymbol{d}$に対し平均操作を行って得られる行列

$$F(\boldsymbol{p}_0) \equiv \langle H(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{d})\rangle = -\left\langle \left.\frac{\partial^2 \ln\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i \partial p_j}\right|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0}\right\rangle = -\left.\left\langle \frac{\partial^2 \ln\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i \partial p_j}\right\rangle\right|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0} \tag{2.16}$$

はFisher情報行列（Fisher information matrix）, あるいは単にFisher行列と呼ばれる. 上記の条件を想定すれば, 煩雑な事後確率分布を求めることなく, Fisher行列を決定精度の予測に使える.

上記の議論と同様のことを繰り返すことで, 理論予測におけるパラメータ間の共分散行列が$\mathbf{F}^{-1}$で与えられることが導かれる. そのさい, 期待されるパラメータの確率分布関数は

$$\ln P(\boldsymbol{p}) \equiv \langle \ln P(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{d})\rangle = \mathrm{const.} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)^t\mathbf{F}(\boldsymbol{p}_0)(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) \tag{2.17}$$

2.3.2　二次元楕円

二次元平面上での1σの制限の等高線を書くには, 確率分布関数の積分を行うことで, 確率が 0.68となる中心$\boldsymbol{p}_0$の二次元面を求めればよい. 具体的には, $\boldsymbol{p}_0$が原点となるように平行移動させ, Fisher行列を対角化する. このとき,

$$P = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}+\frac{y^2}{\sigma_y^2}\right)\right] \tag{2.18}$$

の確率分布関数に対する積分を実行すればよい. ただし$\sigma_i^2 = 1/\tilde{F}_{ii}$, また対角化した Fisher行列を$\tilde{F}$と表す. さらに変数変換

$$x = \sigma_x t\sin\theta\,,\quad y = \sigma_y t\cos\theta \tag{2.19}$$

を行うと,

$$\mathrm{d}x = \sigma_x(\sin\theta\mathrm{d}t + t\cos\theta\mathrm{d}\theta \tag{2.20}$$

$$\mathrm{d}y = \sigma_y(\cos\theta\mathrm{d}t - t\sin\theta\mathrm{d}\theta \tag{2.21}$$

$$|\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y| = \sigma_x\sigma_y t\mathrm{d}t\wedge\mathrm{d}\theta \tag{2.22}$$

を用いて

$$0.68 = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\int_0^s \mathrm{d}t\,\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\;\mathrm{e}^{-t^2/2}\sigma_x\sigma_y t = \int_0^s \mathrm{d}t\;t\mathrm{e}^{-t^2/2} = 1-\mathrm{e}^{-s^2/2}\,. \tag{2.23}$$

これから$s\simeq 1.51$となる. また二次元での1σに相当する楕円は,

$$(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0)^t\mathbf{F}(\boldsymbol{p}_0)(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0) = (1.51)^2 \tag{2.24}$$

で表現される.

2.3.3　情報の和

二つの独立な観測量を組み合わせて決定精度を求める場合を考える. 尤度関数は, 各々の尤度関数の積として表される. このため, 情報を組み合わせた場合のFisher行列は, 各Fisher行列の和として表される.

二つのFisher行列を足して描いた楕円は, もとの楕円の内側に必ず入る. これを確認するため, $\boldsymbol{p}_0 = \mathbf{0}$とする. $\mathbf{F} = \mathbf{F}^{(1)} + \mathbf{F}^{(2)}$の描く楕円は

$$\boldsymbol{p}^t(\mathbf{F}^{(1)}+\mathbf{F}^{(2)})\boldsymbol{p} = s^2 \tag{2.25}$$

である. これと$\mathbf{F}^{(1)}$が描く楕円の交点は

$$\boldsymbol{p}^t\mathbf{F}^{(2)}\boldsymbol{p} = 0 \tag{2.26}$$

を満たす必要があるが, 左辺はゼロとならない. 共通の中心をもち, もとの楕円より面積が小さいことから, $\mathbf{F}$が描く楕円は$\mathbf{F}^{(1)}$が描く楕円より内側に存在する. 同様に, $\mathbf{F}^{(2)}$が描く楕円より内側に存在するから, $\mathbf{F}^{(1)}$と$\mathbf{F}^{(2)}$の楕円の共通領域より内側になければならない. これはn次元でも成立する.

2.3.4　Fisher行列とスコア関数

まず, 確率分布関数$\mathcal{L}$の規格化条件（2.3）において両辺をp_iで微分すると

$$0=\int \mathrm{d}\boldsymbol{d}\ \frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i}=\int \mathrm{d}\boldsymbol{d}\ \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i}\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})=\left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i}\right\rangle \tag{2.27}$$

となる. 右辺の

$$V_i\equiv \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i} \tag{2.28}$$

はスコア関数と呼ばれる. さらにp_jで微分を行うと

$$\left\langle \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i \partial p_j}\right\rangle+\left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_i}\frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_j}\right\rangle=0 \tag{2.29}$$

が得られる. 上記の式は, Fisher行列とスコア関数を用いて

$$F_{ij}(\boldsymbol{p})=\langle V_i V_j\rangle \tag{2.30}$$

と書ける. スコア関数の平均はゼロなので, Fisher行列はスコア関数の共分散行列で表される.

2.3.5　Fisher行列とCramér-Raoの不等式

不偏推定量を用いて推定される理論パラメータの分散には最小値が存在する（Cramér-Raoの不等式）. この分散を最小分散（minimum variance）という. ここでは, その不偏推定量に対する最小分散を求める.

式（2.6）の両辺を理論のパラメータp_jで微分すると

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{d}\ \hat{p}_i \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})}{\partial p_j}\mathcal{L}(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{p})=\langle \hat{p}_i V_j\rangle=\delta_{ij} \tag{2.31}$$

が得られる. スコア関数の平均がゼロであるから, さらに$\langle(\hat{p}_i-p_i)V_j\rangle=\delta_{ij}$が成り立つ. ここで, ベクトル$\boldsymbol{A}^t\equiv(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{V})$を考える. ただし$\boldsymbol{V}$はスコア関数を一まとめにしたベクトルである. $\hat{\boldsymbol{p}}$の共分散行列を$\mathbf{P}=\langle(\hat{\boldsymbol{p}}-\boldsymbol{p})^\dagger(\hat{\boldsymbol{p}}-\boldsymbol{p})\rangle$と表すと, このベクトルの共分散行列$\boldsymbol{C}$は,

$$\mathbf{C}=\begin{pmatrix}\mathbf{P} & \mathbf{I}\\ \mathbf{I} & \mathbf{F}\end{pmatrix} \tag{2.32}$$

と書ける. $\mathbf{F}$はFisher行列, $\mathbf{I}$をN次元の単位行列である. 共分散行列は半正定値行列であるから, 任意のベクトル$\boldsymbol{U}$に対して

$${}^t\boldsymbol{U}\mathbf{C}\boldsymbol{U}\geq 0 \tag{2.33}$$

が成り立つ. ここでN次元ベクトル$\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}$を用いて

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{u}\\ \boldsymbol{v}\end{pmatrix} \tag{2.34}$$

と分解すると, 式（2.33）は

$${}^t\boldsymbol{u}\mathbf{P}\boldsymbol{u}+{}^t\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}+{}^t\boldsymbol{v}\boldsymbol{u}+{}^t\boldsymbol{v}\mathbf{F}\boldsymbol{v}\geq 0 \tag{2.35}$$

と書き直せる．この式の左辺は

$$ {}^{t}\boldsymbol{u}(\mathbf{P}-\mathbf{F}^{-1})\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{u}+\mathbf{F}\boldsymbol{v})^{t}\mathbf{F}^{-1}(\boldsymbol{u}+\mathbf{F}\boldsymbol{v})\geq 0 \tag{2.36} $$

任意の$\boldsymbol{u}$,$\boldsymbol{v}$で成り立つので，

$$ \mathbf{P}_{ii}\geq\{\mathbf{F}^{-1}\}_{ii} \tag{2.37} $$

となる．この不等式はCramer-Raoの不等式と呼ばれる．

2.4 Fisher行列の計算例

2.4.1 Gauss分布

ここで，尤度関数をGauss分布と仮定した場合のFisher行列を求める．n次元Gauss分布に対する尤度関数$\mathcal{L}$は

$$ \mathcal{L}\equiv\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n|\mathbf{C}|}}\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{d}-\langle\boldsymbol{d}\rangle)^{\dagger}\mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{d}-\langle\boldsymbol{d}\rangle)\right] \tag{2.38} $$

で与えられる．ここで，$\boldsymbol{d}$はn次元データベクトル，$\mathbf{C}$は共分散行列である．対数尤度は

$$ \ln\mathcal{L}=-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\ln\mathbf{C}+\mathbf{C}^{-1}\widehat{\mathbf{C}}) \tag{2.39} $$

と表せる [*1]．ただし$\widehat{\mathbf{C}}=(\boldsymbol{d}-\langle\boldsymbol{d}\rangle)^{\dagger}(\boldsymbol{d}-\langle\boldsymbol{d}\rangle)$である．スコア関数は

$$ V_i=\frac{\partial\ln\mathcal{L}}{\partial p_i}=-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_i}-\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_i}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\mathbf{C}}+\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\widehat{\mathbf{C}}}{\partial p_i}\right) \tag{2.40} $$

であり，さらに微分したものは

$$ \begin{aligned} -\frac{\partial^2\ln\mathcal{L}}{\partial p_i\partial p_j}=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\Big(&-\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_i}\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_j}+\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial^2\mathbf{C}}{\partial p_i\partial p_j}+\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_j}\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_i}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\mathbf{C}}\\ &-\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial^2\mathbf{C}}{\partial p_i\partial p_j}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\mathbf{C}}+\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_i}\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_j}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\mathcal{C}}-\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_i}\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\widehat{\mathbf{C}}}{\partial p_j}\\ &-\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial p_j}\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\widehat{\mathbf{C}}}{\partial p_i}+\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial^2\widehat{\mathbf{C}}}{\partial p_i\partial p_j}\Big) \end{aligned} \tag{2.41} $$

となる．Fisher行列を得るため，式 (2.41) の両辺を$\boldsymbol{d}$に関し，$\mathcal{L}(\boldsymbol{d},\boldsymbol{p})$ で平均をとる．ここで，$\widehat{\mathbf{C}}$の平均は，その定義から

$$ \langle\widehat{\mathbf{C}}\rangle=\mathbf{C} \tag{2.42} $$

となる．一方，一回微分は

$$ \left\langle\frac{\partial\widehat{\mathbf{C}}}{\partial p_i}\right\rangle=-2\left\langle(\mathbf{d}-\langle\mathbf{d}\rangle)\frac{\partial\langle\mathbf{d}^{\dagger}\rangle}{\partial p_i}\right\rangle=-2\langle\mathbf{d}-\langle\mathbf{d}\rangle\rangle\frac{\partial\langle\mathbf{d}^{\dagger}\rangle}{\partial p_i}=0 \tag{2.43} $$

[*1] カイ二乗は対数尤度を用いて$\chi^2\equiv-2\ln\mathcal{L}$と定義される．

であり, さらに二回微分は

$$\left\langle \frac{\partial^2 \widehat{\mathbf{C}}}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle = 2 \left\langle \frac{\partial \langle \mathbf{d} \rangle}{\partial p_i} \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_j} \right\rangle = 2 \frac{\partial \langle \mathbf{d} \rangle}{\partial p_i} \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_j} \tag{2.44}$$

これを用いると, 式（2.41）をFisher行列の定義式に代入することで, 尤度関数がGauss分布の場合のFisher行列

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{1}{2} \mathrm{Tr} \left(\mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_j} \right) + \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_j} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \langle \mathbf{d} \rangle}{\partial p_i} \tag{2.45}$$

が得られる.

CMB観測の場合, データベクトルを$a_{\ell m}$としてGauss型尤度関数をもとにFisher行列を導くと,

$$\mathbf{F}_{ij} = \sum_{\ell=2} \frac{2\ell+1}{2} \mathrm{Tr} \left(\mathbf{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial p_i} \mathbf{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial p_j} \right) \tag{2.46}$$

である. ここで

$$\mathbf{C}_\ell \equiv \begin{pmatrix} C_\ell^{\Theta\Theta} & C_\ell^{\Theta E} & 0 \\ C_\ell^{\Theta E} & C_\ell^{EE} & 0 \\ 0 & 0 & C_\ell^{BB} \end{pmatrix} \tag{2.47}$$

であり, p_iは理論のパラメータである. またC_ℓ^{XY}はパワースペクトルである.

2.4.2　非対角成分のみ情報をもつ場合

対角成分の微分がゼロとなる場合はフィッシャー行列を単純化できる [7]. いま

$$\mathbf{C}_\ell \equiv \begin{pmatrix} C_\ell^{EE} & C_\ell^{EB} \\ C_\ell^{EB} & C_\ell^{BB} \end{pmatrix} \tag{2.48}$$

とする. C_ℓ^{EB} の振幅 A を制限したいとする. このとき

$$\mathbf{C}_\ell^{-1} = \frac{1}{C_\ell^{EE} C_\ell^{BB}} \begin{pmatrix} C_\ell^{BB} & -C_\ell^{EB} \\ -C_\ell^{EB} & C_\ell^{EE} \end{pmatrix}, \tag{2.49}$$

となるので

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial A} &= \frac{1}{|\mathbf{C}|} \begin{pmatrix} C_\ell^{BB} & -C_\ell^{EB} \\ -C_\ell^{EB} & C_\ell^{EE} \end{pmatrix} C_\ell^{EB} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{|\mathbf{C}|} C_\ell^{EB} \begin{pmatrix} -C_\ell^{EB} & C_\ell^{BB} \\ C_\ell^{EE} & -C_\ell^{EB} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.50}$$

したがって Fisher 行列は

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{AA} &= \sum_{\ell=2} \frac{2\ell+1}{2} \frac{(C_\ell^{EB})^2}{|\mathbf{C}|^2} \mathrm{Tr} \left(\begin{pmatrix} -C_\ell^{EB} & C_\ell^{BB} \\ C_\ell^{EE} & -C_\ell^{EB} \end{pmatrix}^2 \right) \\ &= \sum_{\ell=2} \frac{2\ell+1}{2} \frac{(C_\ell^{EB})^2}{|\mathbf{C}|^2} \mathrm{Tr} \left(\begin{pmatrix} C_\ell^{EE} C_\ell^{BB} + (C_\ell^{EB})^2 & -2C_\ell^{EE} C_\ell^{EB} \\ -2C_\ell^{EE} C_\ell^{EB} & C_\ell^{EE} C_\ell^{BB} + (C_\ell^{EB})^2 \end{pmatrix} \right) \\ &= \sum_{\ell=2} (2\ell+1) \frac{(C_\ell^{EB})^2 (C_\ell^{EE} C_\ell^{BB} + (C_\ell^{EB})^2)}{[C_\ell^{EE} C_\ell^{BB} - (C_\ell^{EB})^2]^2}. \end{aligned} \tag{2.51}$$

振幅の基準値をゼロとすると

$$\mathbf{F}_{AA}=\sum_{\ell=2}(2\ell+1)\frac{(C_\ell^{EB})^2}{C_\ell^{EE}C_\ell^{BB}}\,. \tag{2.52}$$

2.4.3 Wishart分布の場合でのFisher行列

Wishart分布の場合（例えば角度パワースペクトル）, 対数尤度関数は

$$-\ln\mathcal{L}(\widehat{C}_\ell|C_\ell)=\frac{2\ell+1}{2}\left[\frac{\widehat{C}_\ell}{C_\ell}+\ln C_\ell-\frac{2\ell-1}{2\ell+1}\ln\widehat{C}_\ell\right] \tag{2.53}$$

で与えられる. これからスコア関数は

$$-\frac{\partial\ln\mathcal{L}(\widehat{C}_\ell|C_\ell)}{\partial p_i}=\frac{2\ell+1}{2}\frac{\partial C_\ell}{\partial p_i}\left[-\frac{\widehat{C}_\ell}{C_\ell^2}+\frac{1}{C_\ell}\right] \tag{2.54}$$

Fisher行列は

$$\begin{aligned}F_{ij}&=\left\langle\frac{\partial\ln\mathcal{L}(\widehat{C}_\ell|C_\ell)}{\partial p_i}\frac{\partial\ln\mathcal{L}(\widehat{C}_\ell|C_\ell)}{\partial p_j}\right\rangle\\&=\left(\frac{2\ell+1}{2}\right)^2\frac{\partial C_\ell}{\partial p_i}\frac{\partial C_\ell}{\partial p_j}\left[\frac{\langle\widehat{C}_\ell^2\rangle}{C_\ell^4}+\frac{1}{C_\ell^2}-2\frac{\langle\widehat{C}_\ell\rangle}{C_\ell^3}\right]\\&=\left(\frac{2\ell+1}{2}\right)^2\frac{1}{C_\ell^2}\frac{\partial C_\ell}{\partial p_i}\frac{\partial C_\ell}{\partial p_j}\left[\frac{2\ell+3}{2\ell+1}+1-2\right]=\frac{2\ell+1}{2}\frac{1}{C_\ell^2}\frac{\partial C_\ell}{\partial p_i}\frac{\partial C_\ell}{\partial p_j}\end{aligned} \tag{2.55}$$

となり, Gauss型の場合と等しい. これは, Wishart分布がGauss分布から確率変数を変換して得られるものであり, 確率変数の変換でFisher行列は不変であることによる. すなわち, データの変換を行っても, 母数に対する情報量は変わらないことを意味する.

Fisher行列の書き換え

上記のようにGauss場の場合, 尤度関数は式(2.45)で与えられるが, これは実は以下の式と等価である [8]:

$$F_{ij}=\sum_\ell(2\ell+1)\frac{\partial\boldsymbol{D}_\ell}{\partial p_i}^t[\mathbf{Cov}_\ell^D]^{-1}\frac{\partial\boldsymbol{D}_\ell}{\partial p_j}\,. \tag{2.56}$$

ここで $\boldsymbol{D}^t=(C_\ell^{AA},C_\ell^{AB},C_\ell^{BB})$ であり, $\mathbf{Cov}^D$ は $\boldsymbol{D}$ の共分散行列である. 具体的な計算例として, 例えば [9] が挙げられる.

上式はちょうど, データベクトルとしてパワースペクトルを選び, 平均からくる寄与を落としたものとなる. 注意として, 上式は式(2.45)と等価であり, Gauss場以外の仮定は用いていない. この点を混乱している文献がたまに見受けられる. 例えば, 平均からくる寄与を入れたり, あるいは「平均からくる寄与は十分なモードがある場合に消えるため無視する」などである.

パラメータの変換

$$F'_{ij}=\frac{\partial p_I}{\partial p'_i}F_{IJ}\frac{\partial p_J}{\partial p'_j}\,. \tag{2.57}$$

2.4.4 弱非Gauss近似：一次元

宇宙論における揺らぎは, 原始揺らぎの生成機構や重力による非線形成長によって一般には非ガウス分布に従う [10].

まずは一次元において尤度関数の Edgeworth 展開を考える：

$$\mathcal{L}(x) \equiv A[1+f(x)]\mathcal{L}^{\mathrm{G}}(x) \tag{2.58}$$

ここで $\mathcal{L}^{\mathrm{G}}$ は平均ゼロ, 分散 σ のGauss分布とする. f は高次のcumulantで表される補正項である:

$$f(x) \equiv -\frac{c_3}{3!\sigma^3}h_3(x/\sigma)+\left(\frac{c_4}{4!\sigma^4}h_4(x/\sigma)+\frac{1}{2}\frac{c_3^2}{3!\sigma^6}h_6(x/\sigma)\right)+\ldots. \tag{2.59}$$

また A は規格化因子である:

$$A=\left\{\int \mathrm{d}x\ (1+f(x))\mathcal{L}^{\mathrm{G}}(x)\right\}^{-1}. \tag{2.60}$$

ただし, すべてのcumulantが消える極限で$A \to 1$とする. スコア関数は

$$V_i=\frac{\partial \ln(1+f)}{\partial p_i}+\frac{\partial \ln \mathcal{L}^{\mathrm{G}}}{\partial p_i}+\frac{\partial \ln A}{\partial p_i} \simeq \frac{\partial f}{\partial p_i}+\frac{\partial \ln \mathcal{L}^{\mathrm{G}}}{\partial p_i} \tag{2.61}$$

である. ただし補正項は$f \ll 1$を満たすとし, Aにはp_iの依存性はないとした. 以降では, $f \ll 1$と考え, 統計平均は$\mathcal{L}^{\mathrm{G}}$で行うとする.

ここで Edgeworth 展開の一次までを考える. このとき, 補正項の微分は

$$\frac{\partial f}{\partial p_i}=-\frac{1}{6\sigma^3}h_3(x/\sigma)\frac{\partial c_3}{\partial p_i}+\frac{c_3}{6}\frac{\partial}{\partial p_i}\frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3} \tag{2.62}$$

となる. これらはxの奇数次しか含まないので, スコア関数の第一項と第二項の相関はゼロとなる. したがってFisher行列は

$$F_{ij}=\left\langle \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial p_j}\right\rangle+F_{ij}^{\mathrm{G}} \tag{2.63}$$

と表される. ただし第二項は$\mathcal{L}^{\mathrm{G}}$のFisher行列であり,

$$F_{ij}^{\mathrm{G}}=\frac{1}{2}\frac{\partial \ln \sigma^2}{\partial p_i} \tag{2.64}$$

となる. Fisher行列の第一項は

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial p_j}\right\rangle &= \frac{1}{36\sigma^6}\frac{\partial c_3}{\partial p_i}\frac{\partial c_3}{\partial p_j}\langle [h_3(x/\sigma)]^2\rangle+\frac{c_3^2}{36}\left\langle \left[\frac{\partial}{\partial p_i}\frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3}\right]\left[\frac{\partial}{\partial p_j}\frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3}\right]\right\rangle \\ &\quad -\frac{c_3}{36\sigma^3}\frac{\partial c_3}{\partial p_i}\left\langle h_3(x/\sigma)\frac{\partial}{\partial p_j}\frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3}\right\rangle-(i \leftrightarrow j)\,.\end{aligned} \tag{2.65}$$

ここで分散にはパラメータの情報は含まれないとして, その微分をゼロとする. このとき第一項のみが残る. $t=x/\sigma$として

$$\langle [h_3(t)]^2\rangle=\langle (t^3-3t)^2\rangle=\langle t^6-6t^4+9t^2\rangle \tag{2.66}$$

である. 変数変換 $x \to t$ をすることで

$$\langle \cdots \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} \tag{2.67}$$

に注意すると

$$\langle [h_3(t)]^2 \rangle = 15 - 18 + 9 = 6 \tag{2.68}$$

となる. したがって

$$F_{ij} = \frac{1}{6\sigma^6} \frac{\partial c_3}{\partial p_i} \frac{\partial c_3}{\partial p_j} + F_{ij}^{\mathrm{G}} \tag{2.69}$$

が得られる.

2.4.5 弱非 Gauss 近似：多次元

ここで, 実際の観測ではデータベクトルは多次元なので一次元の計算方法を多次元に拡張する. Edgeworth 展開した尤度関数は, 一次までを拾うと [11]

$$\mathcal{L} = (1 + f)\mathcal{L}^{\mathrm{G}} \tag{2.70}$$

ただし

$$\mathcal{L}^{\mathrm{G}} \equiv \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N |\mathbf{C}|}} \prod_{\ell m \ell' m'} \exp\left(-\frac{1}{2} a_{\ell m}^* \mathbf{C}^{-1} a_{\ell' m'} \right) \tag{2.71}$$

および

$$\begin{aligned} f &\equiv -\frac{1}{3!\mathcal{L}^{\mathrm{G}}} \sum_{\ell_i m_i} \langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} a_{\ell_3 m_3} \rangle \frac{\partial}{\partial a_{\ell_1 m_1}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_2 m_2}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_3 m_3}} \mathcal{L}^{\mathrm{G}} \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\ell_i m_i} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3}_{m_1 m_2 m_3} \left[\overline{a}_{\ell_1 m_1} \overline{a}_{\ell_2 m_2} \overline{a}_{\ell_3 m_3} - (-1)^{m_3} \left(\frac{\overline{a}_{\ell_1 m_1}}{C_{\ell_3}} \delta_{\ell_2 \ell_3} \delta_{m_2, -m_3} + (\mathrm{cyc.}) \right) \right] \end{aligned} \tag{2.72}$$

上式では, 共分散行列は対角であるとし, $\overline{a}_{\ell m} = a_{\ell m} C_{\ell m}^{-1}$, また$b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}$は Gaunt 積分 [12]

$$\mathcal{G}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3}_{m_1 m_2 m_3} \equiv \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \tag{2.73}$$

を用いて

$$\langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} a_{\ell_3 m_3} \rangle = \mathcal{G}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3}_{m_1 m_2 m_3} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \tag{2.74}$$

で定義される. Wigner-3jの性質から揺らぎの一次の項は消え,

$$f = \frac{1}{6} \sum_{\ell_i m_i} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3}_{m_1 m_2 m_3} \overline{a}_{\ell_1 m_1} \overline{a}_{\ell_2 m_2} \overline{a}_{\ell_3 m_3} \tag{2.75}$$

が導かれる.

いま, bにのみパラメータの依存性があるとすると, 非Gauss性によって生じるFisher行列への補正項は

$$F_{ij}^{f} \equiv \frac{1}{36} \sum_{\ell_i m_i \ell_i' m_i'} \frac{\partial b_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial b_{\ell_1'\ell_2'\ell_3'}}{\partial p_i} \mathcal{G}^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1m_2m_3} \mathcal{G}^{\ell_1'\ell_2'\ell_3'}_{m_1'm_2'm_3'} \langle \overline{a}_{\ell_1m_1} \cdots \overline{a}_{\ell_3'm_3'} \rangle \tag{2.76}$$

6点相関を2点に分解するさい, プライムのつくものとつかないものでペアをとらない場合はすべてWigner-3jの性質によって消える. これを利用すると, 6点相関は6個の項に分解でき, $b_{\ell_1\ell_2\ell_3} = (-1)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3} b_{\ell_1\ell_3\ell_2}$やWigner-3jの対称性を使うと, 補正項は

$$\begin{aligned}
F_{ij}^{f} &= \frac{1}{6} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3 m_1m_2m_3} \frac{\partial b_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial b_{\ell_1'\ell_2'\ell_3'}}{\partial p_i} \mathcal{G}^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1m_2m_3} \mathcal{G}^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{-m_1,-m_2,-m_3} \frac{1}{C_{\ell_1}C_{\ell_2}C_{\ell_3}} \\
&= \frac{1}{6} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} \frac{1}{C_{\ell_1}C_{\ell_2}C_{\ell_3}} \frac{\partial b_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial b_{\ell_1'\ell_2'\ell_3'}}{\partial p_i} \sum_{m_1m_2m_3} \mathcal{G}^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1m_2m_3} \mathcal{G}^{\ell_1\ell_2\ell_3}_{m_1m_2m_3} \\
&= \frac{1}{6} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} \frac{1}{C_{\ell_1}C_{\ell_2}C_{\ell_3}} \frac{\partial B_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial B_{\ell_1'\ell_2'\ell_3'}}{\partial p_i}
\end{aligned} \tag{2.77}$$

ただし

$$B_{\ell_1\ell_2\ell_3} \equiv \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} b_{\ell_1\ell_2\ell_3} \tag{2.78}$$

および

$$\sum_{m_1m_2m_3} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = 1 \tag{2.79}$$

を用いた.

2.4.6　有限観測領域でのFisher行列

実際の観測ではピクセル数は有限であり情報は有限しかない. そのため, $\ell = \ell_{\max}$より小さいスケールの情報は得られないと考えられる. また観測領域が有限の場合は, 全天に対する観測領域の割合$f_{\rm sky}$を用いて

$$F_{ij} = \sum_{\ell=2}^{\ell_{\max}} \frac{(2\ell+1)f_{\rm sky}}{2} \mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{C}_\ell}{\partial p_i} \boldsymbol{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{C}_\ell}{\partial p_j} \right) \tag{2.80}$$

2.5　系統誤差の評価

パワースペクトルの理論計算に誤りがある場合, それが伝搬してパラメータ推定にバイアスを生じる. ここでは, 誤った理論パワースペクトル$\widetilde{C}$を用いて推定した宇宙論パラメータと真の宇宙論パラメータとの差 $\delta\boldsymbol{p}$を定量的に評価する方法について述べる.

尤度関数は平均0, 共分散行列$\mathbf{C}$のGauss分布に従うとし, 共分散行列に理論のパワースペクトルが含まれている. バイアスが小さいと仮定し, 誤りを含む理論パワースペクトルをもとに計算された対数尤度$\ln\mathcal{L}'$を真のパラメータ$\overline{\boldsymbol{p}}$周りで展開して2次までの寄与をとると

$$\ln\mathcal{L}'(\boldsymbol{p}) = \ln\mathcal{L}'(\overline{\boldsymbol{p}}) + \sum_i \frac{\partial \ln\mathcal{L}'(\overline{\boldsymbol{p}})}{\partial p_i}(p_i - \overline{p}_i) + \frac{1}{2}\sum_{ij}(p_i - \overline{p}_i) \frac{\partial^2 \ln\mathcal{L}'(\overline{p})}{\partial p_i \partial p_j}(p_j - \overline{p}_j) \tag{2.81}$$

となる．バイアスされた推定量$\overline{\boldsymbol{p}}+\delta\boldsymbol{p}$は，パラメータ空間において対数尤度を最小にする．そこで，上式をさらにp^kで微分したものを考える：

$$\frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\boldsymbol{p})}{\partial p_k} = \frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\overline{\boldsymbol{p}})}{\partial p_k} + \sum_j \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}'(\overline{\boldsymbol{p}})}{\partial p_k \partial p_j}(p_j - \overline{p}_j) \tag{2.82}$$

上式に$\boldsymbol{p}=\overline{\boldsymbol{p}}+\delta\boldsymbol{p}$を代入すると左辺は消える．さらにデータに関して統計平均をとることで

$$\langle \delta V_i(\overline{\boldsymbol{p}})\rangle - \sum_j \mathbf{F}'_{ij}(\overline{\boldsymbol{p}})\delta p_j = 0 \tag{2.83}$$

となる．ここでδV_iはバイアスされたスコア関数と真のスコア関数の差，$\mathbf{F}'_{ij}$はバイアスされたFisher行列である：

$$\delta V_i(\boldsymbol{d},\boldsymbol{p}) \equiv \frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\boldsymbol{d},\boldsymbol{p})}{\partial p_i} - \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{d},\boldsymbol{p})}{\partial p_i} \tag{2.84}$$

$$\mathbf{F}'_{ij}(\boldsymbol{p}) \equiv -\left\langle \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}'(\boldsymbol{p})}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle \tag{2.85}$$

これより，

$$\delta p_i = \sum_{ij} \{\mathbf{F'}_{ij}\}^{-1} \langle \delta V_i \rangle \Big|_{\boldsymbol{p}=\overline{\boldsymbol{p}}} \tag{2.86}$$

が得られる．右辺のδV_iは，バイアスされた共分散行列$\mathbf{C}'$を用いると

$$-2\delta V_i = \mathrm{Tr}\left(\mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i} - \mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i}\mathbf{C'}^{-1}\boldsymbol{\Delta} + \mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}}{\partial p_i}\right) \tag{2.87}$$

と書けるので，

$$\begin{aligned} -2\langle \delta V_i \rangle &= \mathrm{Tr}\left(\mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i} - \mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i}\mathbf{C'}^{-1}\langle\boldsymbol{\Delta}\rangle + \mathbf{C'}^{-1}\left\langle\frac{\partial \boldsymbol{\Delta}}{\partial p_i}\right\rangle\right) \\ &= \mathrm{Tr}\left(\mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i} - \mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i}\mathbf{C'}^{-1}\mathbf{C}\right) \\ &= \mathrm{Tr}\left(-\mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_i}\mathbf{C'}^{-1}(\mathbf{C}-\mathbf{C'})\right) \end{aligned} \tag{2.88}$$

となる．ただし，$\partial\langle\boldsymbol{\Delta}\rangle/\partial p_i = 0$を用いた．これを式（2.86）に代入すると，共分散行列の差$\delta\mathbf{C} \equiv \mathbf{C}' - \mathbf{C}$を用いて

$$\delta p_i = -\sum_j \{F'_{ij}\}^{-1}\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{C'}^{-1}\frac{\partial \mathbf{C'}}{\partial p_j}\mathbf{C'}^{-1}\delta\mathbf{C}\right) \tag{2.89}$$

が得られる．

第3章

宇宙論における推定

3.1　揺らぎとその角度パワースペクトル

3.1.1　CMB観測における尤度関数

ビームパターン

　ある方向（ここではピクセル）においてCMBを検出したさい、その信号は有限の広がりをもつ。i番目のピクセルにおいて検出されるシグナルs_iは、i番目のピクセルにおける光の揺らぎX_i、i番目のピクセルにおけるビームパターンB_iを用いて

$$s_i = \int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}\ X_i(\hat{\boldsymbol{n}})B_i(\hat{\boldsymbol{n}}) \tag{3.1}$$

と表される。ここで、ビームパターンは各ピクセルごとの特性を表す。ここでは簡単のため、$\hat{\boldsymbol{n}}_i$をi番目のピクセルの方向とし、ビームパターンB_iを

$$B_i(\hat{\boldsymbol{n}}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2}\exp\left(-\frac{(\hat{\boldsymbol{n}}-\hat{\boldsymbol{n}}_i)}{2\sigma^2}\right) \tag{3.2}$$

のように（Gauss型を）仮定する。このとき、ビームパターンをFourier変換したものは

$$B_i(\boldsymbol{\ell}) = e^{-\ell^2\sigma^2} \tag{3.3}$$

となる。σは角度分解能を意味する。以降では FWHM に直した角度分解能 $\theta \equiv \sqrt{8\ln 2}\sigma$ [arcmin] を用いる。

ホワイトノイズ

　ビームパターンを角度分解能θのGauss型と仮定する。本来のシグナルXに一様なノイズn^Xが加わると、測定されるパワースペクトル$\hat{C}_\ell^{XX}$は

$$\hat{C}_\ell^{XX} = e^{-\ell^2\theta^2/8\ln 2}(C_\ell^{XX} + N_\ell^{XX}) \tag{3.4}$$

となる。ただし

$$N_\ell^{XX}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \equiv \langle n_{\ell m}^{X,*} n_{\ell m}^{X}\rangle e^{\ell^2\theta^2/8\ln 2} \tag{3.5}$$

であり、ノイズとシグナルの相関は0とした。

$\langle n_{\ell m}^{X,*} n_{\ell m}^{X} \rangle$は、揺らぎ$X$を測定するさいのノイズの統計的性質を表す。ここでは、ノイズは一様であるとする。CMBの温度$T_{\rm CMB}$を用い、感度σ_Xを

$$\frac{\sigma_X}{T_{\rm CMB}} \equiv n^X \tag{3.6}$$

と定義すると、ノイズのスペクトルN_ℓ^{XX}は

$$N_\ell^{XX}\delta_{\ell\ell'} \equiv \left(\frac{\sigma_X}{T_{\rm CMB}}\right)^2 e^{\ell^2\theta^2/8\ln 2} \tag{3.7}$$

と表せる。

複数の振動数で観測を行っている場合、複数の CMB のマップを得ることができる。それぞれから得られたデータを組み合わせることで、ノイズの寄与を小さくすることができる。iを振動数ν_iのチャンネルとして

$$\frac{1}{N} \equiv \sum_i \frac{1}{N_i} = \sqrt{\sum_{i\geq j} \frac{2}{N_i N_j (1+\delta_{ij})}} \tag{3.8}$$

と一般化されたノイズNを用いると、データを組み合わせた場合に生じるノイズの寄与が最小になる。

尤度関数

得られるデータ$\boldsymbol{D}$を、温度揺らぎ・偏光の展開係数$X_{\ell m}, Y_{\ell m}$とする。このとき、部分データベクトル

$$\boldsymbol{D}_\ell = (X_{\ell,-\ell}, X_{\ell,-\ell+1}, \ldots, X_{\ell,\ell}, Y_{\ell,-\ell}, \ldots, Y_{\ell,\ell}) \tag{3.9}$$

を用いて、データベクトルを

$$\boldsymbol{D} = \{\boldsymbol{D}_\ell\}_{\ell=2,3,\ldots} \tag{3.10}$$

と表すことにする。式（2.5）で定義される共分散行列は

$$\boldsymbol{C} = \delta_{\ell\ell'}\langle \boldsymbol{D}_\ell^\dagger \boldsymbol{D}_\ell \rangle = \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{D}_2^\dagger \boldsymbol{D}_2 \rangle & & \\ & \langle \boldsymbol{D}_3^\dagger \boldsymbol{D}_3 \rangle & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

のように、部分行列$\boldsymbol{c}_\ell \equiv \langle \boldsymbol{D}_\ell^\dagger \boldsymbol{D}_\ell \rangle (\ell = 2, 3, \ldots)$ を用いて表される。$\boldsymbol{c}_\ell$は

$$\boldsymbol{c}_\ell = \begin{pmatrix} \boldsymbol{C}_\ell^{\Theta\Theta} & \boldsymbol{C}_\ell^{\Theta E} \\ \boldsymbol{C}_\ell^{\Theta E} & \boldsymbol{C}_\ell^{EE} \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

と表される。ただし$\boldsymbol{C}_\ell^{XY}$は

$$\boldsymbol{C}_\ell^{XY} \equiv \delta_{mm'} C_\ell^{XY} = \begin{pmatrix} C_\ell^{XY} & & \\ & \ddots & \\ & & C_\ell^{XY} \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

のように、パワースペクトルC_ℓ^{XY}を対角成分にもつ$2\ell+1$次元の対角行列である。

3.1.2 角度パワースペクトルの推定

宇宙論解析において興味がある量は、揺らぎの角度パワースペクトルといった統計量である。簡単な例として、いま、観測した温度揺らぎ$\widehat{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}})$から、その角度パワースペクトルの推定量を構築することを考える。以下では、観測量、あるいは推定量にはすべて ^ をつけて区別する。$\Theta(\hat{\boldsymbol{n}})$は、宇宙論パラメータを決めた段階で得られる1 realizationの温度ゆらぎとする。観測器ノイズ(Instrumental noise)、前景輻射(Foreground)などが存在せず、$\widehat{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \Theta(\hat{\boldsymbol{n}})$と仮定する。また、異なるFourierモードが互いに独立で、各モードは平均0、分散$C_\ell^{\Theta\Theta}$のGauss分布に従うとする。

温度揺らぎの角度パワースペクトル

一様等方の場合、温度揺らぎの角度パワースペクトルは

$$\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}C_\ell^{\Theta\Theta} = \langle\Theta_{\ell m}\Theta_{\ell' m'}\rangle_\Theta\,, \tag{3.14}$$

のように定義される。

不偏性

いま、角度パワースペクトルの推定量$\widehat{C}_\ell^{\Theta\Theta}$を構築するため、条件 1 から考える。すなわち、

$$\langle\widehat{C}_\ell^{\Theta\Theta}\rangle_\Theta = C_\ell^{\Theta\Theta}\,. \tag{3.15}$$

この条件 1 を満たす推定量はいろいろとれる。例えば、単純に角度パワースペクトルの定義式(3.14)から、$-\ell \le m \le \ell$として

$$\widehat{C}_{\ell,(m)}^{\Theta\Theta} = |\widehat{\Theta}_{\ell m}|^2\,, \tag{3.16}$$

とする。このとき、各mに対し、$\widehat{C}_{\ell,(m)}^{\Theta\Theta}$は$C_\ell^{\Theta\Theta}$の不偏推定量である。

最小分散

次に最小分散について考える。(3.16)の分散より小さい推定量を構成することは可能だろうか。

■Optimal weighting 一般に、不偏性を満たす独立なn個の推定量$\widehat{X}_i$ $(i=1,\dots,n)$から、その線形結合を用いて新たに

$$\widehat{X} = \sum_{i=1,\dots,n} w_i\widehat{X}_i \tag{3.17}$$

として表される推定量を構築することを考える。このとき、不偏性、最小分散を満たすw_iは、Lagrangeの未定乗数法から

$$w_i = \frac{1}{W\sigma^2(\widehat{X}_i)}\,, \tag{3.18}$$

$$W = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\sigma^2(\widehat{X}_i)}\,. \tag{3.19}$$

また、$1/W$はestimatorの分散となる。

■最小分散をもつ温度揺らぎの角度パワースペクトルの推定量　いま、独立に$2\ell+1$個の推定量$\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{\ell,(m)}$とることができる。これらの線形結合を考えると

$$\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{\ell} = \frac{1}{2\ell+1}\sum_{m=-\ell}^{\ell}|\widehat{\Theta}_{\ell m}|^2\,. \tag{3.20}$$

3.1.3　温度揺らぎの角度パワースペクトル：最尤推定

ここでは、温度揺らぎの角度パワースペクトルを例にとり、宇宙論における最尤推定法について説明する。

例：角度パワースペクトルに対する最尤推定法

理論的に角度パワースペクトル$\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}=\{C^{\Theta\Theta}_{\ell}\}$が与えられたときに、ガウス分布に従う温度揺らぎのデータベクトル$\widehat{\boldsymbol{\Theta}}=\{\widehat{\Theta}_{\ell m}\}$を得る確率は

$$P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}) \propto \frac{1}{\sqrt{\det\mathbf{C}}}\exp\left(-\frac{1}{2}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}\right)\,. \tag{3.21}$$

ここで、$\mathbf{C}=\langle\widehat{\boldsymbol{\Theta}}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\rangle$は共分散行列であり、理論の角度パワースペクトルに依存する量である。また規格化定数は除いた。この尤度関数を最大にする角度パワースペクトル$\widehat{\boldsymbol{C}}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}$は

$$\left.\frac{\partial P(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})}{\partial C^{\Theta\Theta}_{\ell}}\right|_{\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}=\widehat{\boldsymbol{C}}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}}=0\,. \tag{3.22}$$

を満たす。あるいは、$\mathcal{L}\equiv-2\ln P$として、

$$\mathcal{L}(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}) = \mathrm{Tr}\ln\mathbf{C}+\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}+\mathrm{const.}\,, \tag{3.23}$$

を用いれば、推定量は

$$\left.\frac{\partial \mathcal{L}(\widehat{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}})}{\partial C^{\Theta\Theta}_{\ell}}\right|_{\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}=\widehat{\boldsymbol{C}}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}}=0\,, \tag{3.24}$$

を満たす。ここで、$\ln\det\mathbf{C}=\mathrm{Tr}\ln\mathbf{C}$を用いた。実際に微分すると、

$$\mathrm{Tr}\left(\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial C^{\Theta\Theta}_{\ell}}\right)-\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\mathbf{C}^{-1}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial C^{\Theta\Theta}_{\ell}}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}=0\,. \tag{3.25}$$

今、任意の行列$\mathbf{A}$に対して

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A})=\langle\widehat{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}\rangle\,, \tag{3.26}$$

が成り立つことを利用すれば、$\overline{\boldsymbol{\Theta}}=\mathbf{C}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Theta}}$ (inverse-variance filtered multipole)を用いて

$$\left\langle\overline{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial C^{\Theta\Theta}_{\ell}}\overline{\boldsymbol{\Theta}}\right\rangle-\overline{\boldsymbol{\Theta}}^{\dagger}\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial C^{\Theta\Theta}_{\ell}}\overline{\boldsymbol{\Theta}}=0\,. \tag{3.27}$$

この方程式の解が推定量$\widehat{\boldsymbol{C}}^{\boldsymbol{\Theta\Theta}}$となる。

理想的な場合

共分散行列を$\{\mathbf{C}\}_{\ell_1 m_1, \ell_2 m_2} = \delta_{\ell_1 \ell_2}\delta_{m_1 m_2} C_{\ell_1}^{\Theta\Theta}$と仮定すると、

$$\frac{2\ell+1}{C_\ell^{\Theta\Theta}} - \frac{1}{(C_\ell^{\Theta\Theta})^2}\sum_{m=-\ell}^{\ell}|\widehat{\Theta}_{\ell m}|^2 = 0\,, \tag{3.28}$$

である。この方程式を満たす最尤推定量$C_\ell^{\Theta\Theta} = \widehat{C}_\ell^{\Theta\Theta}$は式(3.20)に一致する。

より一般に、共分散行列のij成分を推定したい場合、

$$\left\langle \overline{\mathbf{\Theta}}_i^\dagger \overline{\mathbf{\Theta}}_j \right\rangle = \overline{\mathbf{\Theta}}_i^\dagger \overline{\mathbf{\Theta}}_j\,. \tag{3.29}$$

が成り立つ。両辺に共分散行列をかけていけば

$$\left\langle \mathbf{\Theta}_i^\dagger \mathbf{\Theta}_j \right\rangle = \mathbf{\Theta}_i^\dagger \mathbf{\Theta}_j\,. \tag{3.30}$$

がij成分の最尤推定になっている。

非対角な共分散行列の場合

観測領域が限定される場合、観測された揺らぎは全天での揺らぎに対して

$$\widehat{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}}) = W(\hat{\boldsymbol{n}})\Theta(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{3.31}$$

と表す。$W(\hat{\boldsymbol{n}})$は窓関数（window function）で、観測領域で1、それ以外で0をとる関数（binary mask）とする。このとき、$\widehat{\Theta}_{\ell m}$の共分散行列は対角でなくなる。実際、

$$\begin{aligned}
\widehat{\Theta}_{\ell m} &= \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{n}})W(\hat{\boldsymbol{n}})\Theta(\hat{\boldsymbol{n}}) \\
&= \sum_{LM}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{n}})Y_{LM}(\hat{\boldsymbol{n}})W(\hat{\boldsymbol{n}})\Theta_{LM} \\
&\equiv \sum_{LM} W_{\ell m LM}\Theta_{LM}\,,
\end{aligned} \tag{3.32}$$

となり、特定のモード(ℓ, m)に対し別のモード(ℓ', m')の寄与が入る。$W_{\ell m LM}$は窓関数の形状に依存する。上記の揺らぎの共分散は

$$\langle \widehat{\Theta}_{\ell m}\widehat{\Theta}_{\ell' m'}^* \rangle = \sum_L M_{\ell m \ell' m' L} C_L^{\Theta\Theta}\,, \tag{3.33}$$

となる。Apodizationで$W_{\ell m LM} \sim \delta_{\ell L}\delta_{mM}$と振る舞う場合、

$$\begin{aligned}
\widehat{\Theta}_{\ell m} &\simeq \Theta_{\ell m}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ W(\hat{\boldsymbol{n}})\sum_{LM} Y_{LM}^*(\hat{\boldsymbol{n}})Y_{LM}(\hat{\boldsymbol{n}}) \\
&= \Theta_{\ell m}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ W(\hat{\boldsymbol{n}}) \\
&= W_1\Theta_{\ell m}\,,
\end{aligned} \tag{3.34}$$

ここで

$$W_n \equiv \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ W^n(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{3.35}$$

一般にn点相関に対しては、W_nをかけることで近似的な表式となる。したがって、角度パワースペクトルの推定量として式(3.20)をW_2で割ったものを近似的に使うことができる。

3.1.4　銀河サーベイ

ノイズ

ここでは、銀河の空間分布から数密度揺らぎを推定する場合、および銀河のシアを推定する場合のノイズについて考察する。

銀河数密度の場合をまず考える。ある微小体積を考え、その中での銀河の数密度を$n(\boldsymbol{x})$とする。いま、この揺らぎの推定量として

$$\widehat{\delta}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\bar{n}} n(\boldsymbol{x}) - 1 \tag{3.36}$$

を考えてみる。ただし$\bar{n}$は全天での銀河数である。この推定量の統計平均は0である。このフーリエ変換は

$$\widehat{\delta}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\bar{n}} \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{k}}\, n(\boldsymbol{x}) \tag{3.37}$$

である。ただし$k=0$のモードは無視する。ここで、密度揺らぎがない場合、異なる座標の銀河数密度は各宇宙において独立に、かつ同じ確率分布で決まると考えられる。2つの領域での数密度の相関は

$$\langle n(\boldsymbol{x}) n(\boldsymbol{x}') \rangle = \sigma^2 \delta_D^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{3.38}$$

となる。分散σ^2は、ある特定の領域の銀河数を考えることで

$$\langle [n(\boldsymbol{x}) d^3\boldsymbol{x}][n(\boldsymbol{x}') d^3\boldsymbol{x}'] \rangle = \left\langle \sum_{i\in\boldsymbol{x}} \sum_{j\in\boldsymbol{x}'} \right\rangle = d^3\boldsymbol{x}' \delta_D^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \sum_{i\in\boldsymbol{x}} = n(\boldsymbol{x}) d^3\boldsymbol{x} d^3\boldsymbol{x}' \delta_D^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{3.39}$$

となることを使い、両辺を積分することで

$$N = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\ n(\boldsymbol{x}) = \sigma^2 \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{3.40}$$

すなわち$\sigma^2 = \bar{n}$である。このとき、異なるフーリエモードの相関は

$$\langle \widehat{\delta}_{\boldsymbol{k}} \widehat{\delta}^*_{\boldsymbol{k}'} \rangle = \frac{1}{\bar{n}} \delta_D^3(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \tag{3.41}$$

となる。これは銀河分布の推定におけるショットノイズである。

次に、銀河シアのノイズを考える。シアの場合は、もともとの銀河の形状が歪んでいるのでそれをエラーとして計上する。シグナルがないとした場合、推定量は

$$\widehat{\gamma}(\boldsymbol{x}) = \epsilon(\boldsymbol{x}) \tag{3.42}$$

である。数密度と同様に推定量をフーリエ変換し、その分散を考える。シアの形状ノイズは、各銀河でそれぞれ独立であり、かつ同じ確率分布に従うとする。このとき、

$$\langle \epsilon(\boldsymbol{x}) \epsilon(\boldsymbol{x}') \rangle = \sigma^2 \delta_D^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{3.43}$$

である。ある特定の領域の銀河数を考えることで

$$\langle[\epsilon(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}][\epsilon(\boldsymbol{x}')d^3\boldsymbol{x}']\rangle = \left[\sum_{i\in\boldsymbol{x}}\sum_{j\in\boldsymbol{x}'}\right]^{-1}\left\langle\sum_{i\in\boldsymbol{x}}e_i\sum_{j\in\boldsymbol{x}'}e_j\right\rangle$$
$$= \sigma_{\rm int}^2 d^3\boldsymbol{x}'\delta_D^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\left[\sum_{i\in\boldsymbol{x}}\right]^{-1} = \sigma_{\rm int}^2 n^{-1}(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{x}'\delta_D^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \quad (3.44)$$

数密度の場合と同様にして

$$\sigma_{\rm int}^2\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \ = \sigma^2\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\ n(\boldsymbol{x}) \quad (3.45)$$

すなわち$\sigma^2 = \sigma_{\rm int}^2/\bar{n}$

重み関数

銀河サーベイで得られた分布に適度な重み$W(z)$をつけ、S/Nの最大化を考える。推定量は

$$\widehat{\delta}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \int \mathrm{d}z\ W(z)\delta(z,\hat{\boldsymbol{n}}) \quad (3.46)$$

である。この推定量の分散を最小にし、かつ

$$\int \mathrm{d}z\ W(z) = 1 \quad (3.47)$$

を満たすように$W(z)$を決める。分散としてショットノイズのみを考えると、

$$\langle|\widehat{\delta}(\hat{\boldsymbol{n}})|^2\rangle = \int \mathrm{d}z\ \frac{1}{n(z)}W^2(z) \quad (3.48)$$

である。ただし$n(z)$は奥行き方向の銀河分布である。ラグランジュの未定乗数λを用いて

$$F(W) = \int \mathrm{d}z\ \frac{1}{n(z)}W^2(z) + \lambda\left(\int \mathrm{d}z\ W(z) - 1\right) \quad (3.49)$$

を最小にするWは

$$W(z) = \frac{\lambda}{2}n(z) = \frac{n(z)}{N} \quad (3.50)$$

となる。ただしNは$n(z)$の積分である。$W(z)$は、奥行き方向の銀河分布を1に規格化したものとなる。

Forecast では, 銀河の赤方偏移分布として以下の規格化された形を仮定することが多い:

$$W(z) = \frac{\beta}{z_0^{\alpha+1}\Gamma[(\alpha+1)/\beta]}z^\alpha \exp\left[-\left(\frac{z}{z_0}\right)^\beta\right] \quad (3.51)$$

ここで平均赤方偏移は

$$z_m = \int_0^\infty \mathrm{d}z\ zW(z) = \frac{\Gamma[(\alpha+2)/\beta]}{\Gamma[(\alpha+1)/\beta]}z_0\,. \quad (3.52)$$

3.2　CMBの重力レンズ効果

3.2.1　レンズ場の推定：Quadratic近似

レンズ場推定法の基本的アイデアは、Zaldarriaga & Seljak (1998) [13]において見受けられる。現在使われている方法は、Hu & Okamoto (2002) の二点推定量（quadratic estimator）[14]に基づき、種々の改良を行い利用されている。

重力レンズによる非等方性

重力レンズ効果を受けた揺らぎは

$$\widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}} = \Theta_{\boldsymbol{\ell}} - \sum_{x=\phi,\varpi} \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} [(\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}) \odot_x \boldsymbol{L}] x_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} \Theta_{\boldsymbol{L}} + \mathcal{O}(x_{\boldsymbol{\ell}}^2) \,. \tag{3.53}$$

となる。重力レンズにより、温度揺らぎの異なるフーリエモードが混じる。

レンズ場推定量の不偏性

いま推定したい量は、我々の宇宙におけるレンズ場$x_{\boldsymbol{\ell}}$である。この推定量$\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}$は、重力レンズを受ける前の温度揺らぎはある確率分布に従って生成されるため、

$$\langle \widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}} \rangle_{\mathrm{CMB}} = x_{\boldsymbol{\ell}} \,, \tag{3.54}$$

が条件1となる。

不偏性を満たす推定量の候補

1 realization のレンズ場は、光源である温度揺らぎを非等方に歪める。そこで、$\boldsymbol{\ell} \neq \mathbf{0}$として、異なるモードの相関に着目すると、

$$\langle \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} \rangle_{\mathrm{CMB}} = \sum_{x=\phi,\varpi} x_{\boldsymbol{\ell}} f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} \,. \tag{3.55}$$

ただし

$$f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} = [\boldsymbol{\ell} \odot_x \boldsymbol{L}] C_L^{\Theta\Theta} + [\boldsymbol{\ell} \odot_x (\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L})] C^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|} \,. \tag{3.56}$$

これから、

$$x_{\boldsymbol{\ell}} = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} A_{\boldsymbol{\ell}} f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} \langle \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} \rangle_{\mathrm{CMB}} \,; \qquad A_{\boldsymbol{\ell}} = \left\{ \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} (f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}})^2 \right\}^{-1} \,. \tag{3.57}$$

以上に基づくと、推定量の候補として以下の二点推定量

$$\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}} = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} A_{\boldsymbol{\ell}} f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} \,. \tag{3.58}$$

などが考えられる。しかし実際には、以下のようにして、この推定量に比べてさらにノイズの寄与を小さくすることが可能である。

分散の抑制

より一般化した二点推定量を考えてみる：

$$\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}} = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} \,. \tag{3.59}$$

ここで、重み関数$F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}}$は、以下の二条件を満たす必要がある：

1. 不偏推定量であることから、$x_{\boldsymbol{\ell}} = \langle \widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}} \rangle_{\mathrm{CMB}}$、あるいは

$$x_{\boldsymbol{\ell}} = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} \sum_{x'=\phi,\varpi} x'_{\boldsymbol{\ell}} f^{x'}_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} \,. \tag{3.60}$$

   すなわち、

$$\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} f^{x'}_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} = \delta^{xx'} \,. \tag{3.61}$$

2. 関数形を適切に選ぶことで、推定量におけるノイズの寄与をできるだけ小さくしたい。つまり

$$\frac{\delta}{\delta F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}}} \langle |\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}|^2 \rangle_{\mathrm{CMB}} = 0 \,. \tag{3.62}$$

この2条件を満たす関数形$F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}}$は、以下のようにして一意に決まる。ノイズの分散は

$$\begin{aligned} N_\ell = \langle |\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}|^2 \rangle &= \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}'}{(2\pi)^2} F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}'} \langle \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} \widetilde{\Theta}^*_{\boldsymbol{L}'} \widetilde{\Theta}^*_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}'} \rangle \\ &\simeq \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} (F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} + F^x_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}) \widetilde{C}^{\Theta\Theta}_L \widetilde{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|} \,. \end{aligned} \tag{3.63}$$

ただし、レンズを受けた4点相関は、Gaussianの部分(disconnected part)だけを取り出した。普遍性を満たし、かつノイズN_ℓの Gaussian 部分(Gaussian bias）を最小にする$F^x_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}$の関数形は、Lagrangeの未定乗数法を用いることで

$$F^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}} = A^x_\ell \frac{f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}}}{2\widetilde{C}^{\Theta\Theta}_L \widetilde{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|}} \,; \qquad A^x_\ell = \left\{ \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2} \frac{(f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{L}})^2}{2\widetilde{C}^{\Theta\Theta}_L \widetilde{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|}} \right\}^{-1} \,. \tag{3.64}$$

となることが分かる。

実際には式(3.63)におけるGaussian以外の寄与は大きく、Planckやそれ以上の重力レンズに感度を持つ CMB観測ではこれらの寄与は無視できなくなる[15, 16]。

3.2.2　Bias hardened estimator

ここでは、重力レンズ以外のモード相関から生じる系統誤差を取り除く方法について述べる[17]。

Mean-field bias

二点推定量の導出過程では、重力レンズ以外のモード相関の影響がないことを仮定している。そこで、例えば以下のようにマスク型の系統誤差（地球の固有運動、非等方再イオン化など）がある場合を考える：

$$\widehat{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}}) = (1+\epsilon(\hat{\boldsymbol{n}}))\widetilde{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{3.65}$$

ただし、ϵは、その二次以上が無視できる微小量とする。このとき、

$$\widehat{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}} = \widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}} + \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2}\epsilon_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}\widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}}\,, \tag{3.66}$$

であり、$\boldsymbol{\ell}\neq 0$として

$$\langle \widehat{\Theta}_{\boldsymbol{L}}\widehat{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}\rangle = (\widetilde{C}^{\Theta\Theta}_{L} + \widetilde{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|}\epsilon_{\boldsymbol{\ell}} \equiv f^{\epsilon}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}\epsilon_{\boldsymbol{\ell}}\,, \tag{3.67}$$

が得られる。この式から、レンズ場二点推定量の統計平均をとると

$$\langle \widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}\rangle_{\mathrm{CMB}} = x_{\boldsymbol{\ell}} + R^{x,\epsilon}_{\ell}\epsilon_{\boldsymbol{\ell}}\,, \qquad R^{x,\epsilon}_{\ell} = A^{xx}_{\ell}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2}\frac{f^{x}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}f^{\epsilon}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}}{\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{L}\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|}}\,. \tag{3.68}$$

となる。すなわち、$\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}$は不偏推定量になっていない。第二項は平均場バイアス（mean-field bias）と呼ばれる。このため、平均場バイアスを何かしらの方法で見積もる必要が出てくる。

Bias-hardened estimator: Mask-type distortion

まず、重力レンズと同じようにしてϵの推定量を構築できる：

$$\langle \widehat{\epsilon}_{\boldsymbol{\ell}}\rangle_{\mathrm{CMB}} = \epsilon_{\boldsymbol{\ell}} + R^{\epsilon,x}_{\ell}x_{\boldsymbol{\ell}}\,. \tag{3.69}$$

ただし

$$A^{a,b}_{\ell} = \left\{\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2}\frac{f^{a}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}f^{b}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}}{\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{L}\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|}}\right\}^{-1}; \qquad R^{a,b}_{\ell} = \frac{A^{a,a}_{\ell}}{A^{a,b}_{\ell}}\,. \tag{3.70}$$

ϵに対する推定量も平均場バイアスを含む。そこで、$\widehat{x}$の平均場バイアスと相殺するように $x_{\boldsymbol{\ell}}$の推定量を定義しなおす：

$$\widehat{x}^{\mathrm{BHE}}_{\boldsymbol{\ell}} = \frac{\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}} - R^{x,\epsilon}_{\ell}\widehat{\epsilon}_{\boldsymbol{\ell}}}{1-R^{\epsilon,x}_{\ell}R^{x,\epsilon}_{\ell}}\,. \tag{3.71}$$

Bias-hardened estimator: Point-source type distortion

同様のことは、unresolved point source や非一様ノイズ、非対称ビームがある場合にも行える。unresolved point source の場合は、

$$\widehat{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \widetilde{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}}) + n(\hat{\boldsymbol{n}})\,, \tag{3.72}$$

と書ける。$n(\hat{\boldsymbol{n}})$は、その点にける点光源の寄与であり、そこに点光源ができる確率は他の点と相関がないとする（すなわちPoisson的である）。この場合に生じる平均場バイアスは

$$\langle \widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}\rangle_{\mathrm{CMB}} = x_{\boldsymbol{\ell}} + R^{x,s}_{\ell}s_{\boldsymbol{\ell}}\,, \qquad R^{x,s}_{\ell} = A^{xx}_{\ell}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2}\frac{f^{x}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}f^{s}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}}{\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{L}\widehat{C}^{\Theta\Theta}_{|\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}|}}\,. \tag{3.73}$$

ただし$s(\hat{\boldsymbol{n}})=\langle n^2(\hat{\boldsymbol{n}})\rangle$、および$f^s_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}=1$である。これから、式(3.71)と同様の手続きを行うことで、平均場バイアスの影響を受けない推定量を構成できる。

マスクによる平均場バイアス

上記の推定法は、known source に対しても利用できる。例えば、点光源マスクや有限観測領域の影響といった、ϵの形が分かっている場合には、Monte Carlo シミュレーションなどに基づいて、その平均場バイアスが推定される。しかし、Monte Carlo シミュレーションに基づく方法の信頼性は、生成された擬似マップが観測されたマップをどの程度再現できているかに依存する。この信頼性をチェックする方法として、bias-hardened estimatorで得られた結果と比較を行い、一致するかどうか調べることが考えられる[17]。Bias-hardened estimatorにおいても、角度パワースペクトルの推定によっては系統誤差が生じるため、異なる手法によるcross checkを行うのが望ましいと考えられる。

3.2.3　レンズ場に対する最尤推定法

レンズ場二点推定量は、最尤推定法を簡略化することでも導くことができる[18]. ここでは温度揺らぎの場合に着目してその説明を行う。

確率分布関数

重力レンズ場$x_{\boldsymbol{\ell}}$と角度パワースペクトルが与えられたもとで、重力レンズを受けた温度揺らぎ$\widehat{\Theta}(\hat{\boldsymbol{n}})$を得る確率は、重力レンズを受ける前の揺らぎがガウス統計であることを仮定すると、

$$\mathcal{L}(\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}|\boldsymbol{x})=\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}^\dagger[\mathbf{C}(\boldsymbol{x})]^{-1}\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}-\mathrm{Tr}\ln[\mathbf{C}(\boldsymbol{x})]^{-1}+\mathrm{const.}\,. \tag{3.74}$$

ただし、共分散行列は、重力レンズを受ける前の温度揺らぎに対する統計平均$\langle\cdots\rangle_{\rm CMB}$を用いて、

$$\{\mathbf{C}\}_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}'}=\langle\widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}}\widetilde{\Theta}^*_{\boldsymbol{\ell}'}\rangle_{\rm CMB}=\delta_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}'}C_\ell^{\Theta\Theta}+f^x_{\boldsymbol{\ell}+\boldsymbol{\ell}',\boldsymbol{\ell}}x_{\boldsymbol{\ell}+\boldsymbol{\ell}'}+\mathcal{O}(x^2)\,. \tag{3.75}$$

したがって

$$\frac{\partial\{\mathbf{C}\}_{\boldsymbol{\ell}_1,\boldsymbol{\ell}_2}}{\partial x_{\boldsymbol{L}}}=f^x_{\boldsymbol{L},\boldsymbol{\ell}_1}\delta_{\boldsymbol{L}-\boldsymbol{\ell}_1-\boldsymbol{\ell}_2}+\mathcal{O}(x)\,. \tag{3.76}$$

となる。

最尤推定

温度揺らぎの角度パワースペクトルの場合と同じ議論を行うことで、$x_{\boldsymbol{L}}$に対する推定量が満たす式が得られる：

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_{\boldsymbol{L}}}(\widehat{x}_{\boldsymbol{L}})=\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}}(\widehat{x}_{\boldsymbol{L}})-\langle\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}}(\widehat{x}_{\boldsymbol{L}})\rangle=0\,. \tag{3.77}$$

ここで

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}}\equiv\overline{\boldsymbol{\Theta}}^\dagger\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial x_{\boldsymbol{L}}}\overline{\boldsymbol{\Theta}}=\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}_1}{(2\pi)^2}\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}_2}{(2\pi)^2}\overline{\boldsymbol{\Theta}}^\dagger_{\boldsymbol{\ell}_1}\frac{\partial\mathbf{C}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2}}{\partial x_{\boldsymbol{\ell}}}\overline{\boldsymbol{\Theta}}_{\boldsymbol{\ell}_2}=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}}{(2\pi)^2}f^x_{\boldsymbol{L},\boldsymbol{\ell}}\overline{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}}\overline{\Theta}_{\boldsymbol{L}-\boldsymbol{\ell}}+\mathcal{O}(x)\,. \tag{3.78}$$

式(3.77)から、$x_{\boldsymbol{L}}$を求めるには陰関数に対する解法を用いる。例えば、ニュートン法であれば、$\delta x_{\boldsymbol{L}} = x^{n+1}_{\boldsymbol{L}} - x^n_{\boldsymbol{L}}$として

$$\delta x_{\boldsymbol{L}} = -\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}'}{(2\pi)^2} \left[\frac{\partial^2\mathcal{L}}{\partial x_{\boldsymbol{L}}\partial x_{\boldsymbol{L}'}}\right]^{-1} \left.\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_{\boldsymbol{L}'}}\right|_{x=x^n} . \tag{3.79}$$

二点推定との関係

さらに簡単化するため、規格化を統計平均で置き換えると

$$-\left\langle\frac{\partial^2\mathcal{L}(x^n)}{\partial x_{\boldsymbol{L}}\partial x_{\boldsymbol{L}'}}\right\rangle = \left\langle\frac{\partial\mathcal{L}(x^n)}{\partial x_{\boldsymbol{L}}}\frac{\partial\mathcal{L}(x^n)}{\partial x_{\boldsymbol{L}'}}\right\rangle = [\langle\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}}\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}'}\rangle - \langle\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}}\rangle\langle\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}'}\rangle]_{x^n} = \mathcal{F}_{\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}'}(x^n) . \tag{3.80}$$

これを用いると

$$\delta x_{\boldsymbol{L}} = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}'}{(2\pi)^2}\mathcal{F}^{-1}_{\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}'}[\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}'} - \langle\mathcal{H}_{\boldsymbol{L}'}\rangle]_{x^n} . \tag{3.81}$$

さらに$x^n = \phi$、$\delta x = 0$とすると、右辺の平均場から規格化されていない ϕがでてくるので、ϕ以外の平均場がないとすれば

$$\widehat{x}^{\mathrm{S}}_{\boldsymbol{L}} = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}'}{(2\pi)^2}\mathcal{F}^{-1}_{\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}'}\frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}}{(2\pi)^2} f^x_{\boldsymbol{L}'\boldsymbol{\ell}}\overline{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}}\overline{\Theta}_{\boldsymbol{L}'-\boldsymbol{\ell}} . \tag{3.82}$$

が導かれる。すなわち、二点推定は$x = \phi$における尤度関数を二次微分まで展開して（ガウス分布で近似して）推定している。

二点推定量の導出過程との比較

最尤推定では、重力レンズを受けた温度揺らぎのパワースペクトルが出てこない。これは、「余分な寄与」の定義が二点推定におけるそれと異なることによる。二点推定では、**重力レンズを受けた**後のCMB揺らぎのばらつきはノイズとして寄与する。これにより、重力レンズの推定は線形の連立方程式を解くことになり、ある程度簡略化される。一方、最尤推定では重力レンズを受けた温度揺らぎに含まれる重力レンズ効果も情報として取り出され、こちらのほうが情報量が多くなる。このとき、ノイズとして寄与するのは**重力レンズを受ける前**のCMB揺らぎのばらつきである。ただし、計算を行う際には一般に非線形な連立方程式を解く必要があり、反復計算が必要となる。

二点推定量との違いは、偏光を用いた場合に顕著である。小角度スケールにおけるBモード偏光の主成分は重力レンズ効果で生じるため、二点推定量と最尤推定におけるノイズが大きく異なる。上で述べたように、二点推定ではレンズを受けた後のCMB揺らぎが、最尤推定ではレンズを受ける前のCMB揺らぎがそれぞれノイズとして寄与する。Bモード偏光を使う場合、二点推定は重力起源Bモードによるノイズが生じるのに対し、最尤推定ではこのノイズがない。Planck程度の偏光観測ではほとんど違いが出ないが、小角度スケールに感度のある実験においては、最尤推定を用いることで検出精度が飛躍的に向上する。

それでは、理想的な極限（観測機器由来のノイズなし、全天観測など）では、最尤推定におけるノイズはゼロになるかというとそうではない。単純なマッピングで記述される重力レンズ起源Bモード以外に、多重散乱による寄与、重力ポテンシャルの非線形成長によるカールモードの存在によって限界がある。これらも同時推定すればよいのでは、となるが、自由度の観点から、すくなくとも有限ピクセル数では不可能だと考えられる。注意として、実はここらへんの議論は未だ収束していない（例えば、勾配、カールが両方ある場合の原理的限界はどうなっているのか、など）。

Bias-hardened estimator との関連

最尤推定法の観点では、bias-hardened estimator は平均場バイアスを生じる場に対し同時推定することを意味し、その簡略化した推定法が、すでに導いたものとなっている。もし、ϵやnの高次の寄与が効いてくる場合には、簡略化した方法は使えず、反復計算などを用いる必要がある。

3.2.4 レンズ場の角度パワースペクトルの推定

二点推定で求めたレンズ場から、レンズ場の角度パワースペクトルを推定する方法を考える。

レンズ場高次のバイアス

レンズ場の推定量の自乗期待値は

$$\langle|\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}|^2\rangle = \int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}}{(2\pi)^2}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{L}'}{(2\pi)^2}\langle\widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{L}}\widetilde{\Theta}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}\widetilde{\Theta}^*_{\boldsymbol{L}'}\widetilde{\Theta}^*_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}'}\rangle\,. \tag{3.83}$$

これを

$$\langle|\widehat{x}_{\boldsymbol{\ell}}|^2\rangle = N^{x,(0)}_\ell + C^{xx}_\ell + N^{(1),x}_\ell + N^{(2),x}_\ell + \cdots\,, \tag{3.84}$$

と形式的に分解する。ここで$N^{x,(0)}_\ell = A^{xx}_\ell$であり、$N^{(j),x}_\ell, (j\geq 1)$は、左辺から$N^{x,(0)}_\ell + C^{xx}_\ell$を引いた残りの寄与のうち、$C^{xx}_\ell$の$j$次の寄与を含むものである。

定義より、$N^{(1)}_\ell$は、4点相関のうち

$$\begin{aligned}
&\langle\langle\Theta_{\boldsymbol{L}}\Theta^*_{\boldsymbol{L}'}\rangle_{\rm CMB}\langle\Theta_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}\Theta^*_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}'}\rangle_{\rm CMB}\rangle + \langle\langle\Theta_{\boldsymbol{L}}\Theta^*_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}'}\rangle_{\rm CMB}\langle\Theta_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}\Theta^*_{\boldsymbol{L}'}\rangle_{\rm CMB}\rangle \\
&= C^{xx}_{|\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}'|}f^x_{\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}',\boldsymbol{L}}f^x_{\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}',\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}} + C^{xx}_{|\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}'-\boldsymbol{\ell}|}f^x_{\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}'-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{L}}f^x_{\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}'-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{L}}\,,
\end{aligned} \tag{3.85}$$

から出てくる。

尤度推定を用いたレンズ場パワースペクトルの推定

重力レンズ場の角度パワースペクトルは、最尤推定法でも求めることができる[17]。この推定法は、上述の二点推定による方法に比べてより信頼性が高く、かつより検出精度の良い方法となっている。

重力レンズを受けた揺らぎの確率分布は、ガウス統計から少しずれたものになる。一般論として、いまガウス統計からずれた確率分布に従うある確率変数aを考える。その4点相関の寄与を考えると、確率分布関数は

$$P(a) = \left[1 + \sum_{\boldsymbol{\ell}_i}\kappa^{(4)}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4}\frac{\partial}{\partial a_{\boldsymbol{\ell}_1}}\frac{\partial}{\partial a_{\boldsymbol{\ell}_2}}\frac{\partial}{\partial a_{\boldsymbol{\ell}_3}}\frac{\partial}{\partial a_{\boldsymbol{\ell}_4}}\right]P_{\rm g}(a)\,, \tag{3.86}$$

これから、共分散行列を$\mathbf{C}$として

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}(a) &= \frac{P(a)}{P_{\rm g}(a)} \\
&= 1 + \sum_{\boldsymbol{\ell}_i}\kappa^{(4)}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4}\{\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_1}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_2}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_4} - [\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_4} + (5\text{ perm.})] + [\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2}\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4} + (2\text{ perm.})]\} \\
&= 1 + \sum_{\boldsymbol{\ell}_i}\kappa^{(4)}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4}(\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_1}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_2}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_4} - 6\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_4} + 3\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2}\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4})\,.
\end{aligned} \tag{3.87}$$

ただし$\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}} = \sum_{\boldsymbol{\ell}'} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{\ell}'} a_{\boldsymbol{\ell}'}$である。 $a = \widetilde{\Theta}$とすると、4次のキュムラントは

$$\begin{aligned}\kappa^{(4)}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4} &= f_{\boldsymbol{\ell}_{12}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell}_{12},\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{\phi\phi}_{|\boldsymbol{\ell}_{12}|} \delta_{\boldsymbol{\ell}_{12},-\boldsymbol{\ell}_{34}} + f_{\boldsymbol{\ell}_{13}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell}_{13},\boldsymbol{\ell}_2} \mathbf{C}^{\phi\phi}_{|\boldsymbol{\ell}_{13}|} \delta_{\boldsymbol{\ell}_{13},-\boldsymbol{\ell}_{24}} \\ &\quad + f_{\boldsymbol{\ell}_{14}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell}_{14},\boldsymbol{\ell}_2} \mathbf{C}^{\phi\phi}_{|\boldsymbol{\ell}_{14}|} \delta_{\boldsymbol{\ell}_{14},-\boldsymbol{\ell}_{23}} + \mathcal{O}(|\phi|^4)\,, \end{aligned} \tag{3.88}$$

と書ける。ここで$\boldsymbol{\ell}_{ij} = \boldsymbol{\ell}_i + \boldsymbol{\ell}_j$である。これを用いると

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(a) = 1 + 3\sum_{\boldsymbol{\ell}_i} \{ & f_{\boldsymbol{\ell}_{12}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell}_{34},\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{\phi\phi}_{|\boldsymbol{\ell}_{12}|} \delta_{\boldsymbol{\ell}_{12}\boldsymbol{\ell}_{34}} \bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_1}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_2}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_4} \\ & + \kappa^{(4)}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4} [-2\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2} \bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_4} + \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_2}\mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_3\boldsymbol{\ell}_4}]\}\,, \end{aligned} \tag{3.89}$$

が得られる。

最尤推定法に基づくレンズ場角度パワースペクトルの推定量は、

$$\frac{\partial \mathcal{R}(a)}{\partial C^{xx}_\ell} = 0\,, \tag{3.90}$$

の解である。$\mathcal{R}(a)$ を C^{xx}_ℓで展開すると

$$\mathcal{R}(a) = 1 + \sum_{\boldsymbol{\ell}} \mathcal{L}^{(1)}_\ell C^{xx}_\ell + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}'} \mathcal{L}^{(2)}_{\ell\ell'} C^{xx}_\ell C^{xx}_{\ell'} + \mathcal{O}([C^{xx}_\ell]^3)\,, \tag{3.91}$$

ここで

$$\mathcal{L}^{(1)}_\ell = \left.\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C^{xx}_\ell}\right|_{C^{xx}_\ell=0}, \qquad \mathcal{L}^{(2)}_{\ell\ell'} = \left.\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial C^{xx}_\ell \partial C^{xx}_{\ell'}}\right|_{C^{xx}_\ell=0}. \tag{3.92}$$

これより

$$\hat{C}^{xx}_\ell = \sum_{\ell'} \{\boldsymbol{\mathcal{L}}^{(2)}\}^{-1}_{\ell\ell'} \mathcal{L}^{(1)}_{\ell'}\,. \tag{3.93}$$

まずは$\mathcal{L}^{(1)}$を評価する。4次のキュムラントの式を用いると、

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{(1)}_\ell = 3\sum_{\boldsymbol{\ell}_1,\boldsymbol{\ell}_3} \{ & f_{\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}_3} \bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_1}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_1}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{-\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_3} \\ & - 2[f_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1,\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_1} \bar{a}_{\boldsymbol{\ell}_3}\bar{a}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_3} + 2 f_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_3} \bar{a}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_1}\bar{a}_{-\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_3}] \\ & + f_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1,\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_1} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_3,\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_3} + 2 f_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{\ell}_1} f_{-\boldsymbol{\ell},\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}_1\boldsymbol{\ell}_3} \mathbf{C}^{-1}_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_1,-\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}_3}\}\,. \end{aligned} \tag{3.94}$$

が得られる。規格化されていないレンズ場二点推定量

$$\overline{x}^{aa'}_{\boldsymbol{\ell}} = \sum_{\boldsymbol{\ell}'} f^x_{\boldsymbol{\ell}\boldsymbol{\ell}'} \bar{a}_{\boldsymbol{\ell}'} \bar{a}'_{\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}'} \tag{3.95}$$

で書き直すと

$$\mathcal{L}^{(1)}_\ell \propto |\overline{x}^{aa}_{\boldsymbol{\ell}}|^2 - 2(\langle 2|\overline{x}^{aa_1}_{\boldsymbol{\ell}}|^2 - |\overline{x}^{a_1a_2}|^2\rangle_{1,2})\,. \tag{3.96}$$

ただし、平均場バイアスはゼロとした。またa_1, a_2は$\mathbf{C}$を共分散にもつランダムな変数である。$\langle\cdots\rangle_{1,2}$はこれらに対する統計平均である。第一項は単に二点推定量のパワースペクトルである。それにノイズ除去を意味する第二項が加わっている。ノイズ項は観測量に依存している。この方法を用いることで、共分散行列に含まれる不定性の影響を受けづらくなる[17]。

規格化$\mathcal{L}^{(2)}$は、二階微分を評価するのは困難であるため、以下のように統計平均で置き換える：

$$\mathcal{L}^{(2)}_{\ell\ell'} \to \langle \mathcal{L}^{(2)}_{\ell\ell'} \rangle = \langle \mathcal{L}^{(1)}_{\ell} \mathcal{L}^{(1)}_{\ell'} \rangle \Big|_{C^{xx}_\ell = 0} . \tag{3.97}$$

規格化はフィッシャー情報行列である。厳密な規格化は複雑であるが、計算可能とするために$\mathcal{L}^{(2)}_{\ell\ell'}$は対角行列とする。このとき、上式右辺は$\overline{x}^{aa}_{\boldsymbol{\ell}}$でパワースペクトルを計算した場合のノイズパワースペクトルの二乗で表される。このノイズパワースペクトルは、レンズ場二点推定量の規格化と一致するので、最終的に得られるパワースペクトルの推定量は

$$\hat{C}^{xx} = |\widehat{x}^{aa}_{\boldsymbol{\ell}}|^2 - 2(\langle 2|\widehat{x}^{aa_1}_{\boldsymbol{\ell}}|^2 - |\widehat{x}^{a_1 a_2}|^2 \rangle_{1,2}) \, . \tag{3.98}$$

となる。

付録A

公式

A.1　ルジャンドル多項式

A.1.1　ルジャンドル多項式

定義

$n = 0, 1, 2, \ldots,\ -1 \leq x \leq 1$ に対して

$$P_n(x) = \frac{\mathrm{e}^x}{n!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (\mathrm{e}^{-x}x^n)\,. \tag{A.1}$$

特殊な場合

端点では

$$P_n(1) = 1\,, \qquad P_n(-1) = (-1)^n\,. \tag{A.2}$$

$n = 0, 1, 2, 3$のとき、

$$P_0(x) = 1\,, \qquad P_1(x) = x\,, \qquad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)\,, \qquad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)\,. \tag{A.3}$$

微分方程式

ルジャンドル多項式は以下の微分方程式の解である:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left((1 - x^2)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right) + \ell(\ell + 1)y = 0\,. \tag{A.4}$$

これをもとに多項式としての解を求めると

$$P_n(x) = \sum_{n=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^n(2n - 2m)!}{2^n n!(n - 2m)!(n - m)!} x^{n-2m}\,. \tag{A.5}$$

その他の多項式表示

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}^2 (x-1)^{n-k}(x+1)^k\,, \tag{A.6}$$

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}\binom{n+k}{k}\left(\frac{x-1}{2}\right)^k\,, \tag{A.7}$$

$$P_n(x) = 2^n\sum_{k=0}^{n} x^k\binom{n}{k}\binom{\frac{n+k-1}{2}}{n}\,. \tag{A.8}$$

特に$x \sim 1$とすると

$$P_n(x) \simeq 1 + \frac{n^2}{2}(1-x) + \mathcal{O}((1-x)^2)\,. \tag{A.9}$$

直交性

直交関係は

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x\ P_n(x)P_m(x) = \frac{2}{2n+1}\delta_{nm}\,. \tag{A.10}$$

これは以下から導かれる：

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x\ P_n(x)x^m = \begin{cases} \dfrac{m!\Gamma(m/2-n/2+1/2)}{2^n(m-n)!\Gamma(m/2+n/2+3/2)} & (m-n\text{が偶数}) \\ 0 & (m-n\text{が奇数, あるいは } m<n) \end{cases}\,. \tag{A.11}$$

多重極展開と母関数

ルジャンドル多項式は, 多重極展開の係数として定義できる:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n\,. \tag{A.12}$$

左辺はルジャンドル多項式の母関数である.

漸化式

$$(n+1)P_{n+1}(x) - nP_{n-1}(x) = (2n+1)P_n(x)\,. \tag{A.13}$$

これは以下と等価である：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}[P_{n+1}(x) - P_{n-1}(x)] = (2n+1)P_n(x)\,. \tag{A.14}$$

Rodrigues (ロドリゲス) の公式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n\,. \tag{A.15}$$

三角関数との関係

$$\frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta} = \sum_{m=0}^{n} P_m(\cos\theta)P_{n-m}(\cos\theta) \tag{A.16}$$

十分大きいnに対して[19]

$$P_n(\cos\theta) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi n\sin\theta}}\sin\left(n\theta+\frac{\theta}{2}+\frac{\pi}{4}\right)+\mathcal{O}(n^{-3/2})\,. \tag{A.17}$$

ウィグナー3j記号との関係

$$P_{\ell_1}(\mu)P_{\ell_2}(\mu) = \sum_L P_L(\mu)(2L+1)\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & L\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}^2\,. \tag{A.18}$$

A.1.2 Legendre陪多項式

定義

ルジャンドル陪関数は以下で定義される：

$$P_n^m(x) = \frac{x^{-m}\,\mathrm{e}^x}{n!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n\left(\mathrm{e}^{-x}x^{n+m}\right)\,. \tag{A.19}$$

あるいは

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}x^{|m|}}P_n(x) \tag{A.20}$$

多項式表示

$$P_n^m(x) = (-1)^m 2^n (1-x^2)^{m/2}\sum_{k=m}^{n}\frac{k!}{(k-m)!}x^{k-m}\binom{n}{k}\binom{(n+k-1)/2}{n}\,. \tag{A.21}$$

特に$n+m=2s$が偶数のとき

$$\begin{aligned}P_n^m(0) &= (-1)^m 2^n m!\binom{n}{m}\binom{(n+m-1)/2}{n}\\ &= (-1)^m 2^n\frac{1}{(n-m)!}\left(\frac{n+m-1}{2}\right)\left(\frac{n+m-1}{2}-1\right)\cdots\left(\frac{n+m-1}{2}-n+1\right)\\ &= (-1)^m\frac{1}{(n-m)!}(2s-1)(2s-3)\cdots(2s-2n+1)\,.\end{aligned} \tag{A.22}$$

$n+m$が奇数であれば$P_n^m(0)=0$。

微分方程式

ルジャンドル陪関数は、以下の微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right]-\left[\frac{m^2}{1-x^2}-n(n+1)\right]y=0 \tag{A.23}$$

の解である。$m=0$のときはルジャンドル多項式に対する微分方程式に帰着する。

直交性

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x\ P_n(x)P_m(x)=\frac{2}{2n+1}\frac{(n+m)!}{(n-m)!}\delta_{nm}\,. \tag{A.24}$$

これより

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}P_n(x)P_n(x')=\delta(x-x')\,. \tag{A.25}$$

A.2　球面上の回転

A.2.1　回転行列

いま, 右手系直交座標 (x,y,z) をとる. すなわち $\boldsymbol{e}_x=\boldsymbol{e}_y\times\boldsymbol{e}_z$, $\boldsymbol{e}_y=\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_z=\boldsymbol{e}_x\times\boldsymbol{e}_y$. $\boldsymbol{e}_x$ 軸周りに $\boldsymbol{e}_y\to\boldsymbol{e}_z$ の向きに θ 回転させると, 任意の点 (x,y,z) は, 新しい座標系 (X,Y,Z) において以下の座標値をもつ:

$$\begin{pmatrix}X\\Y\\Z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\theta&\sin\theta\\0&-\sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\equiv R_x(\theta)\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\,. \tag{A.26}$$

同様に y 軸周りに $\boldsymbol{e}_z\to\boldsymbol{e}_x$ の向きに θ 回転させる 3×3 行列を $R_y(\theta)$, $\boldsymbol{e}_z$ 軸周りに $\boldsymbol{e}_x\to\boldsymbol{e}_y$ の向きに θ 回転させる行列を $R_x(\theta)$ とする. 逆行列は逆回転 $\theta\to-\theta$ として得られる. すなわち:

$$R_y(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta&0&-\sin\theta\\0&1&0\\\sin\theta&0&\cos\theta\end{pmatrix}\,, \tag{A.27}$$

$$R_z(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta&0\\-\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&1\end{pmatrix}\,. \tag{A.28}$$

今の場合, 球面上の点は

$$\begin{pmatrix}X\\Y\\Z\end{pmatrix}=R_z(-\varphi)R_y(-\theta)\boldsymbol{e}_z=\begin{pmatrix}\cos\varphi&-\sin\varphi&0\\\sin\varphi&\cos\varphi&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta&0&\sin\theta\\0&1&0\\-\sin\theta&0&\cos\theta\end{pmatrix}\boldsymbol{e}_z \tag{A.29}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\varphi&-\sin\varphi&0\\\sin\varphi&\cos\varphi&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sin\theta\\0\\\cos\theta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi\\\sin\theta\sin\varphi\\\cos\theta\end{pmatrix} \tag{A.30}$$

回転行列の微分は

$$\frac{\mathrm{d}R_z(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_z(\varphi) \equiv S_z R_z(\varphi)\,, \tag{A.31}$$

$$\frac{\mathrm{d}R_y(\theta)}{\mathrm{d}\theta} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_y(\theta) \equiv S_y R_y(\theta)\,. \tag{A.32}$$

したがって

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}X \\ \mathrm{d}Y \\ \mathrm{d}Z \end{pmatrix} = \left(I\frac{\mathrm{d}r}{r} - R_z(-\varphi) S_y R_z(\varphi)\mathrm{d}\theta - S_z \mathrm{d}\varphi \right) \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} \tag{A.33}$$

$$= \left[I\frac{\mathrm{d}r}{r} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cos\varphi \\ 0 & 0 & \sin\varphi \\ -\cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \end{pmatrix} \mathrm{d}\theta + \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathrm{d}\varphi \right] \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} \tag{A.34}$$

$$\equiv \left[I\frac{\mathrm{d}r}{r} + T_\theta(\varphi)\mathrm{d}\theta + T_\varphi \mathrm{d}\varphi \right] \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}\,, \tag{A.35}$$

となり, 体積要素は

$$\mathrm{d}X \wedge \mathrm{d}Y \wedge \mathrm{d}Z = -r^2 \mathrm{d}r \wedge \mathrm{d}\theta \wedge \mathrm{d}\varphi (\hat{X}\cos\varphi + \hat{Y}\sin\varphi) = r^2 \mathrm{d}r \wedge \mathrm{d}\cos\theta \wedge \mathrm{d}\varphi \tag{A.36}$$

A.2.2　スピン演算子

偏光ベクトル

球面上の単位基底ベクトルを以下のように定義する:

$$\boldsymbol{e}_r = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)\,, \tag{A.37}$$

$$\boldsymbol{e}_1 = (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, -\sin\theta)\,, \tag{A.38}$$

$$\boldsymbol{e}_2 = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0)\,. \tag{A.39}$$

基底ベクトル同士の外積は

$$\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{e}_2\,, \qquad \boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{e}_r\,, \qquad \boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{e}_1\,. \tag{A.40}$$

であり, $\boldsymbol{e}_r \cdot (\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2) > 0$ であるから右手系となる. 以降では, 動径方向と垂直な2次元面に注目する. 動径方向 $\boldsymbol{e}_r$ に対し, それに垂直な二次元面を規定する単位偏光ベクトル $\boldsymbol{\epsilon}_+$, $\boldsymbol{\epsilon}_-$ を以下のように定める:

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\,, \qquad \boldsymbol{\epsilon}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\,, \tag{A.41}$$

$$\boldsymbol{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\epsilon}_+ + \boldsymbol{\epsilon}_-)\,, \qquad \boldsymbol{e}_2 = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\boldsymbol{\epsilon}_+ - \boldsymbol{\epsilon}_-)\,. \tag{A.42}$$

スピン

上の定義では, $\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$ の面内での回転分の自由度が残っている. そこで, 回転した場合に偏光ベクトルがどのように変化するか知っておく必要がある.

まず, 面内で $\varphi = 90^\circ$ の回転を考える (球面の内側から外側を覗き, 反時計回りに 90° の回転を行う). 3次元ベクトルに対する動径軸まわりの 90° 回転作用 $\star$ を

$$\star\boldsymbol{e}_r = 0\,, \qquad \star\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{e}_2\,, \qquad \star\boldsymbol{e}_2 = -\boldsymbol{e}_1\,, \tag{A.43}$$

に基づいて定めると, 偏光ベクトルへの作用は

$$(\star\boldsymbol{\epsilon}_+) = -\mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}_+\,, \qquad (\star\boldsymbol{\epsilon}_-) = \mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}_-\,. \tag{A.44}$$

次に, 一般に ψ だけ回転した場合について考える. 座標基底の変換は

$$\boldsymbol{e}_1 \to \boldsymbol{e}_1 \cos\psi + \boldsymbol{e}_2 \sin\psi\,, \tag{A.45}$$
$$\boldsymbol{e}_2 \to -\boldsymbol{e}_1 \sin\psi + \boldsymbol{e}_2 \cos\psi\,. \tag{A.46}$$

によって定める. 偏光ベクトル $\boldsymbol{\epsilon}_+$, $\boldsymbol{\epsilon}_-$ はそれぞれ

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ \to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi}\boldsymbol{\epsilon}_+\,, \qquad \boldsymbol{\epsilon}_- \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi}\boldsymbol{\epsilon}_-\,. \tag{A.47}$$

と変換する. 一般に, 球面上で定義された関数 f に対し, 上記の座標基底の回転によって $f \to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}s\psi} f$ となる場合, f はスピン s をもつという. 偏光ベクトルはスピン 1, −1 をもつ.

内積

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+ = \boldsymbol{\epsilon}_- \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- = 0\,, \qquad \boldsymbol{\epsilon}_+ \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- = 1\,, \tag{A.48}$$
$$(\star\boldsymbol{\epsilon}_+) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+ = (\star\boldsymbol{\epsilon}_-) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- = 0\,, \qquad (\star\boldsymbol{\epsilon}_+) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- = -(\star\boldsymbol{\epsilon}_-) \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+ = -\mathrm{i}\,. \tag{A.49}$$

スピン演算子と微分作用

整数 s を用いて, スピン昇降演算子を以下のように定義する [20]:

$$\eth_s = -\sin^s\theta \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sin^{-s}\theta = \frac{s}{\tan\theta} - \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \frac{s}{\tan\theta} + \eth_0\,, \tag{A.50}$$
$$\bar{\eth}_s = -\sin^{-s}\theta \left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sin^{s}\theta = \frac{-s}{\tan\theta} - \left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \frac{-s}{\tan\theta} + \bar{\eth}_0\,. \tag{A.51}$$

偏光ベクトルへの作用

ここで, スピン演算子の偏光ベクトルへの作用ついて調べておく. 基底ベクトルの微分は

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{e}_1\,, \qquad \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{e}_2\,, \tag{A.52}$$
$$\frac{\partial}{\partial\theta}\boldsymbol{e}_1 = -\boldsymbol{e}_r\,, \qquad \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_1 = \frac{1}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_2\,, \tag{A.53}$$
$$\frac{\partial}{\partial\theta}\boldsymbol{e}_2 = 0\,, \qquad \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_2 = -\boldsymbol{e}_r - \frac{1}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_1\,. \tag{A.54}$$

と書ける. これから, 基底ベクトルに対するスピン昇降演算子の作用は

$$\eth_s \boldsymbol{e}_r = \frac{s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_r - \boldsymbol{e}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2 = \frac{s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_r - \sqrt{2}\boldsymbol{\epsilon}_+ \,, \tag{A.55}$$

$$\eth_s \boldsymbol{e}_1 = \frac{s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_r - \frac{\mathrm{i}}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_2 \,, \tag{A.56}$$

$$\eth_s \boldsymbol{e}_2 = \frac{s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_2 + \mathrm{i}\left(\boldsymbol{e}_r + \frac{\boldsymbol{e}_1}{\tan\theta}\right) \,, \tag{A.57}$$

$$\bar{\eth}_s \boldsymbol{e}_r = \frac{-s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_r - \sqrt{2}\boldsymbol{\epsilon}_- \,, \tag{A.58}$$

$$\bar{\eth}_s \boldsymbol{e}_1 = \frac{-s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_r + \frac{\mathrm{i}}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_2 \,, \tag{A.59}$$

$$\bar{\eth}_s \boldsymbol{e}_2 = \frac{-s}{\tan\theta}\boldsymbol{e}_2 - \mathrm{i}\left(\boldsymbol{e}_r + \frac{\boldsymbol{e}_1}{\tan\theta}\right) \,. \tag{A.60}$$

偏光ベクトルへの微分作用は

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\boldsymbol{\epsilon}_+ = -\frac{\boldsymbol{e}_r}{\sqrt{2}} \,, \tag{A.61}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{\epsilon}_+ = -\frac{\mathrm{i}}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_+ - \frac{\boldsymbol{e}_r}{\sqrt{2}} \,, \tag{A.62}$$

スピン演算子に対しては

$$\eth_s \boldsymbol{\epsilon}_+ = \frac{s-1}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_+ \,, \tag{A.63}$$

$$\eth_s \boldsymbol{\epsilon}_- = \frac{s+1}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_- + \sqrt{2}\boldsymbol{e}_r \,, \tag{A.64}$$

$$\bar{\eth}_s \boldsymbol{\epsilon}_+ = \frac{-s+1}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_+ + \sqrt{2}\boldsymbol{e}_r \,, \tag{A.65}$$

$$\bar{\eth}_s \boldsymbol{\epsilon}_- = \frac{-s-1}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_- \,. \tag{A.66}$$

$\eth_s$, $\bar{\eth}_s$ はそれぞれスピン s の量をスピン $+1$ あるいは -1 だけ上下させる.

共変微分

球面上の共変微分は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla} &= \boldsymbol{e}_1\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\boldsymbol{e}_2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\boldsymbol{\epsilon}_- + \boldsymbol{\epsilon}_+}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{\sin\theta}\frac{\boldsymbol{\epsilon}_- - \boldsymbol{\epsilon}_+}{\sqrt{2}}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ &= \frac{\boldsymbol{\epsilon}_-}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{\boldsymbol{\epsilon}_+}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ &= -\frac{\boldsymbol{\epsilon}_-\eth_0 + \boldsymbol{\epsilon}_+\bar{\eth}_0}{\sqrt{2}} \,.\end{aligned} \tag{A.67}$$

座標基底の回転を行うことで変化しないとすると, $\eth_0$, $\bar{\eth}_0$ はそれぞれ ±1 のスピン変換をする. したがって, $s=0$ のスピン昇降演算子は, スピンを一つ上下させることが分かる. また

$$\eth_0 = -\sqrt{2}\boldsymbol{\epsilon}_+ \cdot \boldsymbol{\nabla} \,, \tag{A.68}$$

が得られる.

次に, 以下の演算子を考察する:

$$\eth^2 \equiv (-\sqrt{2})^2 \boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\epsilon}_+^b \boldsymbol{\nabla}_a \boldsymbol{\nabla}_b \,. \tag{A.69}$$

ただし a, b に対しては和を取るとする．これを以下のように微分の順序を変えると

$$\eth^2 = (-\sqrt{2})^2[\boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\nabla}_a \boldsymbol{\epsilon}_+^b \boldsymbol{\nabla}_b - \boldsymbol{\epsilon}_+^a (\boldsymbol{\nabla}_a \boldsymbol{\epsilon}_+^b) \boldsymbol{\nabla}_b]\,. \tag{A.70}$$

第二項は

$$\boldsymbol{\nabla}_\theta \boldsymbol{\epsilon}_+^b = \frac{\partial}{\partial\theta}(\boldsymbol{e}_b \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+) = 0\,, \tag{A.71}$$

$$\boldsymbol{\nabla}_\varphi \boldsymbol{\epsilon}_+^b = \frac{\partial}{\partial\varphi}(\boldsymbol{e}_b \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+) = \boldsymbol{e}_b \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\epsilon}_+}{\partial\varphi} = \boldsymbol{e}_b \cdot (-\mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}_+) = -\frac{\mathrm{i}}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_+^b\,. \tag{A.72}$$

したがって，$\boldsymbol{\epsilon}_+^\varphi = \mathrm{i}/\sqrt{2}$ から

$$\begin{aligned}\eth^2 &= (-\sqrt{2})^2 \left(\boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\nabla}_a \boldsymbol{\epsilon}_+^b \boldsymbol{\nabla}_b + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{-1}{\tan\theta}\boldsymbol{\epsilon}_+^b \boldsymbol{\nabla}_b\right) \\ &= \left(-\sqrt{2}\boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\nabla}_a + \frac{1}{\tan\theta}\right)(-\sqrt{2})\boldsymbol{\epsilon}_+^b \boldsymbol{\nabla}_b \\ &= \eth_1 \eth_0\,.\end{aligned} \tag{A.73}$$

一般に

$$\begin{aligned}\eth^n \equiv (-\sqrt{2})^n \boldsymbol{\epsilon}_+^{a_1} \cdots \boldsymbol{\epsilon}_+^{a_n} \boldsymbol{\nabla}_{a_1} \cdots \boldsymbol{\nabla}_{a_n} &= \left(-\sqrt{2}\boldsymbol{\epsilon}_+^{a_1} \boldsymbol{\nabla}_{a_1} + \frac{n-1}{\tan\theta}\right)(-\sqrt{2})^{n-1} \boldsymbol{\epsilon}_+^{a_2} \cdots \boldsymbol{\epsilon}_+^{a_n} \boldsymbol{\nabla}_{a_2} \cdots \boldsymbol{\nabla}_{a_n} \\ &= \eth_{n-1} \cdots \eth_1 \eth_0\,.\end{aligned} \tag{A.74}$$

同様にして

$$\bar{\eth}^n \equiv (-\sqrt{2})^n \boldsymbol{\epsilon}_-^{a_1} \cdots \boldsymbol{\epsilon}_-^{a_n} \boldsymbol{\nabla}_{a_1} \cdots \boldsymbol{\nabla}_{a_n} = \bar{\eth}_{n-1} \cdots \bar{\eth}_1 \bar{\eth}_0 \tag{A.75}$$

ラプラシアンは:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{(\boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 + \boldsymbol{\epsilon}_+ \bar{\eth}_0) \cdot (\boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 + \boldsymbol{\epsilon}_+ \bar{\eth}_0)}{2} \\ &= \frac{\boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 + \boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+ \bar{\eth}_0 + \boldsymbol{\epsilon}_+ \bar{\eth}_0 \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 + \boldsymbol{\epsilon}_+ \bar{\eth}_0 \cdot \boldsymbol{\epsilon}_+ \bar{\eth}_0}{2}\end{aligned} \tag{A.76}$$

ここで, 例えば第一項を計算すると

$$\boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 \cdot \boldsymbol{\epsilon}_- \eth_0 = \boldsymbol{\epsilon}_- \cdot (\eth_0 \boldsymbol{\epsilon}_-) \eth_0 + (\boldsymbol{\epsilon}_- \cdot \boldsymbol{\epsilon}_-)(\eth_0)^2\,, \tag{A.77}$$

であるが, $\boldsymbol{\epsilon}_-$ は $\boldsymbol{\epsilon}_-$ や $\boldsymbol{e}_r$ と直交することから, 上式はゼロとなる. 第四項も同様にゼロとなる. 第二項は

$$\boldsymbol{\epsilon}_- \cdot (\eth_0 \boldsymbol{\epsilon}_+) \bar{\eth}_0 + \eth_0 \bar{\eth}_0 = -\frac{1}{\tan\theta}\bar{\eth}_0 + \eth_0 \bar{\eth}_0 = \left(-\frac{1}{\tan\theta} + \eth_0\right)\bar{\eth}_0 = \eth_{-1}\bar{\eth}_0\,, \tag{A.78}$$

第三項は

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ \cdot (\bar{\eth}_0 \boldsymbol{\epsilon}_-) \eth_0 + \bar{\eth}_0 \eth_0 = -\frac{1}{\tan\theta}\eth_0 + \bar{\eth}_0 \eth_0 = \bar{\eth}_{+1}\eth_0\,, \tag{A.79}$$

したがって, ラプラシアンは結局

$$\boldsymbol{\nabla}^2 = \frac{\eth_{-1}\bar{\eth}_0 + \bar{\eth}_{+1}\eth_0}{2}\,. \tag{A.80}$$

偏光マップの微分

特定の座標 $\boldsymbol{\epsilon}_+$ で測定されたストークス・パラメータ Q, U は, 偏光テンソル P_{ab} を用いて:

$$P \equiv Q + \mathrm{i}U = \boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\epsilon}_+^b P_{ab} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\epsilon}_+^b \begin{pmatrix} Q & U \\ U & -Q \end{pmatrix}\,. \tag{A.81}$$

重力レンズによって $P_{ab}(\hat{\boldsymbol{n}})$ が $P_{ab}(\hat{\boldsymbol{n}}+\boldsymbol{d})$ となるので

$$\tilde{P} = P + \boldsymbol{\epsilon}_+^a \boldsymbol{\epsilon}_+^b \boldsymbol{\nabla}^c \phi \boldsymbol{\nabla}_c P_{ab} + \cdots\,. \tag{A.82}$$

偏光テンソルは

$$P_{ab} = (\boldsymbol{\nabla}_a \boldsymbol{\nabla}_b + \boldsymbol{\nabla}_b \boldsymbol{\nabla}_a)E + \epsilon_a^c(\boldsymbol{\nabla}_b \boldsymbol{\nabla}_c - \boldsymbol{\nabla}_c \boldsymbol{\nabla}_b)B \tag{A.83}$$

このように, 重力レンズによる歪みの効果で現れる共変微分は CMB 揺らぎのソースに対する効果なので偏光ベクトルの内側に来る. このため, [21] の (55) 式左辺の作用はスピン演算子ととらえなければならない.

A.2.3　球面調和関数

整数$\ell \geq 0$および$m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$に対して, 球面上の関数

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)\,. \tag{A.84}$$

を球面調和関数とよぶ. もし$\theta = 0$（北極点）であるとき,

$$Y_{\ell m}(0, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m0}\,. \tag{A.85}$$

また

$$\int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}\; Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \delta_{\ell 0}\delta_{m0} 2\sqrt{\pi}(?)\,. \tag{A.86}$$

球面上の関数を球面調和関数展開すると

$$F(\hat{\boldsymbol{n}}) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} f_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{A.87}$$

展開係数$f_{\ell m}$を得るには, 球面調和関数の直交性

$$\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\; Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{n}}) Y_{\ell' m'}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\,. \tag{A.88}$$

を利用する. $Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{n}})$をかけて球面で積分を行うと

$$f_{\ell m} = \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\; F(\hat{\boldsymbol{n}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{A.89}$$

が得られる.

スピン球面調和関数

球面調和関数は偏光ベクトルの回転自由度によって変化する量（ベクトルなど）をうまく扱えない. そこで, その回転自由までを考慮した球面調和関数としてスピン球面調和関数が以下のように定義される

$$
\begin{aligned}
Y^s_{\ell m} &= \left[\frac{(\ell-s)!}{(\ell+s)!}\right]^{1/2} \eth^s Y_{\ell m} \qquad (0 \le s \le \ell) \\
&= \left[\frac{(\ell+s)!}{(\ell-s)!}\right]^{1/2} (-1)^s \bar{\eth}^s Y_{\ell m} \qquad (-\ell \le s \le 0)\,.
\end{aligned} \tag{A.90}
$$

具体的に書くと

$$
\begin{aligned}
Y^s_{\ell m}(\theta,\varphi) = (-1)^m &\sqrt{\frac{(\ell+m)!(\ell-m)!(2\ell+1)}{4\pi(\ell+s)!(\ell-s)!}} \sin^{2\ell}\left(\frac{\theta}{2}\right) \\
&\times \sum_{r=0}^{\ell-s} \binom{\ell-s}{r}\binom{\ell+s}{r+s-m} (-1)^{\ell-r-s}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \cot^{2r+s-m}\left(\frac{\theta}{2}\right)\,.
\end{aligned} \tag{A.91}
$$

一般に, Wigner d関数に対して$d_{-m,s}(0)=\delta_{m,-s}$であるから

$$
Y^s_{\ell m}(0,0) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m,-s}\,. \tag{A.92}
$$

複素共役, および空間反転は

$$
(Y^s_{\ell m})^*(\hat{\boldsymbol{n}}) = (-1)^{s+m} Y^{-s}_{\ell,-m}(\hat{\boldsymbol{n}})\,, \qquad Y^s_{\ell m}(-\hat{\boldsymbol{n}}) = (-1)^\ell Y^{-s}_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})\,. \tag{A.93}
$$

ただし$-\hat{\boldsymbol{n}}$は$\theta \to \pi-\theta$, $\varphi \to \pi+\varphi$の変換.

直交性, 完全性

$$
\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ (Y^s_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}))^* Y^s_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\,, \tag{A.94}
$$

$$
\sum_{\ell m} (Y^s_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}))^* Y^s_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}') = \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi') = \delta(\Omega-\Omega')\,. \tag{A.95}
$$

加法定理

ルジャンドル多項式を使うと, 単位方向ベクトルに対して$\hat{\boldsymbol{n}}$,$\hat{\boldsymbol{n}}'$

$$
\sum_m Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}) Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}') = \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}')\,. \tag{A.96}
$$

これから

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}_2\ P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2) P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_3) &= \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^2 \sum_{mm'} \int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}_2\ Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}_1) Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}_2) Y^*_{\ell m'}(\hat{\boldsymbol{n}}_2) Y_{\ell m'}(\hat{\boldsymbol{n}}_3) \\
&= \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^2 \sum_m Y^*_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}_1) Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}}_3) \\
&= \frac{4\pi}{2\ell+1} P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_3)\,.
\end{aligned} \tag{A.97}
$$

および

$$\int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}_2 \int \mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}_3\ P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_2)P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_3)P_\ell(\hat{\boldsymbol{n}}_3\cdot\hat{\boldsymbol{n}}_1) = \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^2 . \tag{A.98}$$

また

$$\sum_m (Y^{s_1}_{\ell m})^*(\theta,\phi)Y^{s_2}_{\ell m}(\theta+\beta,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}Y^{s_2}_{\ell,-s_1}(\beta,0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}d^\ell_{s_2,-s_1}(\beta)Y^{s_2}_{\ell,-s_1}(\mathbf{0}) . \tag{A.99}$$

特に同じ方向$\beta=0$のとき(Unsöldの定理)

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{n}})|^2 = \frac{2\ell+1}{4\pi} . \tag{A.100}$$

部分波展開

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 4\pi\sum_{\ell m}\mathrm{i}^\ell j_\ell(kr)Y^*_{\ell m}(\widehat{\boldsymbol{k}})Y_{\ell m}(\hat{r}) \tag{A.101}$$

ウィグナー3j記号との関係

クレプシュ・ゴルダン係数との関係：

$$Y_{\ell_1 m_1}(\hat{\boldsymbol{n}})Y_{\ell_2 m_2}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \sum_{LM}\sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2L+1)}}C^{L0}_{\ell_1 0\ell_2 0}C^{LM}_{\ell_1 m_1\ell_2 m_2}Y_{LM}(\hat{\boldsymbol{n}}) \tag{A.102}$$

$$= \sum_{LM}\gamma_{\ell_1\ell_2 L}Y^*_{LM}(\hat{\boldsymbol{n}})\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & L\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & L\\ m_1 & m_2 & M\end{pmatrix} . \tag{A.103}$$

ここで

$$\gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3} = \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)}{4\pi}} . \tag{A.104}$$

これから

$$\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y_{\ell_1 m_1}(\hat{\boldsymbol{n}})Y_{\ell_2 m_2}(\hat{\boldsymbol{n}})Y_{\ell_3 m_3}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix} . \tag{A.105}$$

ウィグナー3j記号は実数なので, $\ell_1+\ell_2+\ell_3$が奇数のときは左辺が消える. より一般には[21]

$$\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y^{-s_1}_{\ell_1 m_1}(\hat{\boldsymbol{n}})Y^{-s_2}_{\ell_2 m_2}(\hat{\boldsymbol{n}})Y^{-s_3}_{\ell_3 m_3}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ s_1 & s_2 & s_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix} . \tag{A.106}$$

ウィグナーD行列との関係

球を回転すると, その回転の演算Rを用いて

$$Y_{\ell m}(R\hat{\boldsymbol{n}}) = \sum_{m'}D^\ell_{m'm}(R)Y_{\ell m'}(\hat{\boldsymbol{n}}) \tag{A.107}$$

と変換する.

$\boldsymbol{e}_z$をオイラー回転（$\alpha=\varphi$,$\beta=\theta$）回転することで$\boldsymbol{e}_r$が得られる. Wigner d関数とルジャンドル倍関数の関係を使うと, スピン球面調和関数はウィグナーD行列を用いて

$$D^{\ell}_{-ms}(\varphi,\theta,-\psi)=(-1)^m\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}Y^s_{\ell m}(\theta,\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}s\psi}\,. \tag{A.108}$$

特に

$$Y^s_{\ell m}(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}D^{\ell}_{-ms}(\varphi,\theta,0)\,. \tag{A.109}$$

これから

$$Y^s_{\ell m}(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}d^{\ell}_{-m,s}(\theta)\,. \tag{A.110}$$

式 (A.110) を式 (A.153) に代入すると式 (A.106) が導かれる.

以下が成り立つ：

$$\begin{aligned}\sum_{MM'}d^L_{MM'}(\beta)h_{\ell LL}\begin{pmatrix}\ell & L & L\\ m & M' & M\end{pmatrix}&=\int\mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\;Y_{\ell m}\sum_{M}Y_{LM}\sum_{M'}Y_{LM'}d^L_{MM'}(\beta)\\ &=\frac{2L+1}{4\pi}P_L(\cos\beta)\delta_{\ell 0}\delta_{m0}\,.\end{aligned} \tag{A.111}$$

微分

球面調和関数の微分は, $\boldsymbol{\nabla}$ をスピン演算子で書き直した式を用いれば [21]:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}Y^s_{\ell m}&=\left[\frac{(\ell-s)!}{(\ell+s)!}\right]^{1/2}[\boldsymbol{\epsilon}_-(\boldsymbol{\epsilon}_+\cdot\boldsymbol{\nabla})+\boldsymbol{\epsilon}_+(\boldsymbol{\epsilon}_-\cdot\boldsymbol{\nabla})](-\sqrt{2})^s\boldsymbol{\epsilon}^{a_1}_+\cdots\boldsymbol{\epsilon}^{a_s}_+\boldsymbol{\nabla}_{a_1}\cdots\boldsymbol{\nabla}_{a_s}Y_{\ell m}\\ &=-\sqrt{\frac{(\ell-s)(\ell+s+1)}{2}}Y^{s+1}_{\ell m}\boldsymbol{\epsilon}_-+\sqrt{\frac{(\ell+s)(\ell-s+1)}{2}}Y^{s-1}_{\ell m}\boldsymbol{\epsilon}_+\,.\end{aligned} \tag{A.112}$$

特に

$$\boldsymbol{\nabla}Y_{\ell m}=-\sqrt{\ell(\ell+1)}\frac{\boldsymbol{\epsilon}_-Y^1_{\ell m}-\boldsymbol{\epsilon}_+Y^{-1}_{\ell m}}{\sqrt{2}}\,. \tag{A.113}$$

式（A.112）にもう一度微分を作用させると, 球面調和関数の発散は

$$\boldsymbol{\nabla}^2Y^s_{\ell m}=-[\ell(\ell+1)-s^2]Y^s_{\ell m}\,,\qquad(\star\boldsymbol{\nabla})\cdot\boldsymbol{\nabla}Y^s_{\ell m}=0\,. \tag{A.114}$$

となる. スピン演算子を作用させた場合は

$$\eth_sY^s_{\ell m}=\sqrt{(\ell-s)(\ell+s+1)}Y^{s+1}_{\ell m}\,, \tag{A.115}$$

$$\bar{\eth}_sY^s_{\ell m}=-\sqrt{(\ell+s)(\ell-s+1)}Y^{s-1}_{\ell m}\,. \tag{A.116}$$

球面調和関数を含む積分

以下の積分を考える[22]

$$I^{s_1s_2s_3}_{\ell_1\ell_2\ell_3m_1m_2m_3}\equiv c^{ij}\int\mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\;Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\partial_iY^{s_2}_{\ell_2m_2}][\partial_jY^{s_3}_{\ell_3m_3}]\,, \tag{A.117}$$

ここでc^{ij}はδ^{ij}あるいはϵ^{ij}とする．部分積分すると

$$
\begin{aligned}
I^{s_1s_2s_3}_{\ell_1\ell_2\ell_3m_1m_2m_3} &= -c^{ij}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ \{[\partial_j Y^{s_1}_{\ell_1m_1}][\partial_i Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]Y^{s_3}_{\ell_3m_3} + Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\partial_i\partial_j Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]Y^{s_3}_{\ell_3m_3}\} \\
&= c^{ij}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ \{[\partial_j Y^{s_1}_{\ell_1m_1}]Y^{s_2}_{\ell_2m_2}[\partial_i Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] + [\partial_i\partial_j Y^{s_1}_{\ell_1m_1}]Y^{s_2}_{\ell_2m_2}Y^{s_3}_{\ell_3m_3} - Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\partial_i\partial_j Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]Y^{s_3}_{\ell_3m_3}\} \\
&= -aI^{s_1s_2s_3}_{\ell_1\ell_2\ell_3m_1m_2m_3} \\
&\quad + c^{ij}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ \{-Y^{s_1}_{\ell_1m_1}Y^{s_2}_{\ell_2m_2}[\partial_j\partial_i Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] + [\partial_i\partial_j Y^{s_1}_{\ell_1m_1}]Y^{s_2}_{\ell_2m_2}Y^{s_3}_{\ell_3m_3} - Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\partial_i\partial_j Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]Y^{s_3}_{\ell_3m_3}\}\,,
\end{aligned}
\tag{A.118}
$$

ここで$c=\delta$のとき$a=1$, $c=\epsilon$のとき$a=-1$とする．もし$c^{ij}=\delta^{ij}$のとき,

$$
\begin{aligned}
I^{s_1s_2s_3}_{\ell_1\ell_2\ell_3m_1m_2m_3} &= \frac{\delta^{ij}}{2}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ \{-Y^{s_1}_{\ell_1m_1}Y^{s_2}_{\ell_2m_2}[\partial_j\partial_i Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] + [\partial_i\partial_j Y^{s_1}_{\ell_1m_1}]Y^{s_2}_{\ell_2m_2}Y^{s_3}_{\ell_3m_3} - Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\partial_i\partial_j Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]Y^{s_3}_{\ell_3m_3}\} \\
&= \frac{-\ell_1(\ell_1+1)+\ell_2(\ell_2+1)+\ell_3(\ell_3+1)+s_1^2-s_2^2-s_3^2}{2} \\
&\quad \times \int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y^{s_1}_{\ell_1m_1}Y^{s_2}_{\ell_2m_2}Y^{s_3}_{\ell_3m_3}\,.
\end{aligned}
\tag{A.119}
$$

式（A.106）を使うと, 以下の式を得る：

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\boldsymbol{\nabla} Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]\cdot[\boldsymbol{\nabla} Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] &= [-\ell_1(\ell_1+1)+\ell_2(\ell_2+1)+\ell_3(\ell_3+1)+s_1^2-s_2^2-s_3^2] \\
&\quad \times \frac{\gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{2}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2 & -s_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{A.120}
$$

一方で$c^{ij}=\epsilon^{ij}$のとき,

$$
\epsilon^{ij}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ \{-Y^{s_1}_{\ell_1m_1}Y^{s_2}_{\ell_2m_2}[\partial_j\partial_i Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] + [\partial_i\partial_j Y^{s_1}_{\ell_1m_1}]Y^{s_2}_{\ell_2m_2}Y^{s_3}_{\ell_3m_3} - Y^{s_1}_{\ell_1m_1}[\partial_i\partial_j Y^{s_2}_{\ell_2m_2}]Y^{s_3}_{\ell_3m_3}\} = 0\,.
\tag{A.121}
$$

これは$(\star\boldsymbol{\nabla})\cdot\boldsymbol{\nabla}=0$という事実と無矛盾である．$I^{s_1s_2s_3}_{\ell_1\ell_2\ell_3m_1m_2m_3}$とウィグナー$3j$記号を関連付けるため, 以下のようにする：

$$
\begin{aligned}
[(\star\boldsymbol{\nabla})Y^{s_2}_{\ell_2m_2}][\boldsymbol{\nabla} Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] &= \frac{1}{2}[((\star\boldsymbol{\epsilon}_-)\eth + (\star\boldsymbol{\epsilon}_+)\bar{\eth})Y^{s_2}_{\ell_2m_2}][(\boldsymbol{\epsilon}_-\eth + \boldsymbol{\epsilon}_+\bar{\eth})Y^{s_3}_{\ell_3m_3}] \\
&= \frac{i}{2}[(\eth Y^{s_2}_{\ell_2m_2})(\bar{\eth} Y^{s_3}_{\ell_3m_3}) - (\bar{\eth} Y^{s_2}_{\ell_2m_2})(\eth Y^{s_3}_{\ell_3m_3})] \\
&= \frac{-i}{2}\Big[\sqrt{(\ell_2-s_2)(\ell_2+s_2+1)(\ell_3+s_3)(\ell_3-s_3+1)}Y^{s_2+1}_{\ell_2m_2}Y^{s_3-1}_{\ell_3m_3} \\
&\quad - \sqrt{(\ell_2+s_2)(\ell_2-s_2+1)(\ell_3-s_3)(\ell_3+s_3+1)}Y^{s_2-1}_{\ell_2m_2}Y^{s_3+1}_{\ell_3m_3}\Big].
\end{aligned}
\tag{A.122}
$$

このとき

$$
\begin{aligned}
&\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y^{s_1}_{\ell_1 m_1}[(\star\boldsymbol{\nabla})Y^{s_2}_{\ell_2 m_2}][\boldsymbol{\nabla}Y^{s_3}_{\ell_3 m_3}] \\
&\quad = \frac{-i}{2}\Bigg[\sqrt{(\ell_2-s_2)(\ell_2+s_2+1)(\ell_3+s_3)(\ell_3-s_3+1)}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y^{s_1}_{\ell_1 m_1}Y^{s_2+1}_{\ell_2 m_2}Y^{s_3-1}_{\ell_3 m_3} \\
&\quad - \sqrt{(\ell_2+s_2)(\ell_2-s_2+1)(\ell_3-s_3)(\ell_3+s_3+1)}\int \mathrm{d}^2\hat{\boldsymbol{n}}\ Y^{s_1}_{\ell_1 m_1}Y^{s_2-1}_{\ell_2 m_2}Y^{s_3+1}_{\ell_3 m_3}\Bigg] \\
&\quad = -i\Bigg[\sqrt{(\ell_2-s_2)(\ell_2+s_2+1)(\ell_3+s_3)(\ell_3-s_3+1)} \\
&\qquad \times \frac{\gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{2}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2-1 & -s_3+1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \\
&\qquad - \sqrt{(\ell_2+s_2)(\ell_2-s_2+1)(\ell_3-s_3)(\ell_3+s_3+1)} \\
&\qquad \times \frac{\gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{2}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2+1 & -s_3-1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\Bigg] \\
&\quad = -i\Bigg[\sqrt{(\ell_2-s_2)(\ell_2+s_2+1)(\ell_3+s_3)(\ell_3-s_3+1)}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2-1 & -s_3+1 \end{pmatrix} \\
&\qquad - \sqrt{(\ell_2+s_2)(\ell_2-s_2+1)(\ell_3-s_3)(\ell_3+s_3+1)}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2+1 & -s_3-1 \end{pmatrix}\Bigg] \\
&\qquad \times \frac{\gamma_{\ell_1\ell_2\ell_3}}{2}\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{A.123}
$$

A.2.4　ウィグナーd関数

ヤコビ多項式

$$
P_n^{(\mu,\nu)} = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\mu}(1+x)^{\nu}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n (1-x)^{n+\mu}(1+x)^{n+\nu}\,. \tag{A.124}
$$

特に

$$
P_0^{(\mu,\nu)}(x) = 1\,, \tag{A.125}
$$

$$
P_1^{(\mu,\nu)}(x) = \frac{1}{2}[(\mu+\nu+2)x + (\mu-\nu)]\,, \tag{A.126}
$$

$$
P_n^{(\mu,\nu)}(1) = \frac{(n+\mu)!}{n!\mu!}\,. \tag{A.127}
$$

定義

以下のようにウィグナーd関数を定義する [Link]:

$$
d^l_{mm'}(\beta) = \sqrt{\frac{(l+m')!(l-m')!}{(l+m)!(l-m)!}}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{m+m'} P_{l-m'}^{(m'-m,m+m')}(\cos\beta)\,, \tag{A.128}
$$

ここで $P_s^{(\mu,\nu)}$ は Jacobi 多項式を表す.

ウィグナーによって以下の公式が得られている:

$$d^j_{mm'}(\beta) = [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \times \sum_s \left[\frac{(-1)^{m-m'+s}}{(j+m'-s)!s!(m-m'+s)!(j-m-s)!} \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m'-m-2s} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m-m'+2s} \right] . \tag{A.129}$$

近似式

$\ell \gg m, m'$ かつ $\beta \ll 1$ のとき

$$d^l_{mm'}(\beta) \simeq J_{m-m'}(\ell\beta) . \tag{A.130}$$

定義より, 角度 β が小さい場合の近似式 $(m \geq m')$ は

$$\begin{aligned} d^l_{mm'}(\beta) &\simeq \sqrt{\frac{(l+m')!(l-m')!}{(l+m)!(l-m)!}} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m} \frac{(l-m)!}{(l-m')!(m'-m)!} \\ &= \sqrt{\frac{(l+m')!(l-m)!}{(l+m)!(l-m')!}} \frac{1}{(m'-m)!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m} . \end{aligned} \tag{A.131}$$

性質

- ウィグナーd関数は$\ell < \max(|m|, |m|')$のときゼロとなる. これから$d^0_{mm'} = \delta_{m,0}\delta_{m',0}$である.
- 直交性

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\beta\ d^\ell_{mm'}(\beta) d^{\ell'}_{mm'}(\beta) \sin\beta = \int_{-1}^1 \mathrm{d}\mu\ d^\ell_{mm'}(\mu) d^{\ell'}_{mm'}(\mu) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'} , \tag{A.132}$$

  ここで$\mu = \cos\beta$.
- 対称性

$$d^\ell_{mm'}(\beta) = (-1)^{m-m'} d^\ell_{-m,-m'}(\beta) = (-1)^{m-m'} d^\ell_{m'm}(\beta) , \tag{A.133}$$

$$d^\ell_{mm'}(\beta) = (-1)^{\ell+m} d^\ell_{m,-m'}(\pi-\beta) . \tag{A.134}$$

$$d^\ell_{mm'}(-\beta) = (-1)^{m+m'} d^\ell_{mm'}(\beta) . \tag{A.135}$$

特殊な場合

- 角度βの関数として, $\ell = 1$の場合

$$d^1_{00}(\beta) = \cos\beta , \qquad d^1_{01}(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta , \qquad d^1_{11}(\beta) = \cos^2\frac{\beta}{2} . \tag{A.136}$$

- $|m|, |m'| \leq 1$の場合,

$$d^\ell_{01}(\beta) = -d^\ell_{0,-1}(\beta) , \qquad d^\ell_{11}(\beta) = -d^\ell_{-1,-1}(\beta) = (-1)^{\ell+1} d^\ell_{1,-1}(\pi-\beta) . \tag{A.137}$$

- $\ell = m$の場合

$$d^\ell_{\ell m} = \sqrt{\frac{(2\ell)!}{(\ell+m)!(\ell-m)!}} \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{\ell+m} \left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{\ell-m} . \tag{A.138}$$

- $\beta=0$の場合, 回転がないので自身への写像となり, 単位行列

$$d^\ell_{mm'}(0)=\delta_{mm'} \tag{A.139}$$

となる. 実際, もし$m\neq m'$であれば,

$$d^\ell_{mm'}(\beta)\propto[\sin(\beta/2)]^{|m-m'|}\,, \tag{A.140}$$

なので,

$$d^\ell_{mm'}(\beta=0)=0\,, \tag{A.141}$$

となる. 一方で$m=m'$のとき, 漸化式から

$$0=\frac{[(\ell+1)^2-m^2]}{(\ell+1)(2\ell+1)}d^{\ell+1}_{mm}(0)+\left(\frac{m^2}{\ell(\ell+1)}-1\right)d^\ell_{mm}(0)+\frac{\ell^2-m^2}{\ell(2\ell+1)}d^{\ell-1}_{mm}(0)\,, \tag{A.142}$$

であり, $d^\ell_{mm}(0)=1$は解である.

漸化式

$$0=\frac{\sqrt{[(\ell+1)^2-m^2][(\ell+1)^2-m'^2]}}{(\ell+1)(2\ell+1)}d^{\ell+1}_{mm'}+\left(\frac{mm'}{\ell(\ell+1)}-\cos\beta\right)d^\ell_{mm'}+\frac{\sqrt{(\ell^2-m^2)(\ell^2-m'^2)}}{\ell(2\ell+1)}d^{\ell-1}_{mm'}\,. \tag{A.143}$$

あるいは$\ell\to\ell-1$として

$$0=\frac{\sqrt{[\ell^2-m^2][\ell^2-m'^2]}}{\ell(2\ell-1)}d^{\ell}_{mm'}+\left(\frac{mm'}{\ell(\ell-1)}-\cos\beta\right)d^{\ell-1}_{mm'}+\frac{\sqrt{((\ell-1)^2-m^2)((\ell-1)^2-m'^2)}}{(\ell-1)(2\ell-1)}d^{\ell-2}_{mm'}\,. \tag{A.144}$$

$m=m'=0$のとき

$$0=\ell d^\ell_{mm'}-\mu(2\ell-1)d^{\ell-1}_{mm'}+(\ell-1)d^{\ell-2}_{mm'}\,. \tag{A.145}$$

加法定理

文献[23]より

$$\sum_{m''=-\ell}^{\ell}d^\ell_{mm''}(\beta_1)d^\ell_{m''m'}(\beta_2)e^{-im''\varphi}=e^{-im\alpha}d^\ell_{mm'}(\beta)e^{-im'\gamma}\,, \tag{A.146}$$

ここで

$$\cot\alpha=\cos\beta_1\cot\varphi+\cot\beta_2\frac{\sin\beta_1}{\sin\varphi}\,, \tag{A.147}$$

$$\cos\beta=\cos\beta_1\cos\beta_2-\sin\beta_1\sin\beta_2\cos\varphi\,, \tag{A.148}$$

$$\cot\gamma=\cos\beta_2\cot\varphi+\cot\beta_1\frac{\sin\beta_2}{\sin\varphi}\,. \tag{A.149}$$

特に$\varphi=0$のとき,

$$\sum_{m''=-\ell}^{\ell}d^\ell_{mm''}(\beta_1)d^\ell_{m''m'}(\beta_2)=\begin{cases}d^\ell_{mm'}(\beta_1+\beta_2) & (\beta_1+\beta_2\leq\pi)\\ (-1)^{m+m'}d^\ell_{mm'}(2\pi-\beta_1-\beta_2) & (\beta_1+\beta_2\geq\pi)\end{cases}\,. \tag{A.150}$$

ルジャンドル多項式との関係

$\mu = \cos\beta$として

$$d^{\ell}_{m0}(\beta) = \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P^m_\ell(\mu)\,, \tag{A.151}$$

$$d^{\ell}_{00}(\beta) = P_\ell(\mu)\,. \tag{A.152}$$

Wigner-3j 記号との関係

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\mu\ d^{\ell_1}_{s_1,s_1'}(\beta)d^{\ell_2}_{s_2,s_2'}(\beta)d^{\ell_3}_{s_3,s_3'}(\beta) = 2\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ s_1 & s_2 & s_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ s_1' & s_2' & s_3'\end{pmatrix}\,. \tag{A.153}$$

ただし$s_1+s_2+s_3 = s_1'+s_2'+s_3' = 0.$

A.2.5　ウィグナーD行列

定義

ウィグナーD行列はウィグナーd関数を使って

$$D^j_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}d^j_{mm'}(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\gamma}\,. \tag{A.154}$$

ここでα,β,γはオイラー角で, $z-y-z$の回転.

直交関係

ウィグナーD行列の直交性は, 規格化された積分

$$\int\mathrm{d}\Omega\ \equiv \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\ \int_0^{\pi}\mathrm{d}\beta\ \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma\ \sin\beta\,, \tag{A.155}$$

を用いて

$$\int\mathrm{d}\Omega\ D^j_{mm'}(\Omega)D^k_{nn'}(\Omega) = \frac{1}{2j+1}\delta_{jk}\delta_{mn}\delta_{m'n'}\,. \tag{A.156}$$

ウィグナー3jとの関係

$$\int\mathrm{d}\Omega\ D^{\ell_1}_{m_1m_1'}(\Omega)D^{\ell_2}_{m_2m_2'}(\Omega)D^{\ell_3}_{m_3m_3'}(\Omega) = \begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ m_1' & m_2' & m_3'\end{pmatrix}\,. \tag{A.157}$$

A.2.6　Wigner 3j 記号

対称性

文献[23]より

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell_3 & \ell_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_3 & \ell_1 & \ell_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3} \begin{pmatrix} \ell_3 & \ell_1 & \ell_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}, \tag{A.158}$$

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3} \begin{pmatrix} \ell_3 & \ell_1 & \ell_2 \\ -m_3 & -m_1 & -m_2 \end{pmatrix}. \tag{A.159}$$

$$\begin{pmatrix} \ell & \ell' & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{\ell-m}}{\sqrt{2\ell+1}} \delta_{\ell\ell'}. \tag{A.160}$$

和

文献[23]より

$$\sum_M (-1)^{L+M} \begin{pmatrix} \ell & L & L \\ -m & M & -M \end{pmatrix} = \delta_{\ell,0}\delta_{m,0}\sqrt{\frac{2L+1}{2\ell+1}}, \tag{A.161}$$

$$\sum_{M,M'} \begin{pmatrix} \ell & L & L' \\ -m & M & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & L & L' \\ -m' & M & M' \end{pmatrix} = \frac{1}{2\ell+1}\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}. \tag{A.162}$$

漸化式: L_1, L_2 and L_3

文献[23], 8.6章の式(25)より

$$a \begin{pmatrix} L_1 & \ell & L_2 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} L_1 & \ell & L_2+1 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} L_1 & \ell & L_2+2 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} \tag{A.163}$$

ただし

$$\begin{aligned} a &= \left\{(L_2+1)^2 - M_3^2\right\}^{1/2} \alpha, \\ b &= -M_2\beta_1 + M_3\beta_2, \\ c &= -\left\{(L_2+2) - M_3^2\right\}^{1/2} \gamma. \end{aligned} \tag{A.164}$$

α, β_i, γは

$$\begin{aligned} \alpha &= (L_2+2)\sqrt{(-L_2+\ell+L_1)(L_2-\ell+L_1+1)(L_2+\ell-L_1+1)(L_2+\ell+L_1+2)}, \\ \beta_1 &= 2(L_2+1)(L_2+2)(2L_2+3), \\ \beta_2 &= (2L_2+3)[(L_2+1)(L_2+2)+\ell(\ell+1)-L_1(L_1-1)], \\ \gamma &= (L_2+1)\sqrt{(-L_2+\ell+L_1-1)(L_2-\ell+L_1+2)(L_2+\ell-L_1+2)(L_2+\ell+L_1+3)}. \end{aligned} \tag{A.165}$$

漸化式: M_1, M_2 and M_3

文献 [23] の8.6章, 式 (4) より

$$
\begin{aligned}
&-\sqrt{(L_3 \pm M_3)(L_3 \mp M_3 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ M_1 & M_2 & -M_3 \pm 1 \end{pmatrix} \\
&= \sqrt{(L_1 \mp M_1)(L_1 \pm M_1 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ M_1 \pm 1 & M_2 & -M_3 \end{pmatrix} \\
&+ \sqrt{(L_2 \mp M_2)(L_2 \pm M_2 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ M_1 & M_2 \pm 1 & -M_3 \end{pmatrix} .
\end{aligned} \tag{A.166}
$$

いくつかの場合について書き下しておく. $M_1 = M_2 = 0$, $M_3 = -1$の場合

$$
\begin{aligned}
-\sqrt{(L_3+1)L_3} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sqrt{L_1(L_1+1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&+ \sqrt{L_2(L_2+1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} .
\end{aligned} \tag{A.167}
$$

$M_1 = M_2 = M_3 = -1$の場合

$$
\begin{aligned}
-\sqrt{(L_3-1)(L_3+2)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} &= \sqrt{(L_1+1)L_1} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \\
&+ \sqrt{(L_2+1)L_2} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} .
\end{aligned} \tag{A.168}
$$

$M_1 = 2$, $M_2 = -1$, $M_3 = 0$の場合

$$
\begin{aligned}
-\sqrt{L_3(L_3+1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 2 & -1 & -1 \end{pmatrix} &= \sqrt{(L_1+2)(L_1-1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\
&+ \sqrt{(L_2-1)(L_2+2)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix} .
\end{aligned} \tag{A.169}
$$

特殊な場合：$L_3 = L_1 + L_2$

文献[23]の8.5章, 式(3)より

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{L_1+L_2+M_1+M_2}}{\sqrt{2L_1 + 2L_2 + 1}} \\
&\times \left[\frac{(2L_1)!(2L_2)!(L_1+L_2+M_1+M_2)!(L_1+L_2-M_1-M_2)!}{(2L_1+2L_2)!(L_1+M_1)!(L_1-M_1)!(L_2+M_2)!(L_2-M_2)!} \right]^{1/2} .
\end{aligned} \tag{A.170}
$$

これは以下の対称性をもつ

$$
\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ M_1 & M_2 & -M_1 - M_2 \end{pmatrix} . \tag{A.171}
$$

$M_1 = M_2 = M_3 = 0$の場合, 式(A.170)は

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{L_1+L_2}}{\sqrt{2L_1 + 2L_2 + 1}} \left[\frac{(2L_1)!(2L_2)!(L_1+L_2)!(L_1+L_2)!}{(2L_1+2L_2)!(L_1)!(L_1)!(L_2)!(L_2)!} \right]^{1/2} \\
&= \frac{(-1)^{L_1+L_2}}{\sqrt{2L_1 + 2L_2 + 1}} \prod_{i=1}^{L_2} \left[\frac{(i-1/2)(i+L_1)}{i(i+L_1-1/2)} \right]^{1/2} .
\end{aligned} \tag{A.172}
$$

式(A.170)を式(A.172)で割ると

$$\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1+L_2 \\ M_1 & M_2 & -M_1-M_2 \end{pmatrix} = (-1)^{M_1+M_2} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1+L_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \left[\frac{(L_1+L_2+M_1+M_2)!}{(L_1+L_2)!} \frac{(L_1+L_2-M_1-M_2)!}{(L_1+L_2)!} \times \frac{(L_1)!}{(L_1+M_1)!} \frac{(L_1)!}{(L_1-M_1)!} \frac{(L_2)!}{(L_2+M_2)!} \frac{(L_2)!}{(L_2-M_2)!} \right]^{1/2}. \quad (A.173)$$

特殊な場合： $L_3 = L_1 + L_2 - 1$

文献[23]の8.5章, 式(8)より (something wrong ?),

$$\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1+L_2-1 \\ -M_1 & -M_2 & M_1+M_2 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{L_1-L_2+M_1+M_2}}{\sqrt{2L_1+2L_2+1}} 2(L_2M_1 - L_1M_2) \times \left[\frac{(2L_1-1)!(2L_2-1)!(L_1+L_2+M_1+M_2-1)!(L_1+L_2-M_1-M_2-1)!}{(2L_1+2L_2)!(L_1+M_1)!(L_1-M_1)!(L_2+M_2)!(L_2-M_2)!} \right]^{1/2} \quad (A.174)$$

これは以下のように書き直せる (the following formula seems correct)

$$\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1+L_2-1 \\ -M_1 & -M_2 & M_1+M_2 \end{pmatrix} = (L_2M_1 - L_1M_2) \left[\frac{(2L_1+2L_2+1)}{L_1L_2(L_1+L_2+M_1+M_2)(L_1+L_2-M_1-M_2)} \right]^{1/2} \times \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1+L_2 \\ -M_1 & -M_2 & M_1+M_2 \end{pmatrix}. \quad (A.175)$$

特殊な場合： $M_1 = M_2 = M_3 = 0$

$L = \ell_1 + \ell_2 + \ell_3$が偶数のとき

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{L/2} \frac{(L/2)!}{(L/2-\ell_1)!(L/2-\ell_2)!(L/2-\ell_3)!} \left[\frac{(L-2\ell_1)!(L-2\ell_2)!(L-2\ell_3)!}{(L+1)!} \right]^{1/2} \quad (A.176)$$

奇数であれば0となる.

クレプシュ・ゴルダン係数

Clebsch-Gordan（クレプシュ・ゴルダン）係数はウィグナー3j記号と以下のように関係している(文献[23]の8.1章, 式(12)より）：

$$C^{\ell_3,m_3}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2} = (-1)^{\ell_1-\ell_2+m_3} \sqrt{2\ell_3+1} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \quad (A.177)$$

近似

文献 [21] より，$\ell \gg 1$のとき，$L=\ell_1+\ell_2+\ell_3$が偶数であれば

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ 2 & 0 & -2\end{pmatrix} &\simeq \frac{(-1)^{L/2}}{2}\left[\frac{\ell_2^2-\ell_1^2-\ell_3^2}{\ell_1^2\ell_3^2}-1\right]\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \qquad (A.178)\\ &\simeq \frac{(-1)^{L/2}}{2}\left[\frac{\ell_2^2-\ell_1^2-\ell_3^2}{\ell_1^2\ell_3^2}-1\right]\\ &\quad\times\frac{(L/2)!}{(L/2-\ell_1)!(L/2-\ell_2)!(L/2-\ell_3)!}\left[\frac{(L-2\ell_1)!(L-2\ell_2)!(L-2\ell_3)!}{(L+1)!}\right]^{1/2}. \qquad (A.179)\end{aligned}$$

Lが奇数であれば

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}\ell_1 & \ell_2 & \ell_3\\ 2 & 0 & -2\end{pmatrix} &\simeq \frac{(-1)^{(L-1)/2}}{2}[L(L-2\ell_1)(L-2\ell_2)(L-2\ell_3)]^{1/2}\frac{\ell_2^2-\ell_1^2-\ell_3^2}{\ell_1^2\ell_3^2}\\ &\quad\times\frac{(L/2)!}{(L/2-\ell_1)!(L/2-\ell_2)!(L/2-\ell_3)!}\left[\frac{(L-2\ell_1)!(L-2\ell_2)!(L-2\ell_3)!}{(L+1)!}\right]^{1/2} \qquad (A.180)\end{aligned}$$

A.3　特殊関数

A.3.1　エルミート多項式

定義

確率の分野でよく使われる定義は

$$h_n(x) = \mathrm{e}^{x^2/2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \mathrm{e}^{x^2/2} \qquad (A.181)$$

$$h_{-1}(x) = \mathrm{e}^{x^2/2}\int_x^\infty \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{t^2/2} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\mathrm{e}^{x^2/2}\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right). \qquad (A.182)$$

特に

$$\begin{aligned}&h_0(x)=1\,, \quad h_1(x)=x\,, \quad h_2(x)=x^2-1\,, \quad h_3(x)=x^3-3x\,,\\ &h_4(x)=x^4-6x^2+3\,, \quad h_5(x)=x^5-10x^3+15x\,. \qquad (A.183)\end{aligned}$$

別の定義として

$$H_n(x) = \mathrm{e}^{x^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \mathrm{e}^{-x^2} = \mathrm{e}^{x^2/2}\left(x-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \mathrm{e}^{-x^2/2}. \qquad (A.184)$$

これらは以下で結びつく：

$$H_n(x) = 2^{n/2}h_n(\sqrt{2}\,x)\,. \qquad (A.185)$$

性質

エルミート多項式の直交関係は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ h_n(x) h_m(x) \mathrm{e}^{-x^2} = \sqrt{\pi}\, n! \delta_{mn} \tag{A.186}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ H_n(x) H_m(x) \mathrm{e}^{-x^2} = \sqrt{2\pi}\, 2^n n! \delta_{mn}\,. \tag{A.187}$$

漸化式：

$$h_{n+1}(x) = x h_n(x) - \frac{\mathrm{d}h_n(x)}{\mathrm{d}x}\,, \qquad \frac{\mathrm{d}h_n(x)}{\mathrm{d}x} = n h_{n-1}(x) \tag{A.188}$$

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - \frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x}\,, \qquad \frac{\mathrm{d}H_n(x)}{\mathrm{d}x} = 2n H_{n-1}(x)\,. \tag{A.189}$$

多項式表示：

$$H_n(x) = \begin{cases} n! \displaystyle\sum_{m=0}^{n/2} \frac{(-1)^{n/2-m}}{(2m)!(n/2-m)!} (2x)^{2m} & (n = \text{even}) \\ n! \displaystyle\sum_{m=0}^{(n-1)/2} \frac{(-1)^{(n-1)/2-m}}{(2m+1)!((n-1)/2-m)!} (2x)^{2m+1} & (n = \text{odd}) \end{cases}\,. \tag{A.190}$$

生成関数：

$$\exp(xt - t^2/2) = \sum_{n=0}^{\infty} h_n(t) \frac{t^n}{n!}\,, \qquad \exp(2xt - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(t) \frac{t^n}{n!}\,. \tag{A.191}$$

ルジャンドル多項式との関係：

$$H_{2n}(x) = (-4)^n n! L_n^{-1/2}(x^2) = 4^n n! \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \binom{n-1/2}{n-i} \frac{x^{2i}}{i!}\,, \tag{A.192}$$

$$H_{2n+1}(x) = 2(-4)^n n! x L_n^{-1/2}(x^2) = 2 \times 4^n n! \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \binom{n+1/2}{n-i} \frac{x^{2i+1}}{i!}\,. \tag{A.193}$$

A.3.2　ベッセル関数

ベッセル関数、ノイマン関数は以下の二階微分方程式の解である：

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{z} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) f = 0\,. \tag{A.194}$$

ベッセル関数の表式は

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu + m + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2m}\,. \tag{A.195}$$

ノイマン関数は

$$Y_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin \nu\pi}\,. \tag{A.196}$$

性質

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x)\,, \qquad Y_{-n}(x) = (-1)^n Y_n(x)\,. \tag{A.197}$$

$$J_\nu(z) = \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu+1)}\,{}_0F_1(\nu+1; -z^2/4)\,. \tag{A.198}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} x^n J_n = x^n J_{n-1}(x)\,. \tag{A.199}$$

漸化式

$$J_{\nu-1}(z) + J_{\nu+1}(z) = \frac{2\nu}{z} J_\nu(z)\,, \tag{A.200}$$

$$J_{\nu-1}(z) - J_{\nu+1}(z) = 2\frac{\mathrm{d}J_\nu(z)}{\mathrm{d}z}\,. \tag{A.201}$$

漸近形

$$J_n(x \sim 0) = \frac{1}{n!}\left(\frac{x}{2}\right)^n \tag{A.202}$$

$$J_\nu(x \to \infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{2\nu+1}{4}\pi\right) \tag{A.203}$$

$$Y_n(x \sim 0) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \ln \frac{x}{2} \\ -\frac{(n-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^{-n} \end{cases} \tag{A.204}$$

および

$$Y_\nu(x \to \infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{2\nu+1}{4}\pi\right) \tag{A.205}$$

積分

以下の積分は収束する：

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\; J(x)\,. \tag{A.206}$$

以下は証明である。まず、

$$\lim_{\gamma\to\infty} \int_\gamma^\infty \mathrm{d}x\; J_\nu(x) \sim \lim_{\gamma\to\infty} \int_\gamma^\infty \mathrm{d}x\; \frac{1}{\sqrt{x}} \cos(x - \alpha_\nu)\,. \tag{A.207}$$

このとき

$$\int_\gamma^\infty \mathrm{d}x\ \frac{1}{\sqrt{x}}\cos(x-\alpha_\nu) = \left[\frac{1}{\sqrt{x}}\sin(x-\alpha_\nu)\right]_\gamma^\infty + \int_\gamma^\infty \mathrm{d}x\ \frac{1}{2\sqrt{x}^3}\sin(x-\alpha_\nu)\,. \tag{A.208}$$

したがって

$$\left|\int_\gamma^\infty \mathrm{d}x\ \frac{1}{2\sqrt{x}^3}\sin(x-\alpha_\nu)\right| \le \int_\gamma^\infty \mathrm{d}x\ \frac{1}{2\sqrt{x}^3} \le \frac{1}{\gamma}\,. \tag{A.209}$$

一方で、$x\to 0$のとき

$$J_\nu(x) \sim x^\nu\,. \tag{A.210}$$

他の公式

Hanseの公式

$$J_n(z) = \int_{-\pi}^{\pi}\frac{\mathrm{d}\theta}{2\pi}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}z\cos\theta}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}n(\theta-\pi/2)}\,, \tag{A.211}$$

ここで$n\ge 0$。

A.3.3　球ベッセル関数

球ベッセル関数は以下の微分方程式の解として定義される：

$$\frac{d^2f}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{df}{dx} + \left(1 - \frac{n(n+1)}{x}\right)f = 0\,. \tag{A.212}$$

$x\to 0$で、解をx^mの形で表せるとすると、$m(m+1)=n(n+1)$が成り立つ。これから、$m=n$あるいは$m=-n-1$ の二つの解があることが分かる。$m=n$の解は$x=0$で正則であるが、$m=-n-1$の解は発散する。以下の関数は上の微分方程式を満たす：

$$h_n^{(1)}(x) = -\frac{(x/2)^n}{n!}\int_1^{\mathrm{i}\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}(1-t^2)^n\,, \tag{A.213}$$

$$h_n^{(2)}(x) = \frac{(x/2)^n}{n!}\int_{-1}^{\mathrm{i}\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}(1-t^2)^n\,. \tag{A.214}$$

これから

$$j_n(x) = \frac{h_n^{(1)}+h_n^{(2)}}{2}\,, \qquad n_n(x) = \frac{h_n^{(1)}-h_n^{(2)}}{2\mathrm{i}}\,, \tag{A.215}$$

を定義する。ここで

$$j_n(x) = -\frac{(x/2)^n}{2n!}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}(1-t^2)^n\,, \tag{A.216}$$

である。

ベッセル関数を用いると

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{n+1/2}(x)\,, \qquad n_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}Y_{n+1/2}(x) = (-1)^{n+1}\sqrt{\frac{\pi}{2x}}J_{-n-1/2}(x)\,. \tag{A.217}$$

で表される。

微分を用いると

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n \frac{\sin x}{x}\,, \tag{A.218}$$

$$n_n(x) = -(-x)^n \left(\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \frac{\cos x}{x}\,. \tag{A.219}$$

特殊な場合

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}\,, \quad j_1(x) = \frac{\sin x - x\cos x}{x^2}\,, \quad j_2(x) = \frac{(3-x^2)\sin x - 3x\cos x}{x^3}\,, \tag{A.220}$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}\,, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x + x\sin x}{x^2}\,, \quad n_2(x) = -\frac{(3-x^2)\cos x + 3x\sin x}{x^3}\,. \tag{A.221}$$

反転公式

$$j_n(-x) = (-1)^n j_n(x)\,, \qquad n_n(-x) = (-1)^{n+1} n_n(x)\,. \tag{A.222}$$

級数表示

級数で表すと[24]

$$j_n(x) = (2x)^n \sum_k^\infty \frac{(-1)^k (k+n)!}{k!(2k+2n+1)!} x^{2k} \tag{A.223}$$

$$= x^n \sum_k^\infty \frac{(-1)^k}{k!(2k+2n+1)!!} \left(\frac{x^2}{2}\right)^k\,, \tag{A.224}$$

$$n_n(x) = \frac{(-1)^{n+1}}{2^n x^{n+1}} \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k (k-n)!}{k!(2k-2n)!} x^{2k} \tag{A.225}$$

$$= \frac{(-1)^{n+1}\sqrt{\pi}}{2^n x^{n+1}} \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k 4^(n-k)}{\Gamma(k+1)\Gamma(1/2-n+k)} x^{2k} \tag{A.226}$$

$$= \frac{(-1)^n}{x^{n+1}} \sum_k^\infty \frac{(-1)^k}{k!(2k-2n+1)!!} \left(\frac{x^2}{2}\right)^k\,. \tag{A.227}$$

漸近形

$x \to 0$においては

$$j_n(x \sim 0) = \frac{x^n}{(2n+1)!} \tag{A.228}$$

$$n_n(x \sim 0) = -\frac{(2n-1)!!}{x^n} \tag{A.229}$$

一方で$x \to \infty$では

$$j_n(x \to \infty) = \frac{1}{x}\cos\left(x - \frac{n+1}{2}\pi\right) \qquad n_n(x \to \infty) = \frac{1}{x}\sin\left(x - \frac{n+1}{2}\pi\right) \tag{A.230}$$

漸化式

$j_n(x)$の積分表示を微分し、余った積分項を部分積分することで、球ベッセルの微分は

$$j_n'(x) = j_{n-1}(x) - (n+1)\frac{j_n(x)}{x}\,. \tag{A.231}$$

で与えられることが分かる。あるいは

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^{n+1}j_n(x) = x^{n+1}j_{n-1}(x)\,. \tag{A.232}$$

とも書ける。さらに球ベッセル関数が満たす微分方程式を使うことで、漸化式

$$j_{n-1}(x) + j_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x}j_n(x)\,, \tag{A.233}$$

が得られる。

部分波展開

部分波展開とは

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx\cos\theta} = \sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\mathrm{i}^n j_n(kx)P_n(\cos\theta) \tag{A.234}$$

これは以下のようにして導かれる。まず、$j_n(x)$の積分表示をn回部分積分すれば

$$j_n(x) = -\frac{(x/2)^n}{2n!}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}\frac{(-1)^n}{(\mathrm{i}x)^n}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right)^n(1-t^2)^n\,, \tag{A.235}$$

となるので、ルジャンドル多項式の微分表示を使うことで

$$j_n(x) = -\frac{1}{2\mathrm{i}^n}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}P_n(t) \tag{A.236}$$

が得られる。これから、部分波展開の右辺は

$$\sum_{n=0}^{\infty}2\mathrm{i}^n\frac{2n+1}{2}P_n(t')j_n(x) = \int_{-1}^{1}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2n+1}{2}P_n(t')P_n(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}xt'} \tag{A.237}$$

となる。

一般の部分波展開は

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \sum_{n=0}^{\infty}4\pi\mathrm{i}^n j_n(kx)\sum_{m=-n}^{n}Y_{nm}^*(\widehat{\boldsymbol{k}})Y_{nm}(\widehat{\boldsymbol{x}}) \tag{A.238}$$

直交性

三次元デルタ関数のフーリエ表示を使うことで

$$\delta_D^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = \int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}}{(2\pi)^3}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}} \tag{A.239}$$

$$= \frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^3}\sum_{nm}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\ x^2 j_n(kx)j_n(kx')Y_{nm}^*(\widehat{\boldsymbol{k}})Y_{nm}(\widehat{\boldsymbol{k}}') \tag{A.240}$$

$$= \delta_D^{(2)}(\widehat{\boldsymbol{k}}-\widehat{\boldsymbol{k}}')\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\ x^2 j_n(kx)j_n(kx') \tag{A.241}$$

ただし球面調和関数の直交性を用いた。これより

$$\frac{1}{k^2}\delta_D^{(1)}(k-k') = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^2 j_n(kx)j_n(k'x) \tag{A.242}$$

が得られる。

異なる球ベッセル関数に対しては以下の直交関係が成り立つ[25]：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ j_n(x)j_m(x) = \frac{\pi}{2n+1}\delta_{nm}\,. \tag{A.243}$$

A.4 超関数

A.4.1 デルタ関数

一般の場合

任意の関数に対するフーリエ変換を考える。フーリエ変換は以下で定義する：

$$\tilde{f}(\boldsymbol{\ell}) = \frac{1}{B}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{x}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\ell}}\, f(\boldsymbol{x}) \tag{A.244}$$

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{A}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{x}}\tilde{f}(\boldsymbol{\ell})\,. \tag{A.245}$$

これより

$$f(\boldsymbol{x}) = \int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}}{A}\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}'}{B}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\cdot\boldsymbol{\ell}}f(\boldsymbol{x}') = \int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}'}{B}\ f(\boldsymbol{x}')\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}}{A}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\cdot\boldsymbol{\ell}} \equiv \int\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}'\ \Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')f(\boldsymbol{x}')\,. \tag{A.246}$$

ここで$\Delta(\boldsymbol{x})$はS上のデルタ関数で

$$\Delta(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{AB}\int\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\ell}}. \tag{A.247}$$

と定義した。同様に

$$\Delta(\boldsymbol{\ell}) = \frac{1}{AB}\int\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\ell}}. \tag{A.248}$$

と定義しておくと、任意関数に対しフーリエ変換・逆変換を行うと

$$\tilde{f}(\boldsymbol{\ell}) = \int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}}{B}\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}'}{A}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{\ell}'-\boldsymbol{\ell})\cdot\boldsymbol{x}}\tilde{f}(\boldsymbol{\ell}') = \int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}'}{B}\ \tilde{f}(\boldsymbol{\ell}')\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}}{A}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}')\cdot\boldsymbol{x}} = \int\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}'\ \Delta(\boldsymbol{\ell}-\boldsymbol{\ell}')\tilde{f}(\boldsymbol{\ell}')\,. \tag{A.249}$$

$\Delta(\boldsymbol{x})$と$\Delta(\boldsymbol{\ell})$は以下で関連付けられる：

$$\int\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}\ \Delta(\boldsymbol{x}) = \int\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}}{AB}\ \mathrm{e}^{i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\ell}} = \int\mathrm{d}^2\boldsymbol{\ell}\ \Delta(-\boldsymbol{\ell})\,. \tag{A.250}$$

A.5　行列計算

A.5.1　疑似逆行列

$\mathbf{A} \in K^{n\times m}$に対し、疑似逆行列(pseudoinverse)$\mathbf{A}^+$は以下の条件(Moore-Penrose condition)をすべて満たすものとして定義する：

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A} \tag{A.251}$$
$$\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+ \tag{A.252}$$
$$(\mathbf{A}\mathbf{A}^+)^\dagger = \mathbf{A}\mathbf{A}^+ \tag{A.253}$$
$$(\mathbf{A}^+\mathbf{A})^\dagger = \mathbf{A}^+\mathbf{A} \tag{A.254}$$

疑似逆行列は常に存在し、かつ一意に決まる。$\mathbf{A}$が実成分のみの場合、$\mathbf{A}^+$も同様となる。またA^{-1}が存在するとき$A^+ = A^{-1}$である。

もし$\mathbf{A}$の各列が互いに線形独立である場合、

$$\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\dagger \tag{A.255}$$

であり、$\mathbf{A}^+\mathbf{A} = I$となる。一方で各行が線形独立の場合は

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^\dagger(\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \tag{A.256}$$

であり、$\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = I$となる。

A.5.2　クロネッカー積

行列あるいはベクトル$\mathbf{A}$、$\mathbf{B}$に対し、

$$\mathbf{A}\otimes\mathbf{B} = \begin{pmatrix} A_{11}\mathbf{B} & A_{12}\mathbf{B} & \cdots & A_{1n}\mathbf{B} \\ A_{21}\mathbf{B} & A_{22}\mathbf{B} & \cdots & A_{2n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{m1}\mathbf{B} & A_{m2}\mathbf{B} & \cdots & A_{mn}\mathbf{B} \end{pmatrix} \tag{A.257}$$

をクロネッカー積とよぶ。

性質

以下の関係を満たす：

$$(\mathbf{A}+\mathbf{B})\otimes\mathbf{C} = \mathbf{A}\otimes\mathbf{C} + \mathbf{B}\otimes\mathbf{C} \tag{A.258}$$
$$\mathbf{A}\otimes(\mathbf{B}+\mathbf{C}) = \mathbf{A}\otimes\mathbf{B} + \mathbf{A}\otimes\mathbf{C} \tag{A.259}$$
$$(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})\otimes\mathbf{C} = \mathbf{A}\otimes(\mathbf{B}\otimes\mathbf{C}) \tag{A.260}$$
$$(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T\otimes\mathbf{B}^T \tag{A.261}$$
$$(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\otimes\mathbf{B}^{-1} \tag{A.262}$$
$$(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})^{+} = \mathbf{A}^{-1}\otimes\mathbf{B}^{+} \tag{A.263}$$
$$(\mathbf{A}\otimes\mathbf{B})(\mathbf{C}\otimes\mathbf{D}) = (\mathbf{A}\mathbf{C})\otimes(\mathbf{B}\mathbf{D})\,. \tag{A.264}$$

$\mathbf{A}$をn次正方行列、$\mathbf{B}$をm次正方行列とすると、

$$|\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}| = |\mathbf{A}|^m |\mathbf{B}|^n \tag{A.265}$$

A.5.3　行列のベクトル化とその応用

ベクトル化

実数値$m \times n$行列$\mathbf{A}$に対し、その要素を成分とするベクトル、すなわち行列のベクトル化(vectorization)を考える：

$$\mathrm{vec}(\mathbf{A})^T = (A_{11}, \ldots, A_{m1}, A_{12}, \ldots, A_{1n}, \ldots, A_{mn}) \,. \tag{A.266}$$

このとき、二つの行列のトレースは

$$\mathrm{Tr}[\mathbf{A}^T\mathbf{B}] = \mathrm{vec}(\mathbf{A})^T \mathrm{vec}(\mathbf{B}) \,. \tag{A.267}$$

ベクトル$\boldsymbol{a}$に対して定義される行列$\mathbf{A} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^\dagger$のベクトル化は

$$\mathrm{vec}\mathbf{A} = \boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{a}^* \tag{A.268}$$

と表せる。

３つの行列の積のベクトル化は

$$\mathrm{vec}(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2\mathbf{A}_3) = (\mathbf{A}_3^T \otimes \mathbf{A})\mathrm{vec}(\mathbf{A}_2) \,. \tag{A.269}$$

ここで$\otimes$はクロネッカー積を表す。式（A.267）と（A.269）を合わせると

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}_1^T\mathbf{A}_2\mathbf{A}_3\mathbf{A}_4) = \mathrm{vec}(\mathbf{A}_1)^T(\mathbf{A}_4^T \otimes \mathbf{A}_2)\mathrm{vec}(\mathbf{A}_3) \,, \tag{A.270}$$

となる。$\mathbf{A}_2 = \mathbf{A}_4 = \mathbf{C}$を対称行列、$(\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}_2)^{-1} = (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1})$を用いると

$$X \equiv \mathrm{Tr}(\mathbf{A}_1^T\mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}_2\mathbf{C}^{-1}) = \mathrm{vec}(\mathbf{A}_1)^T(\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1}\mathrm{vec}(\mathbf{A}_2) \,. \tag{A.271}$$

半ベクトル化

以下のようにn次対称行列の半ベクトル化(half-vectorization)を定義する：

$$\mathrm{vech}(\mathbf{A}) = (A_{11}, A_{21}, \ldots, A_{n1}, A_{22}, \ldots, A_{nn}) \tag{A.272}$$

全ベクトル化との関係を

$$\mathrm{vech}(\mathbf{A}) = \mathbf{B}_n^T \mathrm{vec}(\mathbf{A}) \tag{A.273}$$

と書き、$\mathbf{B}_n$を導入する。$\mathbf{B}_n$は消去行列(elimination matrix)と呼ばれる。一般に、$\mathbf{B}_n$の疑似逆行列$\mathbf{B}_n^+ = (\mathbf{B}_n^T\mathbf{B}_n)^{-1}\mathbf{B}_n^T$を用いると、$\mathbf{A}$が対称行列の場合

$$\mathrm{vec}(\mathbf{A}) = (\mathbf{B}_n^+)^T \mathrm{vech}(\mathbf{A}) \tag{A.274}$$

と逆変換できる。$(\mathbf{B}_n^+)^T$は複製行列(duplication matrix)となる。

例えば$n=2$のとき

$$\begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{21} \\ A_{22} \end{pmatrix} \tag{A.275}$$

の右辺の行列は$\mathbf{B}_2^T$である。また

$$\mathbf{B}_2^T\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.276}$$

$$\mathbf{B}_2\mathbf{B}_2^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.277}$$

であり、疑似逆行列は

$$\mathbf{B}_2^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.278}$$

さらに

$$\mathbf{B}_2\mathbf{B}_2^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.279}$$

式（A.271）は

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{2}\mathrm{vech}(\mathbf{A}_1)^T(\mathbf{B}_n^+)(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}\mathrm{vec}(\mathbf{A}_2) \\ &= \frac{1}{2}\mathrm{vec}(\mathbf{A}_1)^T(\mathbf{B}_n\mathbf{B}_n^+)(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}\mathrm{vec}(\mathbf{A}_2) \end{aligned} \tag{A.280}$$

と書き直せる。さらに上式は右側のベクトルを変換することもでき、その比較から（要確認）

$$\mathbf{B}_n\mathbf{B}_n^+(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1} = (\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}\mathbf{B}_n\mathbf{B}_n^+ \tag{A.281}$$

である。すなわち、$\mathbf{B}_n\mathbf{B}_n^+$と$(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}$の積は対称行列であり交換する。これから

$$\mathbf{M} \equiv \mathbf{B}_n^T(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})\mathbf{B}_n \tag{A.282}$$

と定義した行列$\mathbf{M}$は

$$\mathbf{B}_n^+(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}(\mathbf{B}_n^+)^T\mathbf{M} = \mathbf{B}_n^+(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}\mathbf{B}_n\mathbf{B}_n^+(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})\mathbf{B}_n = \mathbf{B}_n^+\mathbf{B}_n\mathbf{B}_n^+(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})^{-1}(\mathbf{C}\otimes\mathbf{C})\mathbf{B}_n = 1 \tag{A.283}$$

を満たす。従って、Fisher行列は

$$F_{ij} = \frac{1}{2}\mathrm{vech}(\mathbf{C}_{,i})^T\mathbf{M}^{-1}\mathrm{vech}(\mathbf{C}_{,j}) \tag{A.284}$$

となる。

参考文献

[1] J. Schmalzing and K. M. Gorski, *"Minkowski functionals used in the morphological analysis of cosmic microwave background anisotropy maps"*, astro-ph/9710185.

[2] J. Schmalzing, M. Takada, and T. Futamase, *"Effects of weak lensing on topology of cosmic microwave background maps"*, *Astrophys. J.* **544** (2000) L83–L86.

[3] C. Hikage, E. Komatsu, and T. Matsubara, *"Primordial Non-Gaussianity and Analytical Formula for Minkowski Functionals of the Cosmic Microwave Background and Large-scale Structure"*, *Astrophys. J.* **653** (2006) 11–26, [astro-ph/0607284].

[4] T. Matsubara, *"Statistical perturbation theory of cosmic fields. 1. Basic formalism and second order theory"*, *Astrophys. J.* (2003) [astro-ph/0006269].

[5] H. Tomita, *"Curvature Invariants of Random Interface Generated by Gaussian Fields"*, *Prog. Theor. Phys.* **76** (1986) 952.

[6] M.-a. Watanabe, S. Kanno, and J. Soda, *"Imprints of Anisotropic Inflation on the Cosmic Microwave Background"*, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **412** (2011) L83–L87, [arXiv:1011.3604].

[7] B. D. Sherwin and T. Namikawa, *"Cosmic birefringence tomography and calibration-independence with reionization signals in the CMB"*, arXiv:2108.09287.

[8] S. Hamimeche and A. Lewis, *"Likelihood Analysis of CMB Temperature and Polarization Power Spectra"*, *Phys. Rev. D* **77** (2008) 103013, [arXiv:0801.0554].

[9] Y. Takeuchi, K. Ichiki, and T. Matsubara, *"Constraints on primordial non-Gaussianity from galaxy-CMB lensing cross correlation"*, *Phys. Rev. D* **82** (2010) 023517, [arXiv:1005.3492].

[10] E. Komatsu and D. N. Spergel, *"Acoustic signatures in the primary microwave background bispectrum"*, *Phys. Rev. D* **63** (2001) 063002, [astro-ph/0005036].

[11] D. Babich, *"Optimal estimation of non-Gaussianity"*, *Phys. Rev. D* **72** (2005) 043003, [astro-ph/0503375].

[12] J. C. Slater, *Quantum Theory of Atomic Structure*, vol. 1. McGraw-Hill (New York), 1960.

[13] M. Zaldarriaga and U. Seljak, *"Reconstructing projected matter density from cosmic microwave background"*, *Phys. Rev. D* **59** (1999) 123507, [astro-ph/9810257].

[14] W. Hu and T. Okamoto, *"Mass Reconstruction with CMB Polarization"*, *Astrophys. J.* **574** (2002) 566–574.

[15] M. H. Kesden, A. Cooray, and M. Kamionkowski, *"Lensing Reconstruction with CMB Temperature and Polarization"*, *Phys. Rev. D* **67** (2003) 123507, [astro-ph/0302536].

[16] D. Hanson, G. Rocha, and K. Gorski, *"Lensing reconstruction from PLANCK sky maps:*

inhomogeneous noise", *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **400** (2009) 2169–2173, [arXiv:0907.1927].

[17] T. Namikawa, D. Hanson, and R. Takahashi, *"Bias-Hardened CMB Lensing"*, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **431** (2013) 609–620, [arXiv:1209.0091].

[18] C. M. Hirata and U. Seljak, *"Reconstruction of lensing from the cosmic microwave background polarization"*, *Phys. Rev. D* **68** (2003) 083002, [astro-ph/0306354].

[19] F. Olver, *Asymptotics and special functions.* Academic Press, New York, 1974.

[20] J. N. Goldberg *et al.*, *"Spin-s Spherical Harmonics and ð"*, *Journal of Mathematical Physics* (1967). View Online.

[21] W. Hu, *"Weak lensing of the CMB: A harmonic approach"*, *Phys. Rev. D* **62** (2000) 043007, [astro-ph/0001303].

[22] T. Namikawa, D. Yamauchi, and A. Taruya, *"Full-sky lensing reconstruction of gradient and curl modes from CMB maps"*, *J. Cosmol. Astropart. Phys.* **1201** (2012) 007, [arXiv:1110.1718].

[23] D. Varshalovich, A. Moskalev, and V. Kersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum.* World Scientific, 1989.

[24] E. W. Weisstein, *"Spherical Bessel Function of the First Kind"*, . MathWorld–A Wolfram Web Resource,
http://mathworld.wolfram.com/SphericalBesselFunctionoftheFirstKind.html.

[25] J. K. Bloomfield, S. H. P. Face, and Z. Moss, *"Indefinite Integrals of Spherical Bessel Functions"*, *arXiv e-prints* (Mar., 2017) [arXiv:1703.06428].