

宇宙論における統計的手法について

並河俊弥

Latest Version

概要

このノートでは、宇宙論的観測から得られたデータを利用することで、宇宙論的情報を引き出す手法についてまとめる。また付録ではよく利用する公式についてまとめる。

目次

1	準備	2
1.1	確率分布関数	2
1.2	相関関数の性質	8
1.3	推定	11
2	Fisher解析	12
2.1	準備	12
2.2	パラメータ決定精度	13
2.3	Fisher行列	14
2.4	Fisher行列の計算例	17
2.5	系統誤差の評価	21
3	宇宙論における推定I:揺らぎとその角度パワースペクトル	22
3.1	CMB観測における尤度関数	22
3.2	角度パワースペクトルの推定	23
3.3	温度揺らぎの角度パワースペクトル：最尤推定	24
3.4	銀河サーベイ	26
4	宇宙論における推定II:CMBの重力レンズ効果	27
4.1	レンズ場の推定：Quadratic近似	27
4.2	Bias hardened estimator	29
4.3	レンズ場に対する最尤推定法	30
4.4	レンズ場の角度パワースペクトルの推定	31
付録A	球面調和関数	33
A.1	Legendre 多項式	33
A.2	Legendre陪多項式	35
A.3	偏光ベクトル	36
A.4	スピン演算子と微分作用	37
A.5	球面調和関数	38

付録B	Wigner 3j 記号	42
B.1	対称性	42
B.2	和	42
B.3	漸化式: L_1, L_2 and L_3	42
B.4	漸化式: M_1, M_2 and M_3	43
B.5	特殊な場合: $L_3 = L_1 + L_2$	43
B.6	特殊な場合: $L_3 = L_1 + L_2 - 1$	44
B.7	特殊な場合: $M_1 = M_2 = M_3 = 0$	44
B.8	クレプシュ・ゴルダン係数	44
B.9	近似	45
付録C	Wigner d function	45
C.1	Jacobi polynomial	45
C.2	Definition	45
C.3	性質	46
C.4	漸化式	46
C.5	特殊な場合	46
C.6	Wigner-3j 記号との関係	47
C.7	加法定理	47
C.8	Wigner D matrix	47
付録D	特殊関数	47
D.1	エルミート多項式	47
D.2	ベッセル関数	48
D.3	球ベッセル関数	50
付録E	超関数	52
E.1	デルタ関数	52
付録F	確率統計	54
F.1	モーメントとキュムラント	54
F.2	対数正規分布	54
付録G	行列計算	55
G.1	疑似逆行列	55
G.2	クロネッカー積	55
G.3	行列のベクトル化とその応用	56

1 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。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

標準とさ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

$$a_{\ell m} = \int d^2\hat{n} \Theta(\hat{n}) Y_{\ell m}^* \quad (1)$$

は、平均ゼロ、分散 C_ℓ のガウス分布に従う：

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

ここで C_ℓ は揺らぎ $a_{\ell m}$ の分散を表す。等方的な揺らぎの場合、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であるので、各 m すべてをまとめてデータベクトル $\mathbf{d}_\ell = \{a_{\ell, -\ell}, \dots, a_{\ell m}\}$ で表すと、このデータを得る確率は多次元ガウス分布

$$P(\mathbf{d}_\ell|C_\ell) = \prod_{m=-\ell}^{\ell} P(a_{\ell m}|C_\ell) = \frac{1}{(2\pi C_\ell)^{(2\ell+1)/2}} \exp\left(-\sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{|a_{\ell m}|^2}{2C_\ell}\right) \quad (3)$$

となる。

1.1.2 揺らぎの和の確率分布関数

一般に確率変数 x, y の和 $z = x + y$ の分布関数は

$$P(z) = \int dx \int dy \delta(x + y - z) P(x) P(y) = \int dx P(x) P(z - x) \quad (4)$$

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

$$\begin{aligned} P(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{(x - \mu_x)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(z - x - \mu_y)^2}{2\sigma_y^2}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)x^2 + 2(\mu_x\sigma_y^2 + (\mu_y - z)\sigma_x^2)x - (\mu_x^2\sigma_y^2 + (z - \mu_y)^2\sigma_x^2)}{2\sigma_x^2\sigma_y^2}\right] \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)\left(x - \frac{\mu_x\sigma_y^2 + (\mu_y - z)\sigma_x^2}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}\right)^2 - (z - \mu_x - \mu_y)^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right] \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \sqrt{2\sigma^2\pi} \exp\left[-\frac{(z - \mu_x - \mu_y)^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}} \exp\left[-\frac{(z - \mu_x - \mu_y)^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right] \end{aligned} \quad (5)$$

これより、和の分布は、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の揺らぎの統計的性質についてみる。球面上の揺らぎ $X(\hat{n}) = \sum_{\ell m} X_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{n})$ は、平均ゼロ、分散 C_ℓ のガウス分布に従う確率変数 $X_{\ell m}$ の和で与えられる。したがって、 $X(\hat{n})$ は平均ゼロであり、分散

$$\sigma_0^2 \equiv \langle X^2(\hat{n}) \rangle = \sum_{\ell m \ell' m'} \langle X_{\ell m} X_{\ell' m'} \rangle Y_{\ell m}(\hat{n}) Y_{\ell' m'}(\hat{n}) = \sum_{\ell} \frac{2\ell + 1}{4\pi} C_\ell \quad (6)$$

のガウス分布に従う。注意として、異なる二点間の相関も存在するため、共分散行列は対角にならない。

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

$$C_\ell \delta_{mm'} = \langle a_{\ell m} a_{\ell' m'}^* \rangle \quad (7)$$

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

$$\langle X(a_{\ell m}) \rangle = \int d^{(2\ell+1)} a_{\ell m} X(a_{\ell m}) P(\mathbf{d}_\ell | C_\ell) \quad (8)$$

を表す。ここで、 C_ℓ を観測から測定するさい、理論側の定義から

$$\hat{C}_\ell = \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |a_{\ell m}|^2 \quad (9)$$

が推定量の候補である。

ここで、 \hat{C}_ℓ が従う確率分布について見てみる。揺らぎの確率分布関数は

$$P(\mathbf{d}_\ell | C_\ell) d\mathbf{d}_\ell = \frac{1}{(2\pi C_\ell)^{(2\ell+1)/2}} \exp \left[-(2\ell+1) \frac{\hat{C}_\ell}{2C_\ell} \right] d\mathbf{d}_\ell \quad (10)$$

これを変数変換すると

$$\begin{aligned} P(\hat{C}_\ell | C_\ell) d\hat{C}_\ell &= \frac{1}{(2\pi C_\ell)^{(2\ell+1)/2}} \exp \left[-(2\ell+1) \frac{\hat{C}_\ell}{2C_\ell} \right] \frac{d\mathbf{d}_\ell}{d\hat{C}_\ell} d\hat{C}_\ell \\ &= A_\ell \frac{(\hat{C}_\ell)^{\frac{2\ell-1}{2}}}{(C_\ell)^{\frac{2\ell+1}{2}}} \exp \left[-(2\ell+1) \frac{\hat{C}_\ell}{2C_\ell} \right] d\hat{C}_\ell \end{aligned} \quad (11)$$

ただし規格化因子 A_ℓ は

$$1 = \int_0^\infty d\hat{C}_\ell P(\hat{C}_\ell | C_\ell) = A_\ell \int_0^\infty dx x^{\frac{2\ell-1}{2}} e^{-\frac{2\ell+1}{2}x} = A_\ell \left(\frac{2}{2\ell+1} \right)^{\frac{2\ell+1}{2}} \Gamma \left[\frac{2\ell+1}{2} \right] \quad (12)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_\ell \rangle &= \int_0^\infty d\hat{C}_\ell \hat{C}_\ell P(\hat{C}_\ell | C_\ell) \\ &= C_\ell A_\ell \int_0^\infty dx x^{\frac{2\ell+1}{2}} e^{-\frac{2\ell+1}{2}x} \\ &= C_\ell A_\ell \int_0^\infty dx x^{\frac{2\ell-1}{2}} e^{-\frac{2\ell+1}{2}x} = C_\ell \end{aligned} \quad (13)$$

となる。二乗期待値は

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_\ell^2 \rangle &= \int_0^\infty d\hat{C}_\ell \hat{C}_\ell^2 P(\hat{C}_\ell | C_\ell) \\ &= C_\ell^2 A_\ell \int_0^\infty dx x^{\frac{2\ell+3}{2}} e^{-\frac{2\ell+1}{2}x} \\ &= C_\ell^2 A_\ell \frac{2\ell+3}{2\ell+1} \int_0^\infty dx x^{\frac{2\ell+1}{2}} e^{-\frac{2\ell+1}{2}x} = C_\ell^2 \frac{2\ell+3}{2\ell+1} \end{aligned} \quad (14)$$

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 のに対し、 $\phi(t) \equiv \langle e^{itX} \rangle$ 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 で展開を考える：

$$\ln \phi(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n}{n!} (it)^n \quad (15)$$

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：

$$m_n = \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n \phi(t)}{\partial t^n} \Big|_{t=0} \quad (16)$$

これから $\phi(t)$ の t に関するTaylor展開は

$$\phi(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n m_n}{n!} t^n \quad (17)$$

両辺の対数をとることで

$$\ln \phi(t) = \ln \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n m_n}{n!} t^n \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n m_n}{n!} t^n - \frac{1}{2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n m_n}{n!} t^n \right)^2 + \dots \quad (18)$$

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

$$c_1 = m_1 \quad (19)$$

$$c_2 = m_2^2 - m_1^2 \quad (20)$$

$$c_3 = m_3 - 3m_2 m_1 + 2m_1^3 \quad (21)$$

$$c_4 = m_4 - 4m_3 m_1 - 3m_2^2 + 12m_2 m_1^2 - 6m_1^4 \quad (22)$$

などが得られる。

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

$$\begin{aligned} \langle e^{it\hat{C}_\ell} \rangle &= \int_0^\infty d\hat{C}_\ell e^{it\hat{C}_\ell} P(\hat{C}_\ell | C_\ell) \\ &= A_\ell \int_0^\infty dx x^{\frac{2\ell-1}{2}} e^{-(\frac{2\ell+1}{2} - itC_\ell)x} \\ &= A_\ell \left(\frac{2}{2\ell+1 - 2itC_\ell} \right)^{\frac{2\ell+1}{2}} \Gamma \left[\frac{2\ell+1}{2} \right] \\ &= \left(\frac{2\ell+1}{2\ell+1 - 2itC_\ell} \right)^{\frac{2\ell+1}{2}} \\ &= \left(\frac{1}{1 - itC_\ell/\beta_\ell} \right)^{\beta_\ell} \end{aligned} \quad (23)$$

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う便利である。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ian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

$$S_n \equiv \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \frac{X_i - \mu}{\sigma} \quad (24)$$

が従う確率分布を求めたいとする。中心極限定理より、 $n \rightarrow \infty$ 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

$$\phi_n(t) = \langle e^{itS_n} \rangle = \prod_{i=1}^n \langle e^{itY_i/\sqrt{n}} \rangle = [\phi(t/\sqrt{n})]^n \quad (25)$$

となる。ここで $\phi(t)$ は

$$\ln \phi(t) = -\frac{1}{2}t^2 + \sum_{i=3}^{\infty} \frac{c_i}{i!} (it)^i \quad (26)$$

と展開できるので、

$$\ln \phi_n(t) = -\frac{1}{2}t^2 + \sum_{i=3}^{\infty} \frac{c_i}{n^{i/2-1}i!} (it)^i \quad (27)$$

となる。これから、

$$\phi_n(t) = \exp \left[-\frac{t^2}{2} + \sum_{i=3}^{\infty} \frac{c_i}{n^{i/2-1}i!} (it)^i \right] = \exp \left[\sum_{i=3}^{\infty} \frac{c_i}{n^{i/2-1}i!} (it)^i \right] e^{-t^2/2} \quad (28)$$

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：

$$\begin{aligned} f_n(x) &= \exp \left[\sum_{i=3}^{\infty} \frac{c_i}{n^{i/2-1}i!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^i \right] e^{-x^2/2} \\ &= \left[1 - \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{c_3}{3!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^3 + \frac{1}{n} \left(\frac{c_4}{4!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^4 + \frac{1}{2} \frac{c_3^2}{3!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^6 \right) + \dots \right] e^{-x^2/2} \end{aligned} \quad (29)$$

上記の展開をEdgeworth展開と呼ぶ^{*1}。 $n \rightarrow \infty$ 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

$$e^{-x^2/2} h_n(x) = (-1)^n \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-x^2/2} \quad (30)$$

で定義すると、

$$f_n(x) = \left[1 - \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{c_3}{3!} h_3(x) + \frac{1}{n} \left(\frac{c_4}{4!} h_4(x) + \frac{1}{2} \frac{c_3^2}{3!} h_6(x) \right) + \dots \right] e^{-x^2/2} \quad (31)$$

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

$$V_0^{(d)} \equiv \int_Q dv, \quad (32)$$

$$V_k^{(d)} \equiv \frac{1}{\omega_{k-1} \binom{d}{j}} \int_{\partial Q} ds S_k(R_1, \dots, R_{d-1}) \quad (33)$$

^{*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：

$$V_0 = \int_Q dS, \quad (34)$$

$$V_1 = \frac{1}{4} \int_{\partial Q} d\ell, \quad (35)$$

$$V_2 = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial Q} d\ell \frac{1}{R}. \quad (36)$$

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

$$V_k(\nu) = \int d\hat{n} F_k(\nu; u) \quad (37)$$

で与えられる。ここで、積分範囲は全天であり、また

$$F_k(\nu; u) = \begin{cases} \theta(u - \nu) & (k = 0) \\ \frac{1}{4} \delta(u - \nu) \sqrt{u_{;\theta}^2 + u_{;\varpi}^2} & (k = 1) \\ \frac{1}{2\pi} \delta(u - \nu) \frac{2u_{;\theta} u_{;\varphi} u_{;\theta} u_{;\varphi} - u_{;\theta}^2 u_{;\varphi}^2 - u_{;\varphi}^2 u_{;\theta}^2}{u_{;\theta}^2 + u_{;\varphi}^2} & (k = 2) \end{cases} \quad (38)$$

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

$$\begin{aligned} \langle F_0(\nu; u) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} du \theta(u - \nu) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\nu}^{\infty} du e^{-u^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\nu^2/2} h_{-1}(\nu) \end{aligned} \quad (39)$$

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[1]

$$\langle u_{;i} \rangle = \langle u \rangle_{;i} = 0 \quad (40)$$

$$\langle uu_{;i} \rangle = \frac{1}{2} \langle u^2 \rangle_{;i} = 0 \quad (41)$$

$$\langle u_{;i} u_{;j} \rangle = \langle uu_{;i} \rangle_{;j} - \langle uu_{;ij} \rangle = -\langle uu_{;ij} \rangle = \delta_{ij} \sum_{\ell} \ell(\ell+1) \frac{C_{\ell}}{\sigma_0^2} \frac{2\ell+1}{8\pi} \equiv \frac{\sigma_1^2}{2\sigma_0^2} \quad (42)$$

ただし

$$(Y_{\ell m})_{;\theta} = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{2} (Y_{\ell m}^1 + Y_{\ell m}^{-1}) \quad (43)$$

$$(Y_{\ell m})_{;\varphi} = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{2} (Y_{\ell m}^1 - Y_{\ell m}^{-1}) \quad (44)$$

$$\sum_m (-1)^{m+s_1} Y_{\ell, -m}^{s_1} Y_{\ell m}^{s_2} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} Y_{\ell s_1}^{s_2}(0, 0) \quad (45)$$

$$Y_{\ell 1}^{-1}(0, 0) = Y_{\ell 1}^1(0, 0) = -\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \quad (46)$$

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、

$$\langle F_1(\nu; u) \rangle = \frac{1}{4} \langle \delta(u - \nu) \sqrt{u_{;\theta}^2 + u_{;\varpi}^2} \rangle = \frac{1}{4} \langle \delta(u - \nu) \rangle \langle \sqrt{u_{;\theta}^2 + u_{;\varpi}^2} \rangle \quad (47)$$

と分解できる。ここで

$$\langle \delta(u - \nu) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} du \delta(u - \nu) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\nu^2/2} \quad (48)$$

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

$$\begin{aligned}\langle \sqrt{u_{;\theta}^2 + u_{;\varphi}^2} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{x^2 + y^2} \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-(x^2+y^2)/2\sigma^2} \\ &= \frac{1}{\sigma^2} \int_0^{\infty} dr r^2 e^{-r^2/2\sigma^2} = \sqrt{\pi/2}\sigma\end{aligned}\quad (49)$$

最終的に

$$\langle F_1(\nu; u) \rangle = \frac{1}{8} \frac{\sigma_1}{\sqrt{2}\sigma_0} e^{-\nu^2/2} \quad (50)$$

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、

$$\langle F_2(\nu; u) \rangle = -\frac{1}{2\pi} \left[\langle \delta(u - \nu) u_{;\varphi\varphi} \rangle \left\langle \frac{u_{;\theta}^2}{u_{;\theta}^2 + u_{;\varphi}^2} \right\rangle + \langle \delta(u - \nu) u_{;\theta\theta} \rangle \left\langle \frac{u_{;\varphi}^2}{u_{;\theta}^2 + u_{;\varphi}^2} \right\rangle \right] \quad (51)$$

ここで

$$\langle \delta(u - \nu) u_{;ii} \rangle = -\langle \delta(u - \nu) u \rangle \langle u_{;i}^2 \rangle = -\frac{\nu e^{-\nu^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sigma_1^2}{2\sigma_0^2} \quad (52)$$

また

$$\left\langle \frac{u_{;j}^2}{u_{;i} u_{;i}} \right\rangle = \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} d\phi r e^{-r^2/2\sigma^2} \cos^2 \phi \frac{1}{2\pi\sigma^2} = \frac{1}{2} \quad (53)$$

したがって

$$\langle F_2(\nu; u) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\sigma_1^2}{2\sigma_0^2} \nu e^{-\nu^2/2} \quad (54)$$

$x = X_{\ell, m}$ として、確率変数の絶対値に対し

$$\begin{aligned}\langle |x| \rangle &= \langle x(2\theta(x) - 1) \rangle = 2\langle x\theta(x) \rangle = \int_0^{\infty} dx \frac{x}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/(2\sigma^2)} \\ &= \frac{-\sigma}{\sqrt{2\pi}} [e^{-x^2/(2\sigma^2)}]_0^{\infty} = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}\end{aligned}\quad (55)$$

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

ある揺らぎ $X(\hat{n})$ のフーリエ変換を考え、その二点相関

$$\langle X_{\ell} X_{\ell'} \rangle = \int d\hat{n} \int d\hat{n}' \xi(\hat{n}, \hat{n}') e^{-i\hat{n} \cdot \ell} e^{-i\hat{n}' \cdot \ell'}, \quad (56)$$

の性質を考える。ただし変数 \hat{n} はユークリッド空間内の座標であり、二次元平面、三次元空間などである。 X はそのいたるところで定義されているとする。

$\xi(\hat{n}, \hat{n}')$ が二点の差 $\Delta\hat{n} \equiv \hat{n}' - \hat{n}$ にのみ依存することを統計的一様であるとする、上述のフーリエ空間の統計量は

$$\begin{aligned}\langle X_{\ell} X_{\ell'} \rangle &= \int d\hat{n} \int d\Delta\hat{n} \xi(\Delta\hat{n}) e^{-i\hat{n} \cdot (\ell + \ell')} e^{-i\Delta\hat{n} \cdot \ell'} \\ &= \delta(\ell + \ell') \int d\Delta\hat{n} \xi(\Delta\hat{n}) e^{-i\Delta\hat{n} \cdot \ell'} \\ &\equiv \delta(\ell + \ell') P(\ell')\end{aligned}\quad (57)$$

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

$$\langle X_{\ell} X_{\ell'} \rangle = \delta(\ell + \ell') P(|\ell'|) \quad (58)$$

となる。等方であれば一様である。

1.2.2 二次元の非一様ノイズ

例えば実際の観測で起こりうる非一様な観測ノイズの異なる点での相関

$$\xi(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{n}}') = S(\hat{\mathbf{n}})\delta(\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{n}}') \quad (59)$$

を考える。平面近似で解析を行うと、これは（二次元の意味で）統計的に非一様かつ非等方である。このとき、

$$\langle X_{\ell} X_{\ell'} \rangle = \int d\hat{\mathbf{n}} S(\hat{\mathbf{n}}) e^{-i\hat{\mathbf{n}} \cdot (\ell + \ell')} \quad (60)$$

であり、 $\ell \neq \ell'$ の値も存在する。

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 $a(\hat{\mathbf{n}})$ 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

$$a_{\ell m} = \int d^2\hat{\mathbf{n}} Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{n}}) a(\hat{\mathbf{n}}) \quad (61)$$

である。 $\hat{\mathbf{n}}$ を $R\hat{\mathbf{n}}$ になるように球を回転させると $a(\hat{\mathbf{n}})$ は $a(R\hat{\mathbf{n}})$ 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} だけでもどすと

$$\begin{aligned} a_{\ell m}^R &= \int d^2\hat{\mathbf{n}}' Y_{\ell m}^*(R^{-1}\hat{\mathbf{n}}') a(\hat{\mathbf{n}}') \\ &= \int d^2\hat{\mathbf{n}}' \sum_{m'} D_{m'm}^{\ell*}(R) Y_{\ell m'}^*(\hat{\mathbf{n}}') a(\hat{\mathbf{n}}') = \sum_{m'} D_{m'm}^{\ell*}(R) a_{\ell m'} \end{aligned} \quad (62)$$

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

$$\langle a_{\ell_1 m_1}^R a_{\ell_2 m_2}^R \rangle = \sum_{m'_1 m'_2} D_{m'_1 m_1}^{\ell_1*}(R) D_{m'_2 m_2}^{\ell_2}(R) \langle a_{\ell_1 m'_1} a_{\ell_2 m'_2} \rangle. \quad (63)$$

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(351)で定義される積分を作用させると

$$C_{m_1 m_2}^{\ell_1 \ell_2} \equiv \langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} \rangle = \int d\Omega \sum_{m'_1 m'_2} D_{m'_1 m_1}^{\ell_1*}(\Omega) D_{m'_2 m_2}^{\ell_2}(\Omega) C_{m'_1 m'_2}^{\ell_1 \ell_2}. \quad (64)$$

ここでウィグナーD行列の直交性(352)を使うと

$$C_{m_1 m_2}^{\ell_1 \ell_2} = \delta_{\ell_1 \ell_2} \delta_{m_1 m_2} \sum_{m'_1} \frac{\delta_{m'_1 m'_2}}{2\ell_1 + 1} C_{m'_1 m'_2}^{\ell_1 \ell_2}. \quad (65)$$

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

$$C_{m_1 m_2}^{\ell_1 \ell_2} = C_{\ell} \delta_{\ell_1 \ell_2} \delta_{m_1 m_2} \quad (66)$$

となる必要がある。

三つの揺らぎの相関は

$$\langle a_{\ell_1 m_1}^R a_{\ell_2 m_2}^R a_{\ell_3 m_3}^R \rangle = \sum_{m'_1 m'_2 m'_3} D_{m'_1 m_1}^{\ell_1*}(R) D_{m'_2 m_2}^{\ell_2*}(R) D_{m'_3 m_3}^{\ell_3*}(R) \langle a_{\ell_1 m'_1} a_{\ell_2 m'_2} a_{\ell_3 m'_3} \rangle. \quad (67)$$

となる。この相関も回転不変だとすると、両辺を式(351)で定義される積分を作用させて

$$B_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \equiv \langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} a_{\ell_3 m_3} \rangle = \int d\Omega \sum_{m'_1 m'_2 m'_3} D_{m'_1 m_1}^{\ell_1*}(\Omega) D_{m'_2 m_2}^{\ell_2*}(\Omega) D_{m'_3 m_3}^{\ell_3*}(\Omega) B_{m'_1 m'_2 m'_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3}. \quad (68)$$

上式に式(353)を用いると

$$B_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} = \sum_{m'_1 m'_2 m'_3} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix} B_{m'_1 m'_2 m'_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3}. \quad (69)$$

ここで

$$B_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \equiv \sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} B_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \quad (70)$$

を定義すると

$$B_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} = \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} B_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}. \quad (71)$$

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：

$$\phi(\hat{\mathbf{n}}) \equiv \int_0^\infty d\chi W(\chi) \psi(\chi \hat{\mathbf{n}}, \eta) \quad (72)$$

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。 $\phi(\hat{\mathbf{n}})$ を球面調和関数 $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{n}})$ で展開すると

$$\phi(\hat{\mathbf{n}}) = \int_0^\infty d\chi W(\chi) \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{k}, \eta) e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{n}}} \quad (73)$$

$$= \int_0^\infty d\chi W(\chi) \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{k}, \eta) \sum_{\ell m} 4\pi i^\ell j_\ell(k\chi) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{k}}) \quad (74)$$

となる。球面調和関数による展開係数を用いれば

$$\phi_{\ell m} = 4\pi i^\ell \int_0^\infty d\chi W(\chi) \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{k}, \eta) j_\ell(k\chi) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{k}}) \quad (75)$$

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：

$$\langle \psi(\mathbf{k}, \eta) \psi(\mathbf{k}', \eta') \rangle \equiv \frac{2\pi^2}{k^3} \Delta_\psi(\mathbf{k}, \eta, \eta') \delta_D(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (76)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\ell m}^* \phi_{\ell' m'} \rangle &= (4\pi)^2 \int_0^\infty d\chi \int_0^\infty d\chi' W(\chi) W(\chi') \\ &\times \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^{3/2}} \langle \psi^*(\mathbf{k}, \eta) \psi(\mathbf{k}', \eta') \rangle Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{k}}') j_\ell(k\chi) j_{\ell'}(k'\chi') \end{aligned} \quad (77)$$

$$\begin{aligned} &= 4\pi \int_0^\infty d\chi \int_0^\infty d\chi' W(\chi) W(\chi') \\ &\times \int d \ln k j_\ell(k\chi) j_{\ell'}(k\chi') \int d^2 \hat{\mathbf{k}} \Delta_\psi(\mathbf{k}, \eta, \eta') Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (78)$$

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[2]）

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{\ell m}^* \phi_{\ell' m'} \rangle &= 4\pi \int_0^\infty d\chi \int_0^\infty d\chi' W(\chi) W(\chi') \int d\ln k j_\ell(k\chi) j_{\ell'}(k\chi') \\
&\quad \times \int d^2\hat{\mathbf{k}} \sum_{LM} \Delta_{\psi, LM}(k, \eta, \eta') Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell' m'}^*(\hat{\mathbf{k}}) \\
&= 4\pi \int_0^\infty d\chi \int_0^\infty d\chi' W(\chi) W(\chi') \int d\ln k j_\ell(k\chi) j_{\ell'}(k\chi') \\
&\quad \times \sum_{LM} \Delta_{\psi, LM}(k, \eta, \eta') (-1)^{m'} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)(2L+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ m & m' & M \end{pmatrix} \\
&= \sum_{LM} D_{\psi, LM}^{\ell\ell'} (-1)^{m'} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)(2L+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & \ell' & L \\ m & m' & M \end{pmatrix} \quad (79)
\end{aligned}$$

ここで

$$D_{\psi, LM}^{\ell\ell'} \equiv 4\pi \int_0^\infty d\chi \int_0^\infty d\chi' W(\chi) W(\chi') \int d\ln k j_\ell(k\chi) j_{\ell'}(k\chi') \Delta_{\psi, LM}(k, \eta, \eta') \quad (80)$$

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 $\Theta(\hat{\mathbf{n}})$ 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) \hat{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、 \hat{X} も真の値 X に近づくべきである。これは

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

を意味する。ただし、 $\langle \cdots \rangle_\Theta$ は Θ に対する統計平均である。現実の観測では、一度の観測ですでに真に近い値を推定したい。したがって、

- 最小分散(optimal) : $\langle |\hat{X} - X|^2 \rangle_\Theta$ 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 $\hat{\Theta}$ を観測し、それから角度パワースペクトル $C^{\Theta\Theta}$ を得る場合、その確率は

$$P(C^{\Theta\Theta} | \hat{\Theta}) P(\hat{\Theta}), \quad (81)$$

で表される。一方、これは

$$P(\hat{\Theta} | C^{\Theta\Theta}) P(C^{\Theta\Theta}), \quad (82)$$

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：

$$P(C^{\Theta\Theta} | \hat{\Theta}) = \frac{P(\hat{\Theta} | C^{\Theta\Theta}) P(C^{\Theta\Theta})}{P(\hat{\Theta})}. \quad (83)$$

左辺は事後確率(Posterior probability)、左辺の $P(C^{\Theta\Theta})$ と $P(\hat{\Theta})$ は事前確率分布(Prior probability)と呼ばれる。また、 $P(\hat{\Theta} | C^{\Theta\Theta})$ 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樣である場合には、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：

$$P(\mathbf{s}|\mu, \sigma) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp \left\{ -\sum_{i=1}^n \frac{(s_i - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (84)$$

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

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n s_i, \quad (85)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (s_i - \hat{\mu})^2 \quad (86)$$

が得られる。

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

$$\langle \hat{\sigma}^2 \rangle = \frac{n-1}{n} \sigma^2 \quad (87)$$

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

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n s_i^2 \quad (88)$$

となる。これは不偏推定量である。

2 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 $d_i (i = 1, 2, \dots, n)$ に対して、データベクトル \mathbf{d} を

$$\mathbf{d} \equiv \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix} \quad (89)$$

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

$$\mathbf{p} \equiv \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_m \end{pmatrix} \quad (90)$$

を定義する。

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

$$\int d\mathbf{d} \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p}) = 1 \quad (\forall \mathbf{p}) \quad (91)$$

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

$$\langle X \rangle \equiv \int d\mathbf{d} X(\mathbf{d}) \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p}) \quad (92)$$

と表す。 $\langle X \rangle$ は \mathbf{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 \mathbf{d} から計算される i 次元の量 $\mathbf{X}(\mathbf{d}) = (X_1(\mathbf{d}), X_2(\mathbf{d}), \dots, X_i(\mathbf{d}))$ に対して

$$\mathbf{C}(\mathbf{X}) \equiv \langle^t [\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle] [\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle] \rangle \quad (93)$$

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 $\hat{\mathbf{p}}$ としたとき、 $\hat{\mathbf{p}}$ の期待値が理論のパラメータ \mathbf{p} に一致する場合、 $\hat{\mathbf{p}}$ は不偏推定量とよばれる。これを式で表すと

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \equiv \int d\mathbf{d} \hat{\mathbf{p}}(\mathbf{d}) \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p}) = \mathbf{p} \quad (94)$$

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 \mathbf{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

$$\begin{aligned} \ln P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) &= \ln P(\mathbf{p}_0|\mathbf{d}) + \left. \frac{\partial \ln P(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^t \left. \frac{\partial^2 \ln P(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i \partial p_j} \right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) + \mathcal{O}(|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0|^3) \end{aligned} \quad (95)$$

ここで $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ における対数事後確率分布のHessianを $\mathbf{H}(\mathbf{p}_0)$ とおいた。上式において $|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0|$ 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 \mathbf{p} に対するGauss分布であるとする。事後確率分布は

$$P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) = P(\mathbf{p}_0|\mathbf{d}) \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^t \mathbf{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{d}) (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \right] \quad (96)$$

ただし、 $\mathbf{p} - \mathbf{p}_0$ に比例する項は

$$\begin{aligned} 0 &= \int d\mathbf{p} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) \\ &= \int d\mathbf{p} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) P(\mathbf{p}_0|\mathbf{d}) \exp \left[\alpha (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) - \frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^t \mathbf{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{d}) (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \right] \end{aligned} \quad (97)$$

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

$$P(p_1|\mathbf{d}) = \int d^{m-1} p_2 p_3 \cdots p_m P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) \quad (98)$$

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：

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{d}) = \int d\mathbf{p} P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0) \cdot \mathbf{k}} \quad (99)$$

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 $\mathbf{k} = 0$ とおくことで、

$$\left. \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{k}, \mathbf{d})}{\partial k_i^2} \right|_{\mathbf{k}=0} = \int d\mathbf{p} (p_i - p_{i,0})^2 P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) = \sigma_i^2 \quad (100)$$

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

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{d}) = P(\mathbf{p}_0|\mathbf{d}) \int d\mathbf{p} \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{p}^t \mathbf{H}(\mathbf{p}_0, \mathbf{d}) \mathbf{p} - i \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} \right] \quad (101)$$

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

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{d}) = P(\mathbf{p}_0|\mathbf{d}) \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{k}^t \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{p}_0, \mathbf{d}) \mathbf{k} \right] \quad (102)$$

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：

$$\frac{\partial \ln P(\mathbf{p}|\mathbf{d})}{\partial p_i} = \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} + \frac{\partial \ln P(\mathbf{p})}{\partial p_i}. \quad (103)$$

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。 \mathbf{p}_0 がこの区間に入っていれば、 $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ 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 $\mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})$ に従う確率分布で \mathbf{d} に対し平均操作を行って得られる行列

$$F(\mathbf{p}_0) \equiv \langle H(\mathbf{p}_0, \mathbf{d}) \rangle = - \left\langle \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} = - \left\langle \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} \quad (104)$$

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

$$\ln P(\mathbf{p}) \equiv \langle \ln P(\mathbf{p}|\mathbf{d}) \rangle = \text{const.} - \frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^t \mathbf{F}(\mathbf{p}_0) (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \quad (105)$$

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 \mathbf{p}_0 の二次元面を求めればよい。具体的には、 \mathbf{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、

$$P = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} \right) \right] \quad (106)$$

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

$$x = \sigma_x t \sin \theta, \quad y = \sigma_y t \cos \theta \quad (107)$$

を行うと、

$$dx = \sigma_x (\sin \theta dt + t \cos \theta d\theta) \quad (108)$$

$$dy = \sigma_y (\cos \theta dt - t \sin \theta d\theta) \quad (109)$$

$$|dx \wedge dy| = \sigma_x \sigma_y t dt \wedge d\theta \quad (110)$$

を用いて

$$0.68 = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \int_0^s dt \int_0^{2\pi} d\theta e^{-t^2/2} \sigma_x \sigma_y t = \int_0^s dt t e^{-t^2/2} = 1 - e^{-s^2/2}. \quad (111)$$

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、

$$(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^t \mathbf{F}(\mathbf{p}_0) (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) = (1.51)^2 \quad (112)$$

で表現される。

2.3.3 情報の和

二つの独立な観測を組み合わせる場合を考える。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、 $\mathbf{p}_0 = \mathbf{0}$ とする。 $\mathbf{F} = \mathbf{F}^{(1)} + \mathbf{F}^{(2)}$ の描く楕円は

$$\mathbf{p}^t (\mathbf{F}^{(1)} + \mathbf{F}^{(2)}) \mathbf{p} = s^2 \quad (113)$$

である。これと $\mathbf{F}^{(1)}$ が描く楕円の交点は

$$\mathbf{p}^t \mathbf{F}^{(2)} \mathbf{p} = 0 \quad (114)$$

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 (91) において両辺を p_i で微分すると

$$0 = \int d\mathbf{d} \frac{\partial \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} = \int d\mathbf{d} \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p}) = \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} \right\rangle \quad (115)$$

となる。右辺の

$$V_i \equiv \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} \quad (116)$$

はスコア関数と呼ばれる。さらに p_j で微分を行うと

$$\left\langle \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_i} \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_j} \right\rangle = 0 \quad (117)$$

が得られる。上記の式は、Fisher行列とスコア関数を用いて

$$F_{ij}(\mathbf{p}) = \langle V_i V_j \rangle \quad (118)$$

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（94）の両辺を理論のパラメータ p_j で微分すると

$$\int d\mathbf{d} \, \hat{p}_i \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p})}{\partial p_j} \mathcal{L}(\mathbf{d}|\mathbf{p}) = \langle \hat{p}_i V_j \rangle = \delta_{ij} \quad (119)$$

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 $\mathbf{A}^t \equiv (\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{V})$ を考える。ただし \mathbf{V} はスコア関数を一まとめにしたベクトルである。 $\hat{\mathbf{p}}$ の共分散行列を $\mathbf{P} = \langle (\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^t \rangle$ と表すと、このベクトルの共分散行列 \mathbf{C} は、

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{F} \end{pmatrix} \quad (120)$$

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 \mathbf{U} に対して

$${}^t \mathbf{U} \mathbf{C} \mathbf{U} \geq 0 \quad (121)$$

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

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} \quad (122)$$

と分解すると、式（121）は

$${}^t \mathbf{u} \mathbf{P} \mathbf{u} + {}^t \mathbf{u} \mathbf{v} + {}^t \mathbf{v} \mathbf{u} + {}^t \mathbf{v} \mathbf{F} \mathbf{v} \geq 0 \quad (123)$$

と書き直せる。この式の左辺は

$${}^t \mathbf{u} (\mathbf{P} - \mathbf{F}^{-1}) \mathbf{u} + (\mathbf{u} + \mathbf{F} \mathbf{v})^t \mathbf{F}^{-1} (\mathbf{u} + \mathbf{F} \mathbf{v}) \geq 0 \quad (124)$$

任意の \mathbf{u}, \mathbf{v} で成り立つので、

$$\mathbf{P}_{ii} \geq \{\mathbf{F}^{-1}\}_{ii} \quad (125)$$

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

$$\mathcal{L} \equiv \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\mathbf{C}|}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{d} - \langle \mathbf{d} \rangle)^\dagger \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{d} - \langle \mathbf{d} \rangle) \right] \quad (126)$$

で与えられる。ここで、 \mathbf{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

$$\ln \mathcal{L} = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\ln \mathbf{C} + \mathbf{C}^{-1} \hat{\mathbf{C}}) \quad (127)$$

と表せる^{*2}。ただし $\hat{\mathbf{C}} = (\mathbf{d} - \langle \mathbf{d} \rangle)^\dagger (\mathbf{d} - \langle \mathbf{d} \rangle)$ である。スコア関数は

$$V_i = \frac{\partial \ln \mathcal{L}}{\partial p_i} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left(\mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} - \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \hat{\mathbf{C}} + \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial p_i} \right) \quad (128)$$

であり、さらに微分したものは

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}}{\partial p_i \partial p_j} &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left(-\mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_j} + \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial p_i \partial p_j} + \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_j} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \hat{\mathbf{C}} \right. \\ &\quad - \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial p_i \partial p_j} \mathbf{C}^{-1} \hat{\mathbf{C}} + \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_j} \mathbf{C}^{-1} \hat{\mathbf{C}} - \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial p_j} \\ &\quad \left. - \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_j} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial p_i} + \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{C}}}{\partial p_i \partial p_j} \right) \end{aligned} \quad (129)$$

となる。Fisher行列を得るため、式((129))の両辺を \mathbf{d} に関し、 $\mathcal{L}(\mathbf{d}, \mathbf{p})$ で平均をとる。ここで、 $\hat{\mathbf{C}}$ の平均は、その定義から

$$\langle \hat{\mathbf{C}} \rangle = \mathbf{C} \quad (130)$$

となる。一方、一回微分は

$$\left\langle \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial p_i} \right\rangle = -2 \left\langle (\mathbf{d} - \langle \mathbf{d} \rangle) \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_i} \right\rangle = -2 \langle \mathbf{d} - \langle \mathbf{d} \rangle \rangle \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_i} = 0 \quad (131)$$

であり、さらに二回微分は

$$\left\langle \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{C}}}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle = 2 \left\langle \frac{\partial \langle \mathbf{d} \rangle}{\partial p_i} \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_j} \right\rangle = 2 \frac{\partial \langle \mathbf{d} \rangle}{\partial p_i} \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_j} \quad (132)$$

これを用いると、式(129)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

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_j} \right) + \frac{\partial \langle \mathbf{d}^\dagger \rangle}{\partial p_j} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \langle \mathbf{d} \rangle}{\partial p_i} \quad (133)$$

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、

$$\mathbf{F}_{ij} = \sum_{\ell=2} \frac{2\ell+1}{2} \text{Tr} \left(\mathbf{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial p_i} \mathbf{C}_\ell^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_\ell}{\partial p_j} \right) \quad (134)$$

である。ここで

$$\mathbf{C}_\ell \equiv \begin{pmatrix} C_\ell^{\Theta\Theta} & C_\ell^{\Theta E} & 0 \\ C_\ell^{\Theta E} & C_\ell^{EE} & 0 \\ 0 & 0 & C_\ell^{BB} \end{pmatrix} \quad (135)$$

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} 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。

2.4.2 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

$$-\ln \mathcal{L}(\hat{C}_\ell | C_\ell) = \frac{2\ell + 1}{2} \left[\frac{\hat{C}_\ell}{C_\ell} + \ln C_\ell - \frac{2\ell - 1}{2\ell + 1} \ln \hat{C}_\ell \right] \quad (136)$$

で与えられる。これからスコア関数は

$$-\frac{\partial \ln \mathcal{L}(\hat{C}_\ell | C_\ell)}{\partial p_i} = \frac{2\ell + 1}{2} \frac{\partial C_\ell}{\partial p_i} \left[-\frac{\hat{C}_\ell}{C_\ell^2} + \frac{1}{C_\ell} \right] \quad (137)$$

Fisher行列は

$$\begin{aligned} F_{ij} &= \left\langle \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\hat{C}_\ell | C_\ell)}{\partial p_i} \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\hat{C}_\ell | C_\ell)}{\partial p_j} \right\rangle \\ &= \left(\frac{2\ell + 1}{2} \right)^2 \frac{\partial C_\ell}{\partial p_i} \frac{\partial C_\ell}{\partial p_j} \left[\frac{\langle \hat{C}_\ell^2 \rangle}{C_\ell^4} + \frac{1}{C_\ell^2} - 2 \frac{\langle \hat{C}_\ell \rangle}{C_\ell^3} \right] \\ &= \left(\frac{2\ell + 1}{2} \right)^2 \frac{1}{C_\ell^2} \frac{\partial C_\ell}{\partial p_i} \frac{\partial C_\ell}{\partial p_j} \left[\frac{2\ell + 3}{2\ell + 1} + 1 - 2 \right] = \frac{2\ell + 1}{2} \frac{1}{C_\ell^2} \frac{\partial C_\ell}{\partial p_i} \frac{\partial C_\ell}{\partial p_j} \end{aligned} \quad (138)$$

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。

2.4.3 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(133)で与えられるが、これは実は以下の式と等価である：

$$F_{ij} = \sum_{\ell} (2\ell + 1) \frac{\partial \mathbf{D}_\ell^t}{\partial p_i} [\mathbf{D}_\ell]^{-1} \frac{\partial \mathbf{D}_\ell}{\partial p_j}. \quad (139)$$

ここで $\mathbf{D}^t = (C_\ell^{AA}, C_\ell^{AB}, C_\ell^{BB})$ であり、 \mathbf{D} は \mathbf{D} の共分散行列である。具体的な計算例として、例えば[3]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(133)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。

2.4.4 弱非Gauss近似：一次元

まずは一次元において尤度関数のEdgeworth展開を考える：

$$\mathcal{L}(x) \equiv A[1 + f(x)]\mathcal{L}^G(x) \quad (140)$$

ここで \mathcal{L}^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：

$$f(x) \equiv -\frac{c_3}{3!\sigma^3} h_3(x/\sigma) + \left(\frac{c_4}{4!\sigma^4} h_4(x/\sigma) + \frac{1}{2} \frac{c_3^2}{3!\sigma^6} h_6(x/\sigma) \right) + \dots \quad (141)$$

また A は規格化因子である：

$$A = \left\{ \int dx (1 + f(x)) \mathcal{L}^G(x) \right\}^{-1} \quad (142)$$

ただし、すべてのcumulantが消える極限で $A \rightarrow 1$ とする。スコア関数は

$$V_i = \frac{\partial \ln(1+f)}{\partial p_i} + \frac{\partial \ln \mathcal{L}^G}{\partial p_i} + \frac{\partial \ln A}{\partial p_i} \simeq \frac{\partial f}{\partial p_i} + \frac{\partial \ln \mathcal{L}^G}{\partial p_i} \quad (143)$$

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}^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

$$\frac{\partial f}{\partial p_i} = -\frac{1}{6\sigma^3} h_3(x/\sigma) \frac{\partial c_3}{\partial p_i} + \frac{c_3}{6} \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3} \quad (144)$$

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

$$F_{ij} = \left\langle \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right\rangle + F_{ij}^G \quad (145)$$

と表される。ただし第二項は \mathcal{L}^G のFisher行列であり、

$$F_{ij}^G = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln \sigma^2}{\partial p_i} \frac{\partial \ln \sigma^2}{\partial p_j} \quad (146)$$

となる。Fisher行列の第一項は

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right\rangle &= \frac{1}{36\sigma^6} \frac{\partial c_3}{\partial p_i} \frac{\partial c_3}{\partial p_j} \langle [h_3(x/\sigma)]^2 \rangle + \frac{c_3^2}{36} \left\langle \left[\frac{\partial}{\partial p_i} \frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3} \right] \left[\frac{\partial}{\partial p_j} \frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3} \right] \right\rangle \\ &\quad - \frac{c_3}{36\sigma^3} \frac{\partial c_3}{\partial p_i} \left\langle h_3(x/\sigma) \frac{\partial}{\partial p_j} \frac{h_3(x/\sigma)}{\sigma^3} \right\rangle - (i \leftrightarrow j) \end{aligned} \quad (147)$$

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、

$$\langle [h_3(t)]^2 \rangle = \langle (t^3 - 3t)^2 \rangle = \langle t^6 - 6t^4 + 9t^2 \rangle \quad (148)$$

である。変数変換 $x \rightarrow t$ をすることで

$$\langle \cdots \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} \quad (149)$$

に注意すると、

$$\langle [h_3(t)]^2 \rangle = 15 - 18 + 9 = 6 \quad (150)$$

となる。したがって、

$$F_{ij} = \frac{1}{6\sigma^6} \frac{\partial c_3}{\partial p_i} \frac{\partial c_3}{\partial p_j} + F_{ij}^G \quad (151)$$

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[4]

$$\mathcal{L} = (1+f)\mathcal{L}^G \quad (152)$$

ただし

$$\mathcal{L}^G \equiv \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N |\mathbf{C}|}} \prod_{\ell m \ell' m'} \exp \left(-\frac{1}{2} a_{\ell m}^* \mathbf{C}^{-1} a_{\ell' m'} \right) \quad (153)$$

および

$$\begin{aligned} f &\equiv -\frac{1}{3!\mathcal{L}^G} \sum_{\ell_i m_i} \langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} a_{\ell_3 m_3} \rangle \frac{\partial}{\partial a_{\ell_1 m_1}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_2 m_2}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_3 m_3}} \mathcal{L}^G \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\ell_i m_i} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \left[\bar{a}_{\ell_1 m_1} \bar{a}_{\ell_2 m_2} \bar{a}_{\ell_3 m_3} - (-1)^{m_3} \left(\frac{\bar{a}_{\ell_1 m_1}}{C_{\ell_3}} \delta_{\ell_2 \ell_3} \delta_{m_2, -m_3} + (\text{cyc.}) \right) \right] \end{aligned} \quad (154)$$

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

$$\mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \equiv \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (155)$$

を用いて

$$\langle a_{\ell_1 m_1} a_{\ell_2 m_2} a_{\ell_3 m_3} \rangle = \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \quad (156)$$

で定義される。Wigner-3jの性質から揺らぎの一次の項は消え、

$$f = \frac{1}{6} \sum_{\ell_i m_i} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \bar{a}_{\ell_1 m_1} \bar{a}_{\ell_2 m_2} \bar{a}_{\ell_3 m_3} \quad (157)$$

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、非Gauss性によって生じるFisher行列への補正項は

$$F_{ij}^f \equiv \frac{1}{36} \sum_{\ell_i m_i \ell'_i m'_i} \frac{\partial b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial b_{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3}}{\partial p_i} \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}_{m'_1 m'_2 m'_3}^{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3} \langle \bar{a}_{\ell_1 m_1} \cdots \bar{a}_{\ell'_3 m'_3} \rangle \quad (158)$$

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

$$\begin{aligned} F_{ij}^f &= \frac{1}{6} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 m_1 m_2 m_3} \frac{\partial b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial b_{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3}}{\partial p_i} \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}_{-m_1, -m_2, -m_3}^{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3} \frac{1}{C_{\ell_1} C_{\ell_2} C_{\ell_3}} \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \frac{1}{C_{\ell_1} C_{\ell_2} C_{\ell_3}} \frac{\partial b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial b_{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3}}{\partial p_i} \sum_{m_1 m_2 m_3} \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \mathcal{G}_{m_1 m_2 m_3}^{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3} \\ &= \frac{1}{6} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \frac{1}{C_{\ell_1} C_{\ell_2} C_{\ell_3}} \frac{\partial B_{\ell_1 \ell_2 \ell_3}}{\partial p_i} \frac{\partial B_{\ell'_1 \ell'_2 \ell'_3}}{\partial p_i} \end{aligned} \quad (159)$$

ただし

$$B_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \equiv \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} b_{\ell_1 \ell_2 \ell_3} \quad (160)$$

および

$$\sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = 1 \quad (161)$$

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_{sky} を用いて

$$F_{ij} = \sum_{\ell=2}^{\ell_{\max}} \frac{(2\ell+1)f_{\text{sky}}}{2} \text{Tr} \left(C_{\ell}^{-1} \frac{\partial C_{\ell}}{\partial p_i} C_{\ell}^{-1} \frac{\partial C_{\ell}}{\partial p_j} \right) \quad (162)$$

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 \tilde{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 $\delta\mathbf{p}$ 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 $\bar{\mathbf{p}}$ 周りで展開して2次までの寄与をとると

$$\ln \mathcal{L}'(\mathbf{p}) = \ln \mathcal{L}'(\bar{\mathbf{p}}) + \sum_i \frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\bar{\mathbf{p}})}{\partial p_i} (p_i - \bar{p}_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} (p_i - \bar{p}_i) \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}'(\bar{\mathbf{p}})}{\partial p_i \partial p_j} (p_j - \bar{p}_j) \quad (163)$$

となる。バイアスされた推定量 $\bar{\mathbf{p}} + \delta\mathbf{p}$ 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：

$$\frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\mathbf{p})}{\partial p_k} = \frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\bar{\mathbf{p}})}{\partial p_k} + \sum_j \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}'(\bar{\mathbf{p}})}{\partial p_k \partial p_j} (p_j - \bar{p}_j) \quad (164)$$

上式に $\mathbf{p} = \bar{\mathbf{p}} + \delta\mathbf{p}$ 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

$$\langle \delta V_i(\bar{\mathbf{p}}) \rangle - \sum_j \mathbf{F}'_{ij}(\bar{\mathbf{p}}) \delta p_j = 0 \quad (165)$$

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：

$$\delta V_i(\mathbf{d}, \mathbf{p}) \equiv \frac{\partial \ln \mathcal{L}'(\mathbf{d}, \mathbf{p})}{\partial p_i} - \frac{\partial \ln \mathcal{L}(\mathbf{d}, \mathbf{p})}{\partial p_i} \quad (166)$$

$$\mathbf{F}'_{ij}(\mathbf{p}) \equiv - \left\langle \frac{\partial^2 \ln \mathcal{L}'(\mathbf{p})}{\partial p_i \partial p_j} \right\rangle \quad (167)$$

これより、

$$\delta p_i = \sum_{ij} \{ \mathbf{F}'_{ij} \}^{-1} \langle \delta V_i \rangle \Big|_{\mathbf{p}=\bar{\mathbf{p}}} \quad (168)$$

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

$$-2\delta V_i = \text{Tr} \left(\mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} - \mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} \mathbf{C}'^{-1} \Delta + \mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \Delta}{\partial p_i} \right) \quad (169)$$

と書けるので、

$$\begin{aligned} -2\langle \delta V_i \rangle &= \text{Tr} \left(\mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} - \mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} \mathbf{C}'^{-1} \langle \Delta \rangle + \mathbf{C}'^{-1} \left\langle \frac{\partial \Delta}{\partial p_i} \right\rangle \right) \\ &= \text{Tr} \left(\mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} - \mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} \mathbf{C}'^{-1} \mathbf{C} \right) \\ &= \text{Tr} \left(-\mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_i} \mathbf{C}'^{-1} (\mathbf{C} - \mathbf{C}') \right) \end{aligned} \quad (170)$$

となる。ただし、 $\partial \langle \Delta \rangle / \partial p_i = 0$ を用いた。これを式(168)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

$$\delta p_i = - \sum_j \{ F'_{ij} \}^{-1} \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\mathbf{C}'^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}'}{\partial p_j} \mathbf{C}'^{-1} \delta\mathbf{C} \right) \quad (171)$$

が得られる。

3 宇宙論における推定:揺らぎとその角度パワースペクトル

3.1 CMB観測における尤度関数

3.1.1 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

$$s_i = \int d\hat{n} X_i(\hat{n}) B_i(\hat{n}) \quad (172)$$

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{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

$$B_i(\hat{n}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(\hat{n} - \hat{n}_i)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (173)$$

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

$$B_i(\ell) = e^{-\ell^2\sigma^2} \quad (174)$$

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。

3.1.2 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 に一樣なノイズ n^X が加わると、測定されるパワースペクトル \hat{C}_ℓ^{XX} は

$$\hat{C}_\ell^{XX} = e^{-\ell^2\theta^2/8 \ln 2} (C_\ell^{XX} + N_\ell^{XX}) \quad (175)$$

となる。ただし

$$N_\ell^{XX} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \equiv \langle n_{\ell m}^{X,*} n_{\ell m}^X \rangle e^{\ell^2\theta^2/8 \ln 2} \quad (176)$$

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、ノイズは一樣であるとする。CMBの温度 T_{CMB} を用い、感度 σ_X を

$$\frac{\sigma_X}{T_{\text{CMB}}} \equiv n^X \quad (177)$$

と定義すると、ノイズのスペクトル N_ℓ^{XX} は

$$N_\ell^{XX} \delta_{\ell\ell'} \equiv \left(\frac{\sigma_X}{T_{\text{CMB}}} \right)^2 e^{\ell^2\theta^2/8 \ln 2} \quad (178)$$

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

$$\frac{1}{N} \equiv \sum_i \frac{1}{N_i} = \sqrt{\sum_{i \geq j} \frac{2}{N_i N_j (1 + \delta_{ij})}} \quad (179)$$

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。

3.1.3 尤度関数

得られるデータ \mathbf{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

$$\mathbf{D}_\ell = (X_{\ell, -\ell}, X_{\ell, -\ell+1}, \dots, X_{\ell, \ell}, Y_{\ell, -\ell}, \dots, Y_{\ell, \ell}) \quad (180)$$

を用いて、データベクトルを

$$\mathbf{D} = \{\mathbf{D}_\ell\}_{\ell=2,3,\dots} \quad (181)$$

と表すことにする。式 (93) で定義される共分散行列は

$$\mathbf{C} = \delta_{\ell\ell'} \langle \mathbf{D}_\ell^\dagger \mathbf{D}_\ell \rangle = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{D}_2^\dagger \mathbf{D}_2 \rangle & & \\ & \langle \mathbf{D}_3^\dagger \mathbf{D}_3 \rangle & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \quad (182)$$

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

$$\mathbf{c}_\ell = \begin{pmatrix} C_\ell^{\Theta\Theta} & C_\ell^{\Theta E} \\ C_\ell^{\Theta E} & C_\ell^{EE} \end{pmatrix} \quad (183)$$

と表される。ただし C_ℓ^{XY} は

$$C_\ell^{XY} \equiv \delta_{mm'} C_\ell^{XY} = \begin{pmatrix} C_\ell^{XY} & & \\ & \ddots & \\ & & C_\ell^{XY} \end{pmatrix} \quad (184)$$

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。

3.2 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 $\hat{\Theta}(\hat{\mathbf{n}})$ 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 $\hat{}$ をつけて区別する。 $\Theta(\hat{\mathbf{n}})$ 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、 $\hat{\Theta}(\hat{\mathbf{n}}) = \Theta(\hat{\mathbf{n}})$ 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。

3.2.1 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

$$\delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} C_\ell^{\Theta\Theta} = \langle \Theta_{\ell m} \Theta_{\ell' m'} \rangle_\Theta, \quad (185)$$

のように定義される。

3.2.2 不偏性

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

$$\langle \hat{C}_\ell^{\Theta\Theta} \rangle_\Theta = C_\ell^{\Theta\Theta}. \quad (186)$$

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 (185) から、 $-\ell \leq m \leq \ell$ として

$$\hat{C}_{\ell, (m)}^{\Theta\Theta} = |\hat{\Theta}_{\ell m}|^2, \quad (187)$$

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

3.2.3 最小分散

次に最小分散について考える。(187)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 \hat{X}_i ($i = 1, \dots, n$)から、その線形結合を用いて新たに

$$\hat{X} = \sum_{i=1, \dots, n} w_i \hat{X}_i \quad (188)$$

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

$$w_i = \frac{1}{W \sigma^2(\hat{X}_i)}, \quad (189)$$

$$W = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma^2(\hat{X}_i)}. \quad (190)$$

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 $\hat{C}_{\ell, (m)}^{\Theta\Theta}$ とすることができる。これらの線形結合を考えると

$$\hat{C}_{\ell}^{\Theta\Theta} = \frac{1}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\hat{\Theta}_{\ell m}|^2. \quad (191)$$

3.3 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。

3.3.1 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 $\mathbf{C}^{\Theta\Theta} = \{C_{\ell}^{\Theta\Theta}\}$ 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 $\hat{\Theta} = \{\hat{\Theta}_{\ell m}\}$ を得る確率は

$$P(\hat{\Theta} | \mathbf{C}^{\Theta\Theta}) \propto \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{C}}} \exp \left(-\frac{1}{2} \hat{\Theta}^\dagger \mathbf{C}^{-1} \hat{\Theta} \right). \quad (192)$$

ここで、 $\mathbf{C} = \langle \hat{\Theta} \hat{\Theta}^\dagger \rangle$ 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 $\hat{\mathbf{C}}^{\Theta\Theta}$ は

$$\left. \frac{\partial P(\hat{\Theta} | \mathbf{C}^{\Theta\Theta})}{\partial C_{\ell}^{\Theta\Theta}} \right|_{\mathbf{C}^{\Theta\Theta} = \hat{\mathbf{C}}^{\Theta\Theta}} = 0. \quad (193)$$

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

$$\mathcal{L}(\hat{\Theta} | \mathbf{C}^{\Theta\Theta}) = \text{Tr} \ln \mathbf{C} + \hat{\Theta}^\dagger \mathbf{C}^{-1} \hat{\Theta} + \text{const.}, \quad (194)$$

を用いれば、推定量は

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}(\hat{\Theta} | \mathbf{C}^{\Theta\Theta})}{\partial C_{\ell}^{\Theta\Theta}} \right|_{\mathbf{C}^{\Theta\Theta} = \hat{\mathbf{C}}^{\Theta\Theta}} = 0, \quad (195)$$

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

$$\text{Tr} \left(\mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial C_{\ell}^{\Theta\Theta}} \right) - \hat{\Theta}^\dagger \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial C_{\ell}^{\Theta\Theta}} \mathbf{C}^{-1} \hat{\Theta} = 0. \quad (196)$$

今、任意の行列 \mathbf{A} に対して

$$\text{Tr}(\mathbf{A}) = \langle \hat{\Theta}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{C}^{-1} \hat{\Theta} \rangle, \quad (197)$$

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

$$\left\langle \overline{\Theta}^\dagger \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial C_\ell^{\Theta\Theta}} \overline{\Theta} \right\rangle - \overline{\Theta}^\dagger \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial C_\ell^{\Theta\Theta}} \overline{\Theta} = 0. \quad (198)$$

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

3.3.2 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、

$$\frac{2\ell+1}{C_\ell^{\Theta\Theta}} - \frac{1}{(C_\ell^{\Theta\Theta})^2} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\hat{\Theta}_{\ell m}|^2 = 0, \quad (199)$$

である。この方程式を満たす最尤推定量 $C_\ell^{\Theta\Theta} = \hat{C}_\ell^{\Theta\Theta}$ は式(191)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、

$$\left\langle \overline{\Theta}_i^\dagger \overline{\Theta}_j \right\rangle = \overline{\Theta}_i^\dagger \overline{\Theta}_j. \quad (200)$$

が成り立つ。両辺に共分散行列をかけていけば

$$\left\langle \Theta_i^\dagger \Theta_j \right\rangle = \Theta_i^\dagger \Theta_j. \quad (201)$$

が ij 成分の最尤推定になっている。

3.3.3 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

$$\hat{\Theta}(\hat{n}) = W(\hat{n}) \Theta(\hat{n}). \quad (202)$$

と表す。 $W(\hat{n})$ 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、 $\hat{\Theta}_{\ell m}$ の共分散行列は対角でなくなる。実際、

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}_{\ell m} &= \int d^2 \hat{n} Y_{\ell m}^*(\hat{n}) W(\hat{n}) \Theta(\hat{n}) \\ &= \sum_{LM} \int d^2 \hat{n} Y_{\ell m}^*(\hat{n}) Y_{LM}(\hat{n}) W(\hat{n}) \Theta_{LM} \\ &\equiv \sum_{LM} W_{\ell m LM} \Theta_{LM}, \end{aligned} \quad (203)$$

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

$$\langle \hat{\Theta}_{\ell m} \hat{\Theta}_{\ell' m'}^* \rangle = \sum_L M_{\ell m \ell' m' L} C_L^{\Theta\Theta}, \quad (204)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}_{\ell m} &\simeq \Theta_{\ell m} \int d^2 \hat{n} W(\hat{n}) \sum_{LM} Y_{LM}^*(\hat{n}) Y_{LM}(\hat{n}) \\ &= \Theta_{\ell m} \int d^2 \hat{n} W(\hat{n}) \\ &= W_1 \Theta_{\ell m}, \end{aligned} \quad (205)$$

ここで

$$W_n \equiv \int d^2 \hat{n} W^n(\hat{n}). \quad (206)$$

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(191)を W_2 で割ったものを近似的に使うことができる。

3.4 銀河サーベイ

3.4.1 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 $n(\mathbf{x})$ とする。いま、この揺らぎの推定量として

$$\hat{\delta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\bar{n}} n(\mathbf{x}) - 1 \quad (207)$$

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

$$\hat{\delta}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\bar{n}} \int d^3 \mathbf{x} e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} n(\mathbf{x}) \quad (208)$$

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

$$\langle n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}') \rangle = \sigma^2 \delta_D^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (209)$$

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

$$\langle [n(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}] [n(\mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}'] \rangle = \left\langle \sum_{i \in \mathbf{x}} \sum_{j \in \mathbf{x}'} \right\rangle = d^3 \mathbf{x}' \delta_D^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{i \in \mathbf{x}} = n(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x}' \delta_D^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (210)$$

となることを使い、両辺を積分することで

$$N = \int d^3 \mathbf{x} n(\mathbf{x}) = \sigma^2 \int d^3 \mathbf{x} \quad (211)$$

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

$$\langle \hat{\delta}_{\mathbf{k}} \hat{\delta}_{\mathbf{k}'}^* \rangle = \frac{1}{\bar{n}} \delta_D^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (212)$$

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

$$\hat{\gamma}(\mathbf{x}) = \epsilon(\mathbf{x}) \quad (213)$$

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、

$$\langle \epsilon(\mathbf{x}) \epsilon(\mathbf{x}') \rangle = \sigma^2 \delta_D^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (214)$$

である。ある特定の領域の銀河数を考えることで

$$\begin{aligned} \langle [\epsilon(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}] [\epsilon(\mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}'] \rangle &= \left[\sum_{i \in \mathbf{x}} \sum_{j \in \mathbf{x}'} \right]^{-1} \left\langle \sum_{i \in \mathbf{x}} e_i \sum_{j \in \mathbf{x}'} e_j \right\rangle \\ &= \sigma_{\text{int}}^2 d^3 \mathbf{x}' \delta_D^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\sum_{i \in \mathbf{x}} \right]^{-1} = \sigma_{\text{int}}^2 n^{-1}(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x}' \delta_D^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned} \quad (215)$$

数密度の場合と同様にして

$$\sigma_{\text{int}}^2 \int d^3 \mathbf{x} = \sigma^2 \int d^3 \mathbf{x} n(\mathbf{x}) \quad (216)$$

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

3.4.2 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

$$\hat{\delta}(\hat{\mathbf{n}}) = \int dz W(z) \delta(z, \hat{\mathbf{n}}) \quad (217)$$

である。この推定量の分散を最小にし、かつ

$$\int dz W(z) = 1 \quad (218)$$

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、

$$\langle |\hat{\delta}(\hat{\mathbf{n}})|^2 \rangle = \int dz \frac{1}{n(z)} W^2(z) \quad (219)$$

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

$$F(W) = \int dz \frac{1}{n(z)} W^2(z) + \lambda \left(\int dz W(z) - 1 \right) \quad (220)$$

を最小にする W は

$$W(z) = \frac{\lambda}{2} n(z) = \frac{n(z)}{N} \quad (221)$$

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。

4 宇宙論における推定II:CMBの重力レンズ効果

4.1 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) [5]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) [6]に基づき、種々の改良を行い利用されている。

4.1.1 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

$$\tilde{\Theta}_\ell = \Theta_\ell - \sum_{x=\phi, \varpi} \int \frac{d^2 L}{2\pi} [(\ell - L) \odot_x L] x_{\ell-L} \Theta_L + \mathcal{O}(x_\ell^2). \quad (222)$$

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。

4.1.2 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_ℓ である。この推定量 \hat{x}_ℓ 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、

$$\langle \hat{x}_\ell \rangle_{\text{CMB}} = x_\ell, \quad (223)$$

が条件1となる。

4.1.3 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、 $\ell \neq \mathbf{0}$ として、異なるモードの相関に着目すると、

$$\langle \tilde{\Theta}_L \tilde{\Theta}_{\ell-L} \rangle_{\text{CMB}} = \sum_{x=\phi, \varpi} x_\ell f_{\ell L}^x. \quad (224)$$

ただし

$$f_{\ell L}^x = [\ell \odot_x L] C_L^{\Theta\Theta} + [\ell \odot_x (\ell - L)] C_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}. \quad (225)$$

これから、

$$x_\ell = \int \frac{d^2 L}{2\pi} A_\ell f_{\ell L}^x \langle \tilde{\Theta}_L \tilde{\Theta}_{\ell-L} \rangle_{\text{CMB}}; \quad A_\ell = \left\{ \int \frac{d^2 L}{2\pi} (f_{\ell L}^x)^2 \right\}^{-1}. \quad (226)$$

以上に基づくと、推定量の候補として以下の二点推定量

$$\hat{x}_\ell = \int \frac{d^2 L}{2\pi} A_\ell f_{\ell L}^x \tilde{\Theta}_L \tilde{\Theta}_{\ell-L}. \quad (227)$$

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。

4.1.4 分散の抑制

より一般化した二点推定量を考えてみる：

$$\hat{x}_\ell = \int \frac{d^2 L}{2\pi} F_{\ell L}^x \tilde{\Theta}_L \tilde{\Theta}_{\ell-L}. \quad (228)$$

ここで、重み関数 $F_{\ell L}^x$ 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、 $x_\ell = \langle \hat{x}_\ell \rangle_{\text{CMB}}$ 、あるいは

$$x_\ell = \int \frac{d^2 L}{2\pi} F_{\ell L}^x \sum_{x'=\phi, \varpi} x'_\ell f_{\ell L}^{x'}. \quad (229)$$

すなわち、

$$\int \frac{d^2 L}{2\pi} F_{\ell L}^x f_{\ell L}^{x'} = \delta^{xx'}. \quad (230)$$

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

$$\frac{\delta}{\delta F_{\ell L}^x} \langle |\hat{x}_\ell|^2 \rangle_{\text{CMB}} = 0. \quad (231)$$

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

$$\begin{aligned} N_\ell &= \langle |\hat{x}_\ell|^2 \rangle = \int \frac{d^2 L}{2\pi} \int \frac{d^2 L'}{2\pi} F_{\ell L}^x F_{\ell L'}^x \langle \tilde{\Theta}_L \tilde{\Theta}_{\ell-L} \tilde{\Theta}_{L'}^* \tilde{\Theta}_{\ell-L'}^* \rangle \\ &\simeq \int \frac{d^2 L}{2\pi} F_{\ell L}^x (F_{\ell L}^x + F_{\ell, \ell-L}^x) \tilde{C}_L^{\Theta\Theta} \tilde{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}. \end{aligned} \quad (232)$$

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 $F_{\ell L}^x$ の関数形は、Lagrangeの未定乗数法を用いることで

$$F_{\ell L}^x = A_\ell \frac{f_{\ell L}^x}{2 \tilde{C}_L^{\Theta\Theta} \tilde{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}}; \quad A_\ell = \left\{ \int \frac{d^2 L}{2\pi} \frac{(f_{\ell L}^x)^2}{2 \tilde{C}_L^{\Theta\Theta} \tilde{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}} \right\}^{-1}. \quad (233)$$

となることが分かる。

実際には式(232)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[7, 8]。

4.2 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[9]。

4.2.1 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：

$$\hat{\Theta}(\hat{n}) = (1 + \epsilon(\hat{n}))\tilde{\Theta}(\hat{n}). \quad (234)$$

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、

$$\hat{\Theta}_\ell = \tilde{\Theta}_\ell + \int \frac{d^2\mathbf{L}}{2\pi} \epsilon_{\ell-L} \tilde{\Theta}_L, \quad (235)$$

であり、 $\ell \neq 0$ として

$$\langle \hat{\Theta}_L \hat{\Theta}_{\ell-L} \rangle = (\tilde{C}_L^{\Theta\Theta} + \tilde{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta} \epsilon_\ell \equiv f_{\ell,L}^\epsilon \epsilon_\ell), \quad (236)$$

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

$$\langle \hat{x}_\ell \rangle_{\text{CMB}} = x_\ell + R_\ell^{x,\epsilon} \epsilon_\ell, \quad R_\ell^{x,\epsilon} = A_\ell^{xx} \int \frac{d^2\mathbf{L}}{2\pi} \frac{f_{\ell,L}^x f_{\ell,L}^\epsilon}{\tilde{C}_L^{\Theta\Theta} \tilde{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}}. \quad (237)$$

となる。すなわち、 \hat{x}_ℓ 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。

4.2.2 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：

$$\langle \hat{\epsilon}_\ell \rangle_{\text{CMB}} = \epsilon_\ell + R_\ell^{\epsilon,x} x_\ell. \quad (238)$$

ただし

$$A_\ell^{a,b} = \left\{ \int \frac{d^2\mathbf{L}}{2\pi} \frac{f_{\ell,L}^a f_{\ell,L}^b}{\tilde{C}_L^{\Theta\Theta} \tilde{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}} \right\}^{-1}; \quad R_\ell^{a,b} = \frac{A_\ell^{a,a}}{A_\ell^{a,b}}. \quad (239)$$

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

$$\hat{x}_\ell^{\text{BHE}} = \frac{\hat{x}_\ell - R_\ell^{x,\epsilon} \hat{\epsilon}_\ell}{1 - R_\ell^{\epsilon,x} R_\ell^{x,\epsilon}}. \quad (240)$$

4.2.3 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、

$$\hat{\Theta}(\hat{n}) = \tilde{\Theta}(\hat{n}) + n(\hat{n}), \quad (241)$$

と書ける。 $n(\hat{\mathbf{n}})$ 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

$$\langle \hat{x}_\ell \rangle_{\text{CMB}} = x_\ell + R_\ell^{x,s} s_\ell, \quad R_\ell^{x,s} = A_\ell^{xx} \int \frac{d^2 L}{2\pi} \frac{f_{\ell,L}^x f_{\ell,L}^s}{\widehat{C}_L^{\Theta\Theta} \widehat{C}_{|\ell-L|}^{\Theta\Theta}}. \quad (242)$$

ただし $s(\hat{\mathbf{n}}) = \langle n^2(\hat{\mathbf{n}}) \rangle$ 、および $f_{\ell,L}^s = 1$ である。これから、式(240)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。

4.2.4 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[9]。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。

4.3 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[10]。ここでは温度揺らぎの場合に着目してその説明を行う。

4.3.1 確率分布関数

重力レンズ場 x_ℓ 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 $\widehat{\Theta}(\hat{\mathbf{n}})$ 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、

$$\mathcal{L}(\widehat{\Theta}|\mathbf{x}) = \widehat{\Theta}^\dagger [\mathbf{C}(\mathbf{x})]^{-1} \widehat{\Theta} - \text{Tr} \ln [\mathbf{C}(\mathbf{x})]^{-1} + \text{const.} \quad (243)$$

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 $\langle \dots \rangle_{\text{CMB}}$ を用いて、

$$\{\mathbf{C}\}_{\ell,\ell'} = \langle \widehat{\Theta}_\ell \widehat{\Theta}_{\ell'}^* \rangle_{\text{CMB}} = \delta_{\ell-\ell'} C_\ell^{\Theta\Theta} + f_{\ell+\ell',\ell}^x x_{\ell+\ell'} + \mathcal{O}(x^2). \quad (244)$$

4.3.2 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_ℓ に対する推定量が満たす式が得られる：

$$\mathcal{H}_\ell(\widehat{x}_\ell) - \langle \mathcal{H}_\ell(\widehat{x}_\ell) \rangle = 0. \quad (245)$$

ここで

$$\mathcal{H}_\ell(\widehat{x}_\ell) = \overline{\Theta}^\dagger \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x_\ell} \overline{\Theta} = \int \frac{d^2 L}{2\pi} f_{\ell,L}^x \overline{\Theta}_L \overline{\Theta}_{\ell-L} + \mathcal{O}(x). \quad (246)$$

式(245)を x_ℓ について解くため、 x_ℓ に対してTaylor展開すると

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}|_{x_\ell=0} + \sum_\ell \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_\ell} \Big|_{x_\ell=0} x_\ell + \sum_{\ell,\ell'} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x_\ell \partial x_{\ell'}} \Big|_{x_\ell=0} x_\ell x_{\ell'} + \mathcal{O}(x^3). \quad (247)$$

これから

$$x_\ell = \left[\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x_\ell \partial x_{\ell'}} \Big|_{x_\ell=0} \right]^{-1} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_\ell} \Big|_{x_\ell=0}. \quad (248)$$

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

$$\left\langle \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial x_\ell \partial x_{\ell'}} \Big|_{x_\ell=0} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_\ell} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_{\ell'}} \Big|_{x_\ell=0} \right\rangle = [\langle \mathcal{H}_\ell \mathcal{H}_{\ell'} \rangle - \langle \mathcal{H}_\ell \rangle \langle \mathcal{H}_{\ell'} \rangle]_{x_\ell=0} = \mathcal{F}_{\ell\ell'}. \quad (249)$$

これを用いると

$$\hat{x}_\ell = \int \frac{d^2 \ell'}{2\pi} \mathcal{F}_{\ell\ell'}^{-1} [\mathcal{H}_{\ell'} - \langle \mathcal{H}_{\ell'} \rangle]_{x_\ell=0}. \quad (250)$$

書き換えると、

$$\hat{x}_\ell = \hat{x}_\ell^S - \langle \hat{x}_\ell^S \rangle, \quad (251)$$

ただし

$$\hat{x}_\ell^S = \int \frac{d^2 \ell'}{2\pi} \mathcal{F}_{\ell\ell'}^{-1} \frac{1}{2} \int \frac{d^2 L}{2\pi} f_{\ell'L}^x \bar{\Theta}_L \bar{\Theta}_{\ell'-L}. \quad (252)$$

共分散行列が対角であれば、 \mathcal{F} は対角となり、その成分はGaussian noiseに一致する。したがって上記推定量は最初に導いたレンズ場二点推定量に帰着する。

4.3.3 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ころではない。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）。

4.3.4 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。

4.4 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。

4.4.1 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

$$\langle |\hat{x}_\ell|^2 \rangle = \int \frac{d^2 L}{2\pi} \int \frac{d^2 L'}{2\pi} \langle \tilde{\Theta}_L \tilde{\Theta}_{\ell-L} \tilde{\Theta}_{L'}^* \tilde{\Theta}_{\ell-L'}^* \rangle. \quad (253)$$

これを

$$\langle |\hat{x}_\ell|^2 \rangle = N_\ell^{x,(0)} + C_\ell^{xx} + N_\ell^{(1),x} + N_\ell^{(2),x} + \dots, \quad (254)$$

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

定義より、 $N_\ell^{(1)}$ は、4点相関のうち

$$\begin{aligned} & \langle \langle \Theta_L \Theta_{L'}^* \rangle_{\text{CMB}} \langle \Theta_{\ell-L} \Theta_{\ell-L'}^* \rangle_{\text{CMB}} \rangle + \langle \langle \Theta_L \Theta_{\ell-L}^* \rangle_{\text{CMB}} \langle \Theta_{L'} \Theta_{\ell-L'}^* \rangle_{\text{CMB}} \rangle \\ &= C_{|L-L'|}^{xx} f_{L-L',L}^x f_{L-L',\ell-L}^x + C_{|L+L'-\ell|}^{xx} f_{L+L'-\ell,L}^x f_{L+L'-\ell,\ell-L}^x, \end{aligned} \quad (255)$$

から出てくる。

4.4.2 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[9]。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

$$P(a) = \left[1 + \sum_{\ell_i} \kappa_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{(4)} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_1}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_2}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_3}} \frac{\partial}{\partial a_{\ell_4}} \right] P_g(a), \quad (256)$$

これから、共分散行列を \mathbf{C} として

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(a) &= \frac{P(a)}{P_g(a)} \\ &= 1 + \sum_{\ell_i} \kappa_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{(4)} \{ \bar{a}_{\ell_1} \bar{a}_{\ell_2} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell_4} - [\mathbf{C}_{\ell_1 \ell_2}^{-1} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell_4} + (5 \text{ perm.})] + [\mathbf{C}_{\ell_1 \ell_2}^{-1} \mathbf{C}_{\ell_3 \ell_4}^{-1} + (2 \text{ perm.})] \} \\ &= 1 + \sum_{\ell_i} \kappa_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{(4)} (\bar{a}_{\ell_1} \bar{a}_{\ell_2} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell_4} - 6 \mathbf{C}_{\ell_1 \ell_2}^{-1} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell_4} + 3 \mathbf{C}_{\ell_1 \ell_2}^{-1} \mathbf{C}_{\ell_3 \ell_4}^{-1}). \end{aligned} \quad (257)$$

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

$$\begin{aligned} \kappa_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{(4)} &= f_{\ell_{12} \ell_1} f_{-\ell_{12}, \ell_3} \mathbf{C}_{|\ell_{12}|}^{\phi\phi} \delta_{\ell_{12}, -\ell_{34}} + f_{\ell_{13} \ell_1} f_{-\ell_{13}, \ell_2} \mathbf{C}_{|\ell_{13}|}^{\phi\phi} \delta_{\ell_{13}, -\ell_{24}} \\ &\quad + f_{\ell_{14} \ell_1} f_{-\ell_{14}, \ell_2} \mathbf{C}_{|\ell_{14}|}^{\phi\phi} \delta_{\ell_{14}, -\ell_{23}} + \mathcal{O}(|\phi|^4), \end{aligned} \quad (258)$$

と書ける。ここで $\ell_{ij} = \ell_i + \ell_j$ である。これを用いると

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(a) &= 1 + 3 \sum_{\ell_i} \{ f_{\ell_{12} \ell_1} f_{-\ell_{34}, \ell_3} \mathbf{C}_{|\ell_{12}|}^{\phi\phi} \delta_{\ell_{12} \ell_{34}} \bar{a}_{\ell_1} \bar{a}_{\ell_2} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell_4} \\ &\quad + \kappa_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4}^{(4)} [-2 \mathbf{C}_{\ell_1 \ell_2}^{-1} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell_4} + \mathbf{C}_{\ell_1 \ell_2}^{-1} \mathbf{C}_{\ell_3 \ell_4}^{-1}] \}, \end{aligned} \quad (259)$$

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、

$$\frac{\partial \mathcal{R}(a)}{\partial C_\ell^{xx}} = 0, \quad (260)$$

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

$$\mathcal{R}(a) = 1 + \sum_{\ell} \mathcal{L}_{\ell}^{(1)} C_{\ell}^{xx} + \frac{1}{2} \sum_{\ell, \ell'} \mathcal{L}_{\ell \ell'}^{(2)} C_{\ell}^{xx} C_{\ell'}^{xx} + \mathcal{O}([C_{\ell}^{xx}]^3), \quad (261)$$

ここで

$$\mathcal{L}_{\ell}^{(1)} = \left. \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_{\ell}^{xx}} \right|_{C_{\ell}^{xx}=0}, \quad \mathcal{L}_{\ell \ell'}^{(2)} = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial C_{\ell}^{xx} \partial C_{\ell'}^{xx}} \right|_{C_{\ell}^{xx}=0}. \quad (262)$$

これより

$$\hat{C}_{\ell}^{xx} = \sum_{\ell'} \{\mathcal{L}_{\ell \ell'}^{(2)}\}^{-1} \mathcal{L}_{\ell'}^{(1)}. \quad (263)$$

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、

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\ell}^{(1)} = 3 \sum_{\ell_1, \ell_3} \{ & f_{\ell, \ell_1} f_{-\ell, \ell_3} \bar{a}_{\ell_1} \bar{a}_{\ell-\ell_1} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{-\ell-\ell_3} \\ & - 2[f_{\ell \ell_1} f_{-\ell, \ell_3} \mathbf{C}_{\ell_1, \ell-\ell_1}^{-1} \bar{a}_{\ell_3} \bar{a}_{\ell-\ell_3} + 2f_{\ell \ell_1} f_{-\ell, \ell_3} \mathbf{C}_{\ell_1 \ell_3}^{-1} \bar{a}_{\ell-\ell_1} \bar{a}_{-\ell-\ell_3}] \\ & + f_{\ell \ell_1} f_{-\ell, \ell_3} \mathbf{C}_{\ell_1, \ell-\ell_1}^{-1} \mathbf{C}_{\ell_3, \ell-\ell_3}^{-1} + 2f_{\ell \ell_1} f_{-\ell, \ell_3} \mathbf{C}_{\ell_1 \ell_3}^{-1} \mathbf{C}_{\ell-\ell_1, -\ell-\ell_3}^{-1} \}. \end{aligned} \quad (264)$$

が得られる。規格化されていないレンズ場二点推定量

$$\bar{x}_{\ell}^{aa'} = \sum_{\ell'} f_{\ell \ell'}^x \bar{a}_{\ell'} \bar{a}'_{\ell-\ell'} \quad (265)$$

で書き直すと

$$\mathcal{L}_{\ell}^{(1)} \propto |\bar{x}_{\ell}^{aa}|^2 - 2(\langle 2|\bar{x}_{\ell}^{aa_1}|^2 - |\bar{x}^{a_1 a_2}|^2 \rangle_{1,2}). \quad (266)$$

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ポ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[9]。

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：

$$\mathcal{L}_{\ell \ell'}^{(2)} \rightarrow \langle \mathcal{L}_{\ell \ell'}^{(2)} \rangle = \left. \langle \mathcal{L}_{\ell}^{(1)} \mathcal{L}_{\ell'}^{(1)} \rangle \right|_{C_{\ell}^{xx}=0}. \quad (267)$$

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 $\mathcal{L}_{\ell \ell'}^{(2)}$ は対角行列とする。このとき、上式右辺は \bar{x}_{ℓ}^{aa} でポワースペクトルを計算した場合のノイズポワースペクトルの二乗で表される。このノイズポワースペクトルは、レンズ場二点推定量の規格化と一致するので、最終的に得られるポワースペクトルの推定量は

$$\hat{C}^{xx} = |\hat{x}_{\ell}^{aa}|^2 - 2(\langle 2|\hat{x}_{\ell}^{aa_1}|^2 - |\hat{x}^{a_1 a_2}|^2 \rangle_{1,2}). \quad (268)$$

となる。

付録A 球面調和関数

A.1 Legendre 多項式

A.1.1 定義

ルジャンドル多項式は以下のように定義される：

$$P_n(x) = \frac{e^x}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n (e^{-x} x^n). \quad (269)$$

ただし $n = 0, 1, 2, \dots$, $-1 \leq x \leq 1$ である。

ルジャンドル多項式は

$$P_n(\cos \theta) = \sum_{m=0}^n c_{mn} e^{i(2m-n)\theta}, \quad (270)$$

と書くこともできる。ここで係数は

$$c_{mn} = \frac{(2m)!(2n-2m)!}{4^n (m!)^2 ((n-m)!)^2} = \frac{\Gamma(m+1/2)\Gamma(n-m+1/2)}{\pi m!(n-m)!}. \quad (271)$$

端点では

$$P_n(1) = 1, \quad P_n(-1) = (-1)^n. \quad (272)$$

$n = 0, 1, 2, 3$ のとき、

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x). \quad (273)$$

$\sin(n+1)\theta$ はルジャンドル多項式を用いて

$$\frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta} = \sum_{m=0}^n P_m(\cos \theta) P_{n-m}(\cos \theta) \quad (274)$$

と表せる。

A.1.2 直交性

直交関係は

$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}. \quad (275)$$

これは以下から導かれる：

$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) x^m = \begin{cases} 0 & (m < n) \\ \frac{m! \Gamma(m/2 - n/2 + 1/2)}{2^n (m-n)! \Gamma(m/2 + n/2 + 3/2)} & (m-n \text{ が偶数}) \\ 0 & (m-n \text{ が奇数}) \end{cases} \quad (276)$$

A.1.3 母関数

ルジャンドル多項式は、ニュートン力学における二点間の重力ポテンシャルの展開係数として定義できる。以下のように

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tx+t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n. \quad (277)$$

としたものはルジャンドル多項式の母関数である。

A.1.4 微分方程式

ルジャンドル多項式は以下の微分方程式

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dy}{dx} \right) + \ell(\ell+1)y = 0. \quad (278)$$

の解である。これをもとに、多項式としての解を求めると

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^s \frac{(-1)^m (2n-2m)!}{2^n n! (n-2m)! (n-m)!} x^{n-2m}. \quad (279)$$

のように多項式表示が得られる。ただし、和の上限は、 n が偶数のとき $s = n/2$ 、奇数のとき $s = (n-1)/2$ である。

A.1.5 漸化式

$$(n+1)P_{n+1}(x) - nP_{n-1}(x) = (2n+1)P_n(x). \quad (280)$$

これは以下と等価である：

$$\frac{d}{dx} [P_{n+1}(x) - P_{n-1}(x)] = (2n+1)P_n(x). \quad (281)$$

A.1.6 ロドリゲスの公式

以下の表式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n. \quad (282)$$

をRodrigues（ロドリゲス）の公式とよぶ。

A.2 Legendre陪多項式

A.2.1 定義

ルジャンドル陪関数は以下で定義される：

$$P_n^m(x) = \frac{x^{-m} e^x}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n (e^{-x} x^{n+m}). \quad (283)$$

あるいは

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_n(x) \quad (284)$$

A.2.2 微分方程式

ルジャンドル陪関数は、以下の微分方程式

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dy}{dx} \right] - \left[\frac{m^2}{1-x^2} - n(n+1) \right] y = 0 \quad (285)$$

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。

A.2.3 直交性

$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \delta_{nm}. \quad (286)$$

これより

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(x) P_n(x') = \delta(x-x'). \quad (287)$$

A.3 偏光ベクトル

3次元の単位基底ベクトルを以下のように定義しておく：

$$\mathbf{e}_r = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \quad (288)$$

$$\mathbf{e}_1 = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta), \quad (289)$$

$$\mathbf{e}_2 = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0). \quad (290)$$

基底ベクトルどうしの外積は

$$\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2, \quad \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_r, \quad \mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_r = \mathbf{e}_1. \quad (291)$$

であり、 $\mathbf{e}_r \cdot (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) > 0$ であるから右手系となる。

以降では、動径方向と垂直な二次元面に注目する。そこで、動径方向 \mathbf{e}_r に対して、それに垂直な二次元面を規定する単位偏光ベクトル ϵ_+, ϵ_- を以下のように定める：

$$\epsilon_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2), \quad \epsilon_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2), \quad (292)$$

$$\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\epsilon_+ + \epsilon_-), \quad \mathbf{e}_2 = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\epsilon_+ - \epsilon_-). \quad (293)$$

A.3.1 回転とスピン

上記の定義は、 \mathbf{e}_1 と \mathbf{e}_2 の面内での回転分だけ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）。三次元ベクトルに対する動径軸まわりの 90° 回転作用 \star を

$$\star \mathbf{e}_r = 0, \quad \star \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2, \quad \star \mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_1, \quad (294)$$

に基づいて定めると、偏光ベクトルへの作用は

$$(\star \epsilon_+) = -i\epsilon_+, \quad (\star \epsilon_-) = i\epsilon_-. \quad (295)$$

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

$$\mathbf{e}_1 \rightarrow \mathbf{e}_1 \cos \psi + \mathbf{e}_2 \sin \psi, \quad (296)$$

$$\mathbf{e}_2 \rightarrow -\mathbf{e}_1 \sin \psi + \mathbf{e}_2 \cos \psi. \quad (297)$$

によって定める。偏光ベクトル ϵ_+, ϵ_- はそれぞれ

$$\epsilon_+ \rightarrow e^{-i\psi} \epsilon_+, \quad \epsilon_- \rightarrow e^{i\psi} \epsilon_-. \quad (298)$$

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 $f \rightarrow e^{-is\psi} f$ となる場合、 f はスピンスをもつという。偏光ベクトルはスピン1, -1をもつ。

A.3.2 内積

$$\epsilon_+ \cdot \epsilon_+ = \epsilon_- \cdot \epsilon_- = 0, \quad \epsilon_+ \cdot \epsilon_- = 1, \quad (299)$$

$$(\star \epsilon_+) \cdot \epsilon_+ = (\star \epsilon_-) \cdot \epsilon_- = 0, \quad (\star \epsilon_+) \cdot \epsilon_- = -(\star \epsilon_-) \cdot \epsilon_+ = -i. \quad (300)$$

A.4 スピン演算子と微分作用

A.4.1 定義

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[11]

$$\begin{aligned} \partial_s &= -\sin^s \theta \left[\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \sin^{-s} \theta, \\ \bar{\partial}_s &= -\sin^{-s} \theta \left[\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \sin^s \theta. \end{aligned} \quad (301)$$

先に微分演算を実行しておけば、以下のように書き換えられる[11]

$$\partial_s = \frac{s}{\tan \theta} - \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (302)$$

$$\bar{\partial}_s = \frac{-s}{\tan \theta} - \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (303)$$

A.4.2 ベクトルへの作用とスピン演算子の性質

ここで、スピン演算子の性質について調べておく。基底ベクトルの微分は

$$\frac{\partial}{\partial \theta} e_r = e_1, \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} e_r = e_2, \quad (304)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} e_1 = -e_r, \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} e_1 = \frac{1}{\tan \theta} e_2, \quad (305)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} e_2 = 0, \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} e_2 = -e_r - \frac{1}{\tan \theta} e_1. \quad (306)$$

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

$$\partial_s e_r = \frac{s}{\tan \theta} e_r - e_1 - i e_2 = \frac{s}{\tan \theta} e_r - \sqrt{2} \epsilon_+, \quad (307)$$

$$\partial_s e_1 = \frac{s}{\tan \theta} e_1 + e_r - \frac{i}{\tan \theta} e_2, \quad (308)$$

$$\partial_s e_2 = \frac{s}{\tan \theta} e_2 + i \left(e_r + \frac{e_1}{\tan \theta} \right), \quad (309)$$

$$\bar{\partial}_s e_r = \frac{-s}{\tan \theta} e_r - \sqrt{2} \epsilon_-, \quad (310)$$

$$\bar{\partial}_s e_1 = \frac{-s}{\tan \theta} e_1 + e_r + \frac{i}{\tan \theta} e_2, \quad (311)$$

$$\bar{\partial}_s e_2 = \frac{-s}{\tan \theta} e_2 - i \left(e_r + \frac{e_1}{\tan \theta} \right). \quad (312)$$

また、偏光ベクトルへの作用は

$$\partial_s \epsilon_+ = \frac{s-1}{\tan \theta} \epsilon_+, \quad (313)$$

$$\partial_s \epsilon_- = \frac{s+1}{\tan \theta} \epsilon_- + \sqrt{2} e_r, \quad (314)$$

$$\bar{\partial}_s \epsilon_+ = \frac{-s+1}{\tan \theta} \epsilon_+ + \sqrt{2} e_r, \quad (315)$$

$$\bar{\partial}_s \epsilon_- = \frac{-s-1}{\tan \theta} \epsilon_-. \quad (316)$$

特に

$$\partial_1 \epsilon_+ = 0, \quad (317)$$

$$\partial_{-1} \epsilon_- = \sqrt{2} e_r, \quad (318)$$

$$\bar{\partial}_1 \epsilon_+ = \sqrt{2} e_r, \quad (319)$$

$$\bar{\partial}_{-1} \epsilon_- = 0. \quad (320)$$

∂_s 、 $\bar{\partial}_s$ 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。

A.4.3 共変微分

球面上の共変微分は

$$\begin{aligned} \nabla &= e_1 \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{e_2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\epsilon_- + \epsilon_+}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\epsilon_- - \epsilon_+}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= \frac{\epsilon_-}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{\epsilon_+}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} \quad (321)$$

と書ける。座標基底の回転を行うことで変化しないとする、

$$\partial_{\pm} = - \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (322)$$

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。

A.5 球面調和関数

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

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta). \quad (323)$$

を球面調和関数とよぶ。もし $\theta = 0$ かつ $\varphi = 0$ であるとき、

$$Y_{\ell m}(0, 0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0}. \quad (324)$$

球面上の関数を球面調和関数展開すると

$$F(\hat{n}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} f_{\ell m} Y_{\ell m}(\hat{n}). \quad (325)$$

展開係数 $f_{\ell m}$ を得るには、球面調和関数の直交性

$$\int d^2 \hat{n} Y_{\ell m}^*(\hat{n}) Y_{\ell' m'}(\hat{n}) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'}. \quad (326)$$

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

$$f_{\ell m} = \int d^2\hat{\mathbf{n}} F(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell m}^*(\hat{\mathbf{n}}). \quad (327)$$

が得られる。

A.5.1 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

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}^s &= \left[\frac{(\ell-s)!}{(\ell+s)!} \right]^{1/2} \partial^s Y_{\ell m} \quad (0 \leq s \leq \ell) \\ &= \left[\frac{(\ell+s)!}{(\ell-s)!} \right]^{1/2} (-1)^s \bar{\partial}^s Y_{\ell m} \quad (-\ell \leq s \leq 0). \end{aligned} \quad (328)$$

具体的に書くと

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}^s(\theta, \varphi) &= (-1)^m \sqrt{\frac{(\ell+m)!(\ell-m)!(2\ell+1)}{4\pi(\ell+s)!(\ell-s)!}} \sin^{2\ell} \left(\frac{\theta}{2} \right) \\ &\quad \times \sum_{r=0}^{\ell-s} \binom{\ell-s}{r} \binom{\ell+s}{r+s-m} (-1)^{\ell-r-s} e^{im\varphi} \cot^{2r+s-m} \left(\frac{\theta}{2} \right). \end{aligned} \quad (329)$$

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

$$Y_{\ell m}^s(0, 0) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m,-s}. \quad (330)$$

複素共役、および空間反転は

$$(Y_{\ell m}^s)^*(\hat{\mathbf{n}}) = (-1)^{s+m} Y_{\ell, -m}^{-s}(\hat{\mathbf{n}}), \quad Y_{\ell m}^s(-\hat{\mathbf{n}}) = (-1)^\ell Y_{\ell m}^{-s}(\hat{\mathbf{n}}). \quad (331)$$

ただし $-\hat{\mathbf{n}}$ は $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$ の変換。

A.5.2 直交性、完全性

$$\int d^2\hat{\mathbf{n}} (Y_{\ell m}^s(\hat{\mathbf{n}}))^* Y_{\ell' m'}^s(\hat{\mathbf{n}}) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}, \quad (332)$$

$$\sum_{\ell m} (Y_{\ell m}^s(\hat{\mathbf{n}}))^* Y_{\ell m}^s(\hat{\mathbf{n}}') = \frac{1}{\sin\theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') = \delta(\Omega - \Omega'). \quad (333)$$

A.5.3 加法定理

$$\sum_m (Y_{\ell m}^{s_1})^*(\theta, \phi) Y_{\ell m}^{s_2}(\theta + \beta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} Y_{\ell, -s_1}^{s_2}(\beta, 0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} d_{s_2, -s_1}^\ell(\beta) Y_{\ell, -s_1}^{s_2}(\mathbf{0}). \quad (334)$$

A.5.4 ウィグナー-3j記号との関係

クレブシュ・ゴルダン係数との関係：

$$Y_{\ell_1 m_1}(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell_2 m_2}(\hat{\mathbf{n}}) = \sum_{LM} \sqrt{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)4\pi(2L+1)} C_{\ell_1 0 \ell_2 0}^{L0} C_{\ell_1 m_1 \ell_2 m_2}^{LM} Y_{LM}(\hat{\mathbf{n}}). \quad (335)$$

これから

$$\int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell_2 m_2}(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell_3 m_3}(\hat{\mathbf{n}}) = \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (336)$$

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 ([12])

$$\int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{-s_1}(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell_2 m_2}^{-s_2}(\hat{\mathbf{n}}) Y_{\ell_3 m_3}^{-s_3}(\hat{\mathbf{n}}) = \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ s_1 & s_2 & s_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (337)$$

A.5.5 微分

球面調和関数の微分は[12]

$$\nabla Y_{\ell m}^s = -\sqrt{\frac{(\ell - s)(\ell + s + 1)}{2}} Y_{\ell m}^{s+1} \epsilon_- + \sqrt{\frac{(\ell + s)(\ell - s + 1)}{2}} Y_{\ell m}^{s-1} \epsilon_+. \quad (338)$$

特に

$$\begin{aligned} \nabla Y_{\ell m} &= -\frac{\epsilon_- \partial + \epsilon_+ \bar{\partial}}{\sqrt{2}} Y_{\ell m} \\ &= -\sqrt{\ell(\ell + 1)} \frac{\epsilon_- Y_{\ell m}^1 - \epsilon_+ Y_{\ell m}^{-1}}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (339)$$

式 (338) にもう一度微分を作用させると、球面調和関数の発散は

$$\nabla^2 Y_{\ell m}^s = -[\ell(\ell + 1) - s^2] Y_{\ell m}^s, \quad (\star \nabla) \cdot \nabla Y_{\ell m}^s = 0. \quad (340)$$

となる。スピン演算子を作用させた場合は

$$\partial Y_{\ell m}^s = \sqrt{(\ell - s)(\ell + s + 1)} Y_{\ell m}^{s+1}, \quad (341)$$

$$\bar{\partial} Y_{\ell m}^s = -\sqrt{(\ell + s)(\ell - s + 1)} Y_{\ell m}^{s-1}. \quad (342)$$

A.5.6 球面調和関数を含む積分

以下の積分を考える[13]

$$I_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 m_1 m_2 m_3}^{s_1 s_2 s_3} \equiv c^{ij} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\partial_i Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] [\partial_j Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}], \quad (343)$$

ここで c^{ij} は δ^{ij} あるいは ϵ^{ij} とする。部分積分すると

$$\begin{aligned} I_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 m_1 m_2 m_3}^{s_1 s_2 s_3} &= -c^{ij} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \{ [\partial_j Y_{\ell_1 m_1}^{s_1}] [\partial_i Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} + Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\partial_i \partial_j Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} \} \\ &= c^{ij} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \{ [\partial_j Y_{\ell_1 m_1}^{s_1}] Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} [\partial_i Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] + [\partial_i \partial_j Y_{\ell_1 m_1}^{s_1}] Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} - Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\partial_i \partial_j Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} \} \\ &= -a I_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 m_1 m_2 m_3}^{s_1 s_2 s_3} \\ &\quad + c^{ij} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \{ -Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} [\partial_j \partial_i Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] + [\partial_i \partial_j Y_{\ell_1 m_1}^{s_1}] Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} - Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\partial_i \partial_j Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} \}, \end{aligned} \quad (344)$$

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、

$$\begin{aligned} I_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 m_1 m_2 m_3}^{s_1 s_2 s_3} &= \frac{\delta^{ij}}{2} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \{ -Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} [\partial_j \partial_i Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] + [\partial_i \partial_j Y_{\ell_1 m_1}^{s_1}] Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} - Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\partial_i \partial_j Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} \} \\ &= \frac{-\ell_1(\ell_1 + 1) + \ell_2(\ell_2 + 1) + \ell_3(\ell_3 + 1) + s_1^2 - s_2^2 - s_3^2}{2} \\ &\quad \times \int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}. \end{aligned} \quad (345)$$

式 (337) を使うと、以下の式を得る：

$$\begin{aligned} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\nabla Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] \cdot [\nabla Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] &= [-\ell_1(\ell_1 + 1) + \ell_2(\ell_2 + 1) + \ell_3(\ell_3 + 1) + s_1^2 - s_2^2 - s_3^2] \\ &\times \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2 & -s_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (346)$$

一方で $c^{ij} = \epsilon^{ij}$ のとき、

$$\epsilon^{ij} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \{-Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} [\partial_j \partial_i Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] + [\partial_i \partial_j Y_{\ell_1 m_1}^{s_1}] Y_{\ell_2 m_2}^{s_2} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3} - Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [\partial_i \partial_j Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}\} = 0. \quad (347)$$

これは $(\star \nabla) \cdot \nabla = 0$ という事実と無矛盾である。 $I_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 m_1 m_2 m_3}^{s_1 s_2 s_3}$ 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：

$$\begin{aligned} [(\star \nabla) Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] [\nabla Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] &= \frac{1}{2} [((\star \epsilon_-) \partial + (\star \epsilon_+) \bar{\partial}) Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] [(\epsilon_- \partial + \epsilon_+ \bar{\partial}) Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] \\ &= \frac{i}{2} [(\partial Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}) (\bar{\partial} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}) - (\bar{\partial} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}) (\partial Y_{\ell_3 m_3}^{s_3})] \\ &= \frac{-i}{2} \left[\sqrt{(\ell_2 - s_2)(\ell_2 + s_2 + 1)(\ell_3 + s_3)(\ell_3 - s_3 + 1)} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2+1} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3-1} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{(\ell_2 + s_2)(\ell_2 - s_2 + 1)(\ell_3 - s_3)(\ell_3 + s_3 + 1)} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2-1} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3+1} \right]. \end{aligned} \quad (348)$$

このとき

$$\begin{aligned} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} [(\star \nabla) Y_{\ell_2 m_2}^{s_2}] [\nabla Y_{\ell_3 m_3}^{s_3}] &= \frac{-i}{2} \left[\sqrt{(\ell_2 - s_2)(\ell_2 + s_2 + 1)(\ell_3 + s_3)(\ell_3 - s_3 + 1)} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2+1} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3-1} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{(\ell_2 + s_2)(\ell_2 - s_2 + 1)(\ell_3 - s_3)(\ell_3 + s_3 + 1)} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} Y_{\ell_1 m_1}^{s_1} Y_{\ell_2 m_2}^{s_2-1} Y_{\ell_3 m_3}^{s_3+1} \right] \\ &= -i \left[\sqrt{(\ell_2 - s_2)(\ell_2 + s_2 + 1)(\ell_3 + s_3)(\ell_3 - s_3 + 1)} \right. \\ &\quad \times \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2 - 1 & -s_3 + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \\ &\quad \left. - \sqrt{(\ell_2 + s_2)(\ell_2 - s_2 + 1)(\ell_3 - s_3)(\ell_3 + s_3 + 1)} \right. \\ &\quad \times \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2 + 1 & -s_3 - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \left. \right] \\ &= -i \left[\sqrt{(\ell_2 - s_2)(\ell_2 + s_2 + 1)(\ell_3 + s_3)(\ell_3 - s_3 + 1)} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2 - 1 & -s_3 + 1 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{(\ell_2 + s_2)(\ell_2 - s_2 + 1)(\ell_3 - s_3)(\ell_3 + s_3 + 1)} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ -s_1 & -s_2 + 1 & -s_3 - 1 \end{pmatrix} \right] \\ &\quad \times \sqrt{\frac{(2\ell_1 + 1)(2\ell_2 + 1)(2\ell_3 + 1)}{16\pi}} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (349)$$

A.5.7 ウィグナー-D行列

ウィグナー-D行列はウィグナー-d関数を使って

$$D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im\alpha} d_{mm'}^j(\beta) e^{-im'\gamma}. \quad (350)$$

ここで α, β, γ はオイラー角。ウィグナー-D行列の直交性は、規格化された積分

$$\int d\Omega \equiv \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \sin \beta, \quad (351)$$

を用いて

$$\int d\Omega D_{mm'}^j(\Omega) D_{nn'}^k(\Omega) = \frac{1}{2j+1} \delta_{jk} \delta_{mn} \delta_{m'n'} . \quad (352)$$

また

$$\int d\Omega D_{m_1 m'_1}^{\ell_1}(\Omega) D_{m_2 m'_2}^{\ell_2}(\Omega) D_{m_3 m'_3}^{\ell_3}(\Omega) = \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix} . \quad (353)$$

球を回転すると、その回転の演算 R を用いて

$$Y_{\ell m}(R\hat{n}) = \sum_{m'} D_{m'm}^{\ell}(R) Y_{\ell m'}(\hat{n}) \quad (354)$$

と変換する。

スピン球面調和関数はウィグナーD行列を用いて

$$Y_{\ell m}^s(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} D_{-m s}^{\ell}(\varphi, \theta, 0) . \quad (355)$$

これから

$$Y_{\ell m}^s(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} e^{-im\varphi} d_{-m, s}^{\ell}(\theta) . \quad (356)$$

付録B Wigner 3j 記号

B.1 対称性

文献[14]より

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_2 & \ell_3 & \ell_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_3 & \ell_1 & \ell_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3} \begin{pmatrix} \ell_3 & \ell_1 & \ell_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} , \quad (357)$$

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{\ell_1+\ell_2+\ell_3} \begin{pmatrix} \ell_3 & \ell_1 & \ell_2 \\ -m_3 & -m_1 & -m_2 \end{pmatrix} . \quad (358)$$

B.2 和

文献[14]より

$$\sum_M (-1)^{L+M} \begin{pmatrix} \ell & L & L \\ -m & M & -M \end{pmatrix} = \delta_{\ell,0} \delta_{m,0} \sqrt{\frac{2L+1}{2\ell+1}} , \quad (359)$$

$$\sum_{M, M'} \begin{pmatrix} \ell & L & L' \\ -m & M & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & L & L' \\ -m' & M & M' \end{pmatrix} = \frac{1}{2\ell+1} \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'} . \quad (360)$$

B.3 漸化式: L_1 , L_2 and L_3

文献[14]、8.6章の式(25)より

$$a \begin{pmatrix} L_1 & \ell & L_2 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} L_1 & \ell & L_2+1 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} L_1 & \ell & L_2+2 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} \quad (361)$$

ただし

$$\begin{aligned} a &= \{(L_2 + 1)^2 - M_3^2\}^{1/2} \alpha, \\ b &= -M_2 \beta_1 + M_3 \beta_2, \\ c &= -\{(L_2 + 2) - M_3^2\}^{1/2} \gamma. \end{aligned} \quad (362)$$

α, β_i, γ は

$$\begin{aligned} \alpha &= (L_2 + 2) \sqrt{(-L_2 + \ell + L_1)(L_2 - \ell + L_1 + 1)(L_2 + \ell - L_1 + 1)(L_2 + \ell + L_1 + 2)}, \\ \beta_1 &= 2(L_2 + 1)(L_2 + 2)(2L_2 + 3), \\ \beta_2 &= (2L_2 + 3)[(L_2 + 1)(L_2 + 2) + \ell(\ell + 1) - L_1(L_1 - 1)], \\ \gamma &= (L_2 + 1) \sqrt{(-L_2 + \ell + L_1 - 1)(L_2 - \ell + L_1 + 2)(L_2 + \ell - L_1 + 2)(L_2 + \ell + L_1 + 3)}. \end{aligned} \quad (363)$$

B.4 漸化式: M_1, M_2 and M_3

文献[14]の8.6章、式(4)より

$$\begin{aligned} -\sqrt{(L_3 \pm M_3)(L_3 \mp M_3 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ M_1 & M_2 & -M_3 \pm 1 \end{pmatrix} &= \sqrt{(L_1 \mp M_1)(L_1 \pm M_1 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ M_1 \pm 1 & M_2 & -M_3 \end{pmatrix} \\ &\quad + \sqrt{(L_2 \mp M_2)(L_2 \pm M_2 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ M_1 & M_2 \pm 1 & -M_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (364)$$

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

$$\begin{aligned} -\sqrt{(L_3 + 1)L_3} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sqrt{L_1(L_1 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &\quad + \sqrt{L_2(L_2 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (365)$$

$M_1 = M_2 = M_3 = -1$ の場合

$$\begin{aligned} -\sqrt{(L_3 - 1)(L_3 + 2)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} &= \sqrt{(L_1 + 1)L_1} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \\ &\quad + \sqrt{(L_2 + 1)L_2} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (366)$$

$M_1 = 2, M_2 = -1, M_3 = 0$ の場合

$$\begin{aligned} -\sqrt{L_3(L_3 + 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 2 & -1 & -1 \end{pmatrix} &= \sqrt{(L_1 + 2)(L_1 - 1)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \sqrt{(L_2 - 1)(L_2 + 2)} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_3 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (367)$$

B.5 特殊な場合: $L_3 = L_1 + L_2$

文献[14]の8.5章、式(3)より

$$\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{L_1 + L_2 + M_1 + M_2}}{\sqrt{2L_1 + 2L_2 + 1}} \left[\frac{(2L_1)!(2L_2)!(L_1 + L_2 + M_1 + M_2)!(L_1 + L_2 - M_1 - M_2)!}{(2L_1 + 2L_2)!(L_1 + M_1)!(L_1 - M_1)!(L_2 + M_2)!(L_2 - M_2)!} \right]^{1/2}. \quad (368)$$

これは以下の対称性をもつ

$$\begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ M_1 & M_2 & -M_1 - M_2 \end{pmatrix}. \quad (369)$$

$M_1 = M_2 = M_3 = 0$ の場合、式(368)は

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{L_1+L_2}}{\sqrt{2L_1+2L_2+1}} \left[\frac{(2L_1)!(2L_2)!(L_1+L_2)!(L_1+L_2)!}{(2L_1+2L_2)!(L_1)!(L_1)!(L_2)!(L_2)!} \right]^{1/2} \\ &= \frac{(-1)^{L_1+L_2}}{\sqrt{2L_1+2L_2+1}} \prod_{i=1}^{L_2} \left[\frac{(i-1/2)(i+L_1)}{i(i+L_1-1/2)} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (370)$$

式(368)を式(370)で割ると

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ M_1 & M_2 & -M_1 - M_2 \end{pmatrix} &= (-1)^{M_1+M_2} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[\frac{(L_1+L_2+M_1+M_2)!}{(L_1+L_2)!} \frac{(L_1+L_2-M_1-M_2)!}{(L_1+L_2)!} \right. \\ &\quad \times \left. \frac{(L_1)!}{(L_1+M_1)!} \frac{(L_1)!}{(L_1-M_1)!} \frac{(L_2)!}{(L_2+M_2)!} \frac{(L_2)!}{(L_2-M_2)!} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (371)$$

B.6 特殊な場合： $L_3 = L_1 + L_2 - 1$

文献[14]の8.5章、式(8)より (something wrong ?),

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 - 1 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{L_1-L_2+M_1+M_2}}{\sqrt{2L_1+2L_2+1}} 2(L_2M_1 - L_1M_2) \\ &\quad \times \left[\frac{(2L_1-1)!(2L_2-1)!(L_1+L_2+M_1+M_2-1)!(L_1+L_2-M_1-M_2-1)!}{(2L_1+2L_2)!(L_1+M_1)!(L_1-M_1)!(L_2+M_2)!(L_2-M_2)!} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (372)$$

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

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 - 1 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix} &= (L_2M_1 - L_1M_2) \left[\frac{(2L_1+2L_2+1)}{L_1L_2(L_1+L_2+M_1+M_2)(L_1+L_2-M_1-M_2)} \right]^{1/2} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & L_1 + L_2 \\ -M_1 & -M_2 & M_1 + M_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (373)$$

B.7 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

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{L/2} \frac{(L/2)!}{(L/2-\ell_1)!(L/2-\ell_2)!(L/2-\ell_3)!} \left[\frac{(L-2\ell_1)!(L-2\ell_2)!(L-2\ell_3)!}{(L+1)!} \right]^{1/2} \quad (374)$$

奇数であれば0となる。

B.8 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[14]の8.1章、式(12)より) :

$$C_{\ell_1, m_1, \ell_2, m_2}^{\ell_3, m_3} = (-1)^{\ell_1-\ell_2+m_3} \sqrt{2\ell_3+1} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \quad (375)$$

B.9 近似

文献[12]より、 $\ell \gg 1$ のとき、 $L = \ell_1 + \ell_2 + \ell_3$ が偶数であれば

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix} &\simeq \frac{(-1)^{L/2}}{2} \left[\frac{\ell_2^2 - \ell_1^2 - \ell_3^2}{\ell_1^2 \ell_3^2} - 1 \right] \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\simeq \frac{(-1)^{L/2}}{2} \left[\frac{\ell_2^2 - \ell_1^2 - \ell_3^2}{\ell_1^2 \ell_3^2} - 1 \right] \frac{(L/2)!}{(L/2 - \ell_1)!(L/2 - \ell_2)!(L/2 - \ell_3)!} \left[\frac{(L - 2\ell_1)!(L - 2\ell_2)!(L - 2\ell_3)!}{(L + 1)!} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (376)$$

L が奇数であれば

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix} &\simeq \frac{(-1)^{(L-1)/2}}{2} [L(L - 2\ell_1)(L - 2\ell_2)(L - 2\ell_3)]^{1/2} \frac{\ell_2^2 - \ell_1^2 - \ell_3^2}{\ell_1^2 \ell_3^2} \\ &\times \frac{(L/2)!}{(L/2 - \ell_1)!(L/2 - \ell_2)!(L/2 - \ell_3)!} \left[\frac{(L - 2\ell_1)!(L - 2\ell_2)!(L - 2\ell_3)!}{(L + 1)!} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (378)$$

付録C Wigner d function

C.1 Jacobi polynomial

$$P_n^{(\mu, \nu)} = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\mu} (1+x)^\nu \left(\frac{d}{dx} \right)^n (1-x)^{n+\mu} (1+x)^{n+\nu}. \quad (379)$$

特に

$$P_0^{(\mu, \nu)}(x) = 1, \quad P_1^{(\mu, \nu)}(x) = \frac{1}{2}[(\mu + \nu + 2)x + (\mu - \nu)]. \quad (380)$$

C.2 Definition

$$d_{mm'}^\ell(\beta) = \zeta_{mm'} \sqrt{\frac{s!(s + \mu + \nu)!}{(s + \mu)!(s + \nu)!}} \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^\mu \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^\nu P_s^{(\mu, \nu)}(\cos \beta), \quad (381)$$

ここで

$$\mu = |m - m'|, \quad \nu = |m + m'|, \quad s = \ell - \frac{\mu + \nu}{2}, \quad (382)$$

および

$$\zeta_{mm'} = \begin{cases} 1 & (m' \geq m) \\ (-1)^{m' - m} & (m' < m) \end{cases}, \quad (383)$$

であり、 $P_s^{(\mu, \nu)}$ は Jacobi 多項式を表す。Wigner d関数は、 $\ell < \max(|m|, |m'|)$ のときゼロとなる。これから $d_{mm'}^0 = \delta_{m,0} \delta_{m',0}$ である。

Wignerによって以下の公式が得られている：

$$\begin{aligned} d_{m'm}^j(\beta) &= [(j + m')!(j - m')!(j + m)!(j - m)!]^{1/2} \\ &\times \sum_s \left[\frac{(-1)^{m' - m + s}}{(j + m - s)!s!(m' - m + s)!(j - m' - s)!} \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{2j + m - m' - 2s} \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^{m' - m + 2s} \right]. \end{aligned} \quad (384)$$

C.3 性質

直交性

$$\int_0^\pi d\beta \, d_{mm'}^\ell(\beta) d_{mm'}^{\ell'}(\beta) \sin \beta = \int_{-1}^1 d\mu \, d_{mm'}^\ell(\mu) d_{mm'}^{\ell'}(\mu) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}, \quad (385)$$

ここで $\mu = \cos \beta$ 。

対称性

$$d_{mm'}^\ell(\beta) = (-1)^{m-m'} d_{-m, -m'}^\ell(\beta) = (-1)^{m-m'} d_{m'm}^\ell(\beta), \quad (386)$$

$$d_{mm'}^\ell(\beta) = (-1)^{\ell+m} d_{m, -m'}^\ell(\pi - \beta). \quad (387)$$

C.4 漸化式

$$0 = \frac{\sqrt{[(\ell+1)^2 - m^2][(\ell+1)^2 - m'^2]}}{(\ell+1)(2\ell+1)} d_{mm'}^{\ell+1}(\mu) + \left(\frac{mm'}{\ell(\ell+1)} - \mu \right) d_{mm'}^\ell(\mu) + \frac{\sqrt{(\ell^2 - m^2)(\ell^2 - m'^2)}}{\ell(2\ell+1)} d_{mm'}^{\ell-1}(\mu). \quad (388)$$

あるいは $\ell \rightarrow \ell-1$ として

$$0 = \frac{\sqrt{[\ell^2 - m^2][\ell^2 - m'^2]}}{\ell(2\ell-1)} d_{mm'}^\ell(\mu) + \left(\frac{mm'}{\ell(\ell-1)} - \mu \right) d_{mm'}^{\ell-1}(\mu) + \frac{\sqrt{((\ell-1)^2 - m^2)((\ell-1)^2 - m'^2)}}{(\ell-1)(2\ell-1)} d_{mm'}^{\ell-2}(\mu). \quad (389)$$

$m = m' = 0$ のとき

$$0 = \ell d_{mm'}^\ell(\mu) - \mu(2\ell-1) d_{mm'}^{\ell-1}(\mu) + (\ell-1) d_{mm'}^{\ell-2}(\mu). \quad (390)$$

C.5 特殊な場合

β あるいは μ の関数として

$$d_{00}^1(\mu) = \mu, \quad d_{01}^1(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta, \quad d_{11}^1(\mu) = \cos^2 \frac{\beta}{2} = \frac{1+\mu}{2}. \quad (391)$$

$$d_{01}^\ell(\beta) = -d_{0, -1}^\ell(\beta), \quad d_{11}^\ell(\beta) = -d_{-1, -1}^\ell(\beta) = (-1)^{\ell+1} d_{1, -1}^\ell(\pi - \beta). \quad (392)$$

$J = m$ の場合

$$d_{\ell m}^\ell = \sqrt{\frac{(2\ell)!}{(\ell+m)!(\ell-m)!}} \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{\ell+m} \left(-\sin \frac{\beta}{2} \right)^{\ell-m}. \quad (393)$$

$\beta = 0$ での値を求める。もし $m \neq m'$ であれば、

$$d_{mm'}^\ell(\beta) \propto [\sin(\beta/2)]^{|m-m'|}, \quad (394)$$

なので、

$$d_{mm'}^\ell(0) = 0, \quad (395)$$

となる。一方で $m = m'$ のとき、漸化式から

$$0 = \frac{[(\ell+1)^2 - m^2]}{(\ell+1)(2\ell+1)} d_{mm}^{\ell+1}(0) + \left(\frac{m^2}{\ell(\ell+1)} - 1 \right) d_{mm}^\ell(0) + \frac{\ell^2 - m^2}{\ell(2\ell+1)} d_{mm}^{\ell-1}(0), \quad (396)$$

であり、 $d_{mm}^\ell(0) = 1$ は解である。

C.6 Wigner-3j 記号との関係

$$\int_{-1}^1 d\mu \, d_{s_1, s'_1}^{\ell_1} d_{s_2, s'_2}^{\ell_2} d_{s_3, s'_3}^{\ell_3} = 2 \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ s_1 & s_2 & s_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ s'_1 & s'_2 & s'_3 \end{pmatrix}, \quad (397)$$

ただし $s_1 + s_2 + s_3 = s'_1 + s'_2 + s'_3 = 0$.

C.7 加法定理

文献[14]より

$$\sum_{m''=-\ell}^{\ell} d_{mm''}^{\ell}(\beta_1) d_{m''m'}^{\ell}(\beta_2) e^{-im''\varphi} = e^{-im\alpha} d_{mm'}^{\ell}(\beta) e^{-im'\gamma}, \quad (398)$$

ここで

$$\cot \alpha = \cos \beta_1 \cot \varphi + \cot \beta_2 \frac{\sin \beta_1}{\sin \varphi}, \quad (399)$$

$$\cos \beta = \cos \beta_1 \cos \beta_2 - \sin \beta_1 \sin \beta_2 \cos \varphi, \quad (400)$$

$$\cot \gamma = \cos \beta_2 \cot \varphi + \cot \beta_1 \frac{\sin \beta_2}{\sin \varphi}. \quad (401)$$

特に $\varphi = 0$ のとき、

$$\sum_{m''=-\ell}^{\ell} d_{mm''}^{\ell}(\beta_1) d_{m''m'}^{\ell}(\beta_2) = \begin{cases} d_{mm'}^{\ell}(\beta_1 + \beta_2) & (\beta_1 + \beta_2 \leq \pi) \\ (-1)^{m+m'} d_{mm'}^{\ell}(2\pi - \beta_1 - \beta_2) & (\beta_1 + \beta_2 \geq \pi) \end{cases}. \quad (402)$$

C.8 Wigner D matrix

α, β, γ をオイラー角として

$$D_{m'm}^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-im'\alpha} d_{m'm}^{\ell}(\beta) e^{-im\gamma}. \quad (403)$$

付録D 特殊関数

D.1 エルミート多項式

D.1.1 定義

確率の分野でよく使われる定義は

$$h_n(x) = e^{x^2/2} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{x^2/2} \quad (404)$$

$$h_{-1}(x) = e^{x^2/2} \int_x^{\infty} dt \, e^{t^2/2} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{x^2/2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right). \quad (405)$$

特に

$$\begin{aligned} h_0(x) &= 1, & h_1(x) &= x, & h_2(x) &= x^2 - 1, & h_3(x) &= x^3 - 3x, \\ h_4(x) &= x^4 - 6x^2 + 3, & h_5(x) &= x^5 - 10x^3 + 15x. \end{aligned} \quad (406)$$

別の定義として

$$H_n(x) = e^{x^2} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2} = e^{x^2/2} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2}. \quad (407)$$

これらは以下で結びつく：

$$H_n(x) = 2^{n/2} h_n(\sqrt{2}x). \quad (408)$$

D.1.2 性質

エルミート多項式の直交関係は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx h_n(x) h_m(x) e^{-x^2} = \sqrt{\pi} n! \delta_{mn} \quad (409)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} = \sqrt{2\pi} 2^n n! \delta_{mn}. \quad (410)$$

漸化式：

$$h_{n+1}(x) = x h_n(x) - \frac{d h_n(x)}{dx}, \quad \frac{d h_n(x)}{dx} = n h_{n-1}(x) \quad (411)$$

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - \frac{d H_n(x)}{dx}, \quad \frac{d H_n(x)}{dx} = 2n H_{n-1}(x). \quad (412)$$

多項式表示：

$$H_n(x) = \begin{cases} n! \sum_{m=0}^{n/2} \frac{(-1)^{n/2-m}}{(2m)!(n/2-m)!} (2x)^{2m} & (n = \text{even}) \\ n! \sum_{m=0}^{(n-1)/2} \frac{(-1)^{(n-1)/2-m}}{(2m+1)!((n-1)/2-m)!} (2x)^{2m+1} & (n = \text{odd}) \end{cases}. \quad (413)$$

生成関数：

$$\exp(xt - t^2/2) = \sum_{n=0}^{\infty} h_n(t) \frac{t^n}{n!}, \quad \exp(2xt - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(t) \frac{t^n}{n!}. \quad (414)$$

ルジャンドル多項式との関係：

$$H_{2n}(x) = (-4)^n n! L_n^{-1/2}(x^2) = 4^n n! \sum_{i=0}^n (-1)^{n-i} \binom{n-1/2}{n-i} \frac{x^{2i}}{i!}, \quad (415)$$

$$H_{2n+1}(x) = 2(-4)^n n! x L_n^{-1/2}(x^2) = 2 \times 4^n n! \sum_{i=0}^n (-1)^{n-i} \binom{n+1/2}{n-i} \frac{x^{2i+1}}{i!}. \quad (416)$$

D.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：

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{df}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) f = 0. \quad (417)$$

ベッセル関数の表式は

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2} \right)^\nu \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(\nu + m + 1)} \left(\frac{z}{2} \right)^{2m}. \quad (418)$$

ノイマン関数は

$$Y_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin \nu\pi}. \quad (419)$$

D.2.1 性質

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x), \quad Y_{-n}(x) = (-1)^n Y_n(x). \quad (420)$$

$$J_\nu(z) = \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu+1)} {}_0F_1(\nu+1; -z^2/4). \quad (421)$$

$$\frac{d}{dx} x^n J_n = x^n J_{n-1}(x). \quad (422)$$

D.2.2 漸化式

$$J_{\nu-1}(z) + J_{\nu+1}(z) = \frac{2\nu}{z} J_\nu(z), \quad (423)$$

$$J_{\nu-1}(z) - J_{\nu+1}(z) = 2 \frac{dJ_\nu(z)}{dz}. \quad (424)$$

D.2.3 漸近形

$$J_n(x \sim 0) = \frac{1}{n!} \left(\frac{x}{2}\right)^n \quad (425)$$

$$J_\nu(x \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{2\nu+1}{4}\pi\right) \quad (426)$$

$$Y_n(x \sim 0) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \ln \frac{x}{2} \\ -\frac{(n-1)!}{\pi} \left(\frac{x}{2}\right)^{-n} \end{cases} \quad (427)$$

および

$$Y_\nu(x \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{2\nu+1}{4}\pi\right) \quad (428)$$

D.2.4 積分

以下の積分は収束する：

$$\int_0^\infty dx J(x). \quad (429)$$

以下は証明である。まず、

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \int_\gamma^\infty dx J_\nu(x) \sim \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \int_\gamma^\infty dx \frac{1}{\sqrt{x}} \cos(x - \alpha_\nu). \quad (430)$$

このとき

$$\int_\gamma^\infty dx \frac{1}{\sqrt{x}} \cos(x - \alpha_\nu) = \left[\frac{1}{\sqrt{x}} \sin(x - \alpha_\nu) \right]_\gamma^\infty + \int_\gamma^\infty dx \frac{1}{2\sqrt{x^3}} \sin(x - \alpha_\nu). \quad (431)$$

したがって

$$\left| \int_\gamma^\infty dx \frac{1}{2\sqrt{x^3}} \sin(x - \alpha_\nu) \right| \leq \int_\gamma^\infty dx \frac{1}{2\sqrt{x^3}} \leq \frac{1}{\gamma}. \quad (432)$$

一方で、 $x \rightarrow 0$ のとき

$$J_\nu(x) \sim x^\nu. \quad (433)$$

D.2.5 他の公式

Hanseの公式

$$J_n(z) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{iz \cos \theta} e^{in(\theta - \pi/2)}, \quad (434)$$

ここで $n \geq 0$.

D.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：

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{df}{dx} + \left(1 - \frac{n(n+1)}{x^2}\right) f = 0. \quad (435)$$

$x \rightarrow 0$ 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：

$$h_n^{(1)}(x) = -\frac{(x/2)^n}{n!} \int_1^{i\infty} dt e^{ixt} (1-t^2)^n, \quad (436)$$

$$h_n^{(2)}(x) = \frac{(x/2)^n}{n!} \int_{-1}^{i\infty} dt e^{ixt} (1-t^2)^n. \quad (437)$$

これから

$$j_n(x) = \frac{h_n^{(1)} + h_n^{(2)}}{2}, \quad n_n(x) = \frac{h_n^{(1)} - h_n^{(2)}}{2i}, \quad (438)$$

を定義する。ここで

$$j_n(x) = -\frac{(x/2)^n}{2n!} \int_{-1}^1 dt e^{ixt} (1-t^2)^n, \quad (439)$$

である。

ベッセル関数を用いると

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x), \quad n_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x) = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-n-1/2}(x). \quad (440)$$

で表される。

微分を用いると

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \frac{\sin x}{x}, \quad (441)$$

$$n_n(x) = -(-x)^n \left(\frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \frac{\cos x}{x}. \quad (442)$$

特に

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^2}, \quad j_2(x) = \frac{(3-x^2) \sin x - 3x \cos x}{x^3}, \quad (443)$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x + x \sin x}{x^2}, \quad n_2(x) = -\frac{(3-x^2) \cos x + 3x \sin x}{x^3}. \quad (444)$$

反転公式

$$j_n(-x) = (-1)^n j_n(x), \quad n_n(-x) = (-1)^{n+1} n_n(x). \quad (445)$$

D.3.1 級数表示

級数で表すと[15]

$$j_n(x) = (2x)^n \sum_k^{\infty} \frac{(-1)^k (k+n)!}{k! (2k+2n+1)!} x^{2k} \quad (446)$$

$$= x^n \sum_k^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! (2k+2n+1)!!} \left(\frac{x^2}{2}\right)^k, \quad (447)$$

$$n_n(x) = \frac{(-1)^{n+1}}{2^n x^{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k-n)!}{k! (2k-2n)!} x^{2k} \quad (448)$$

$$= \frac{(-1)^{n+1} \sqrt{\pi}}{2^n x^{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k 4^{(n-k)}}{\Gamma(k+1) \Gamma(1/2 - n + k)} x^{2k} \quad (449)$$

$$= \frac{(-1)^n}{x^{n+1}} \sum_k^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! (2k-2n+1)!!} \left(\frac{x^2}{2}\right)^k. \quad (450)$$

D.3.2 漸近形

$x \rightarrow 0$ においては

$$j_n(x \sim 0) = \frac{x^n}{(2n+1)!} \quad (451)$$

$$n_n(x \sim 0) = -\frac{(2n-1)!!}{x^n} \quad (452)$$

一方で $x \rightarrow \infty$ では

$$j_n(x \rightarrow \infty) = \frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{n+1}{2}\pi\right) \quad n_n(x \rightarrow \infty) = \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{n+1}{2}\pi\right) \quad (453)$$

D.3.3 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

$$j'_n(x) = j_{n-1}(x) - (n+1) \frac{j_n(x)}{x}. \quad (454)$$

で与えられることが分かる。あるいは

$$\frac{d}{dx} x^{n+1} j_n(x) = x^{n+1} j_{n-1}(x). \quad (455)$$

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

$$j_{n-1}(x) + j_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} j_n(x), \quad (456)$$

が得られる。

D.3.4 部分波展開

部分波展開とは

$$e^{ikx \cos \theta} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n j_n(kx) P_n(\cos \theta) \quad (457)$$

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

$$j_n(x) = -\frac{(x/2)^n}{2n!} \int_{-1}^1 dt e^{ixt} \frac{(-1)^n}{(ix)^n} \left(\frac{d}{dt} \right)^n (1-t^2)^n, \quad (458)$$

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

$$j_n(x) = -\frac{1}{2i^n} \int_{-1}^1 dt e^{ixt} P_n(t) \quad (459)$$

が得られる。これから、部分波展開の右辺は

$$\sum_{n=0}^{\infty} 2i^n \frac{2n+1}{2} P_n(t') j_n(x) = \int_{-1}^1 dt e^{ixt} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(t') P_n(t) = e^{ixt'} \quad (460)$$

となる。

一般の部分波展開は

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \sum_{n=0}^{\infty} 4\pi i^n j_n(kx) \sum_{m=-n}^n Y_{nm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{nm}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (461)$$

D.3.5 直交性

三次元デルタ関数のフーリエ表示を使うことで

$$\delta_D^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \int d^3\mathbf{x} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}} \quad (462)$$

$$= (4\pi)^2 \sum_{nm} \int_0^{\infty} dx x^2 j_n(kx) j_n(k'x) Y_{nm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{nm}(\hat{\mathbf{k}}') \quad (463)$$

$$= (2\pi)^3 \delta_D^{(2)}(\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{x}}) \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx x^2 j_n(kx) j_n(k'x) \quad (464)$$

ただし球面調和関数の直交性を用いた。これより

$$\frac{1}{k^2} \delta_D^{(1)}(k - k') = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx x^2 j_n(kx) j_n(k'x) \quad (465)$$

が得られる。

付録E 超関数

E.1 デルタ関数

E.1.1 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：

$$\tilde{f}(\ell) = \frac{1}{B} \int d^2\mathbf{x} e^{-i\mathbf{x} \cdot \ell} f(\mathbf{x}) \quad (466)$$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{A} \int \frac{d^2\ell}{(2\pi)^2} e^{i\ell \cdot \mathbf{x}} \tilde{f}(\ell). \quad (467)$$

これより

$$f(\mathbf{x}) = \int \frac{d^2\ell}{A} \int \frac{d^2\mathbf{x}'}{B} e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \cdot \ell} f(\mathbf{x}') \equiv \int \frac{d^2\mathbf{x}'}{A} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}'). \quad (468)$$

ここで $\Delta(\mathbf{x})$ は S 上のデルタ関数で

$$\Delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{B} \int \frac{d^2 \ell}{(2\pi)^2} e^{i\ell \cdot \mathbf{x}}. \quad (469)$$

である。デルタ関数は $f(\ell) = 1$ を逆フーリエ変換して得たものである。 S 上の任意の関数に対し、デルタ関数は以下を満たす：

$$\int \frac{d^2 \mathbf{x}'}{A} f(\mathbf{x}') \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = f(\mathbf{x}). \quad (470)$$

同様に、 ℓ を変数としたデルタ関数を $f(\mathbf{x}) = 1$ のフーリエ変換として定義する：

$$\Delta(\ell) = \frac{1}{A} \int d^2 \mathbf{x} e^{-i\mathbf{x} \cdot \ell}. \quad (471)$$

これより

$$\int \frac{d^2 \ell'}{B} f(\ell') \Delta(\ell - \ell') = f(\ell). \quad (472)$$

$\Delta(\mathbf{x})$ と $\Delta(\ell)$ は以下で関連付けられる：

$$\int \frac{d^2 \mathbf{x}}{A} \Delta(\mathbf{x}) = \int \frac{d^2 \mathbf{x}}{B} \int \frac{d^2 \ell}{A} e^{i\mathbf{x} \cdot \ell} = \int \frac{d^2 \ell}{B} \Delta(-\ell). \quad (473)$$

E.1.2 単位球面の場合

単位球面から二次元面へのフーリエ変換を考える。このとき、 Δ_ℓ は1のフーリエ変換として与えられる。

$$\Delta_\ell = \int d^2 \hat{\mathbf{n}} e^{-i\hat{\mathbf{n}} \cdot \ell}. \quad (474)$$

以下を満たす：

$$\Delta_\ell = \begin{cases} 1/\pi & (\ell = \mathbf{0}) \\ 0 & (\ell \neq \mathbf{0}) \end{cases}. \quad (475)$$

球面上のデルタ関数を以下のように定める：

$$\Delta(\hat{\mathbf{n}}) = \int \frac{d^2 \ell}{(2\pi)^2} e^{i\ell \cdot \hat{\mathbf{n}}}. \quad (476)$$

球面では $|\hat{\mathbf{n}}| = 1$ であり、 $\Delta(\hat{\mathbf{n}}) \neq \Delta(\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{0})$ である。また

$$0 = \int \frac{d^2 \ell}{(2\pi)^2} \Delta_\ell = \int \frac{d^2 \ell}{(2\pi)^2} \int d^2 \hat{\mathbf{n}} e^{-i\hat{\mathbf{n}} \cdot \ell} = \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \Delta(\hat{\mathbf{n}}). \quad (477)$$

$\Delta(\hat{\mathbf{n}})$ の性質から

$$\int d^2 \ell' F_{\ell'} \Delta_{\ell' - \ell} = \int d^2 \ell' \int d^2 \hat{\mathbf{n}}' e^{-i\hat{\mathbf{n}}' \cdot \ell'} f(\hat{\mathbf{n}}') \int d^2 \hat{\mathbf{n}} e^{-i\hat{\mathbf{n}} \cdot (\ell' - \ell)} \quad (478)$$

$$= \int d^2 \hat{\mathbf{n}} \int d^2 \hat{\mathbf{n}}' e^{-i\hat{\mathbf{n}}' \cdot \ell} f(\hat{\mathbf{n}}) \Delta(\hat{\mathbf{n}}' - \hat{\mathbf{n}}) \quad (479)$$

$$= \int d^2 \hat{\mathbf{n}} e^{-i\hat{\mathbf{n}} \cdot \ell} f(\hat{\mathbf{n}}) = F_\ell. \quad (480)$$

付録F 確率統計

F.1 モーメントとキュムラント

以下の二つの生成関数 $M_x(t)$ および $K_x(t)$ を考える：

$$M_x(t) \equiv \langle e^{tx} \rangle \quad K_x(t) \equiv \ln M_x(t). \quad (481)$$

n 次のモーメント $\mu_n = \langle x^n \rangle$ とキュムラントは以下のように定義される：

$$\mu_n = \left. \frac{\partial^n}{\partial t^n} M_x \right|_{t=0}, \quad \kappa_n \equiv \left. \frac{\partial^n}{\partial t^n} K_x \right|_{t=0}. \quad (482)$$

F.2 対数正規分布

対数正規分布は以下で定義される：

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma x} \exp \left[-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2} \right], \quad N(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{(y - \mu)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (483)$$

任意の $n \in \mathbf{R}$ に対し

$$\begin{aligned} I_n &\equiv \int_0^\infty dx x^n P(x) dx = \int_{-\infty}^\infty dy e^{ny} N(y) dy \\ &= \exp \left[n\mu + n^2 \frac{\sigma^2}{2} \right] \int_{-\infty}^\infty dy \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{(y - \mu - \sigma^2 n)^2}{2\sigma^2} \right] dy = \exp \left[n\mu + n^2 \frac{\sigma^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (484)$$

特に

$$E(x) \equiv \langle x \rangle = I_1 = e^{\mu + \frac{\sigma^2}{2}}, \quad (485)$$

$$V(x) \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{I_2 - I_1^2} = e^{\mu + \frac{\sigma^2}{2}} \sqrt{e^{\sigma^2} - 1}. \quad (486)$$

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

$$E(x^{-1}) = I_{-1} = (I_1)^{-1} e^{\sigma^2} = [E(x)]^{-1} e^{\sigma^2}, \quad (487)$$

$$V(x^{-1}) = \sqrt{I_{-2} - I_{-1}^2} = e^{-\mu + \frac{\sigma^2}{2}} \sqrt{e^{\sigma^2} - 1} = [E(x)]^{-2} V(x) e^{-\sigma^2}. \quad (488)$$

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

$$\frac{1}{x} \simeq \frac{1}{\langle x \rangle} - \frac{\delta x}{x^2}. \quad (489)$$

歪度は

$$\langle (x - \langle x \rangle)^3 \rangle = \exp(3\mu) \left[\exp \frac{9\sigma^2}{2} - 3 \exp \frac{5\sigma^2}{2} + 2 \exp \frac{3\sigma^2}{2} \right] \quad (490)$$

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。

付録G 行列計算

G.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：

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A} \quad (491)$$

$$\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+ \quad (492)$$

$$(\mathbf{A}\mathbf{A}^+)^\dagger = \mathbf{A}\mathbf{A}^+ \quad (493)$$

$$(\mathbf{A}^+\mathbf{A})^\dagger = \mathbf{A}^+\mathbf{A} \quad (494)$$

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 \mathbf{A}^{-1} が存在するとき $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$ である。

もし \mathbf{A} の各列が互いに線形独立である場合、

$$\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\dagger \quad (495)$$

であり、 $\mathbf{A}^+ \mathbf{A} = \mathbf{I}$ となる。一方で各行が線形独立の場合は

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^\dagger (\mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger)^{-1} \quad (496)$$

であり、 $\mathbf{A} \mathbf{A}^+ = \mathbf{I}$ となる。

G.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、

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{pmatrix} A_{11}\mathbf{B} & A_{12}\mathbf{B} & \cdots & A_{1n}\mathbf{B} \\ A_{21}\mathbf{B} & A_{22}\mathbf{B} & \cdots & A_{2n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}\mathbf{B} & A_{m2}\mathbf{B} & \cdots & A_{mn}\mathbf{B} \end{pmatrix} \quad (497)$$

をクロネッカー積とよぶ。

G.2.1 性質

以下の関係を満たす：

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{C} + \mathbf{B} \otimes \mathbf{C} \quad (498)$$

$$\mathbf{A} \otimes (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} + \mathbf{A} \otimes \mathbf{C} \quad (499)$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C} = \mathbf{A} \otimes (\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}) \quad (500)$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T \otimes \mathbf{B}^T \quad (501)$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \otimes \mathbf{B}^{-1} \quad (502)$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^+ = \mathbf{A}^{-1} \otimes \mathbf{B}^+ \quad (503)$$

$$(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})(\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}) = (\mathbf{A}\mathbf{C}) \otimes (\mathbf{B}\mathbf{D}). \quad (504)$$

\mathbf{A} を n 次正方行列、 \mathbf{B} を m 次正方行列とすると、

$$|\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}| = |\mathbf{A}|^m |\mathbf{B}|^n \quad (505)$$

G.3 行列のベクトル化とその応用

G.3.1 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：

$$\text{vec}(\mathbf{A})^T = (A_{11}, \dots, A_{m1}, A_{12}, \dots, A_{1n}, \dots, A_{mn}). \quad (506)$$

このとき、二つの行列のトレースは

$$\text{Tr}[\mathbf{A}^T \mathbf{B}] = \text{vec}(\mathbf{A})^T \text{vec}(\mathbf{B}). \quad (507)$$

ベクトル \mathbf{a} に対して定義される行列 $\mathbf{A} = \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger$ のベクトル化は

$$\text{vec} \mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{a}^* \quad (508)$$

と表せる。

3つの行列の積のベクトル化は

$$\text{vec}(\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_3) = (\mathbf{A}_3^T \otimes \mathbf{A}_1) \text{vec}(\mathbf{A}_2). \quad (509)$$

ここで \otimes はクロネッカー積を表す。式 (507) と (509) を合わせると

$$\text{Tr}(\mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_3 \mathbf{A}_4) = \text{vec}(\mathbf{A}_1)^T (\mathbf{A}_4^T \otimes \mathbf{A}_2) \text{vec}(\mathbf{A}_3), \quad (510)$$

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

$$X \equiv \text{Tr}(\mathbf{A}_1^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{A}_2 \mathbf{C}^{-1}) = \text{vec}(\mathbf{A}_1)^T (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} \text{vec}(\mathbf{A}_2). \quad (511)$$

G.3.2 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：

$$\text{vech}(\mathbf{A}) = (A_{11}, A_{21}, \dots, A_{n1}, A_{22}, \dots, A_{nn}) \quad (512)$$

全ベクトル化との関係を

$$\text{vec}(\mathbf{A}) = \mathbf{B}_n^T \text{vech}(\mathbf{A}) \quad (513)$$

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

$$\text{vec}(\mathbf{A}) = (\mathbf{B}_n^+)^T \text{vech}(\mathbf{A}) \quad (514)$$

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

$$\begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ A_{21} \\ A_{22} \end{pmatrix} \quad (515)$$

の右辺の行列は \mathbf{B}_2^T である。また

$$\mathbf{B}_2^T \mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (516)$$

$$\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_2^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (517)$$

であり、疑似逆行列は

$$\mathbf{B}_2^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (518)$$

さらに

$$\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_2^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (519)$$

式 (511) は

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{2} \text{vech}(\mathbf{A}_1)^T (\mathbf{B}_n^+) (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} \text{vec}(\mathbf{A}_2) \\ &= \frac{1}{2} \text{vec}(\mathbf{A}_1)^T (\mathbf{B}_n \mathbf{B}_n^+) (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} \text{vec}(\mathbf{A}_2) \end{aligned} \quad (520)$$

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）

$$\mathbf{B}_n \mathbf{B}_n^+ (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} = (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} \mathbf{B}_n \mathbf{B}_n^+ \quad (521)$$

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

$$\mathbf{M} \equiv \mathbf{B}_n^T (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}) \mathbf{B}_n \quad (522)$$

と定義した行列 \mathbf{M} は

$$\mathbf{B}_n^+ (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} (\mathbf{B}_n^+)^T \mathbf{M} = \mathbf{B}_n^+ (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} \mathbf{B}_n \mathbf{B}_n^+ (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}) \mathbf{B}_n = \mathbf{B}_n^+ \mathbf{B}_n \mathbf{B}_n^+ (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})^{-1} (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}) \mathbf{B}_n = \mathbf{1} \quad (523)$$

を満たす。従って、Fisher行列は

$$F_{ij} = \frac{1}{2} \text{vech}(\mathbf{C}_{,i})^T \mathbf{M}^{-1} \text{vech}(\mathbf{C}_{,j}) \quad (524)$$

となる。

参考文献

- [1] T. Matsubara, “Statistical perturbation theory of cosmic fields. 1. Basic formalism and second order theory”, *Astrophys. J.* (2003) [astro-ph/0006269].
- [2] 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].
- [3] 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].

- [4] D. Babich, “*Optimal estimation of non-Gaussianity*”, *Phys. Rev. D* **72** (2005) 043003, [astro-ph/0503375].
- [5] M. Zaldarriaga and U. Seljak, “*Reconstructing projected matter density from cosmic microwave background*”, *Phys. Rev. D* **59** (1999) 123507, [astro-ph/9810257].
- [6] W. Hu and T. Okamoto, “*Mass Reconstruction with CMB Polarization*”, *Astrophys. J.* **574** (2002) 566–574.
- [7] M. H. Kesden, A. Cooray, and M. Kamionkowski, “*Lensing Reconstruction with CMB Temperature and Polarization*”, *Phys. Rev. D* **67** (2003) 123507, [astro-ph/0302536].
- [8] 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].
- [9] T. Namikawa, D. Hanson, and R. Takahashi, “*Bias-Hardened CMB Lensing*”, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **431** (2013) 609–620, [arXiv:1209.0091].
- [10] C. M. Hirata and U. Seljak, “*Reconstruction of lensing from the cosmic microwave background polarization*”, *Phys. Rev. D* **68** (2003) 083002, [astro-ph/0306354].
- [11] J. N. Goldberg *et al.*, “*Spin-s Spherical Harmonics and d*”, *Journal of Mathematical Physics* (1967). View Online.
- [12] W. Hu, “*Weak lensing of the CMB: A harmonic approach*”, *Phys. Rev. D* **62** (2000) 043007, [astro-ph/0001303].
- [13] 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].
- [14] D. Varshalovich, A. Moskalev, and V. Kersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*. World Scientific, 1989.
- [15] E. W. Weisstein, “*Spherical Bessel Function of the First Kind*”, . MathWorld—A Wolfram Web Resource, <http://mathworld.wolfram.com/SphericalBesselFunctionoftheFirstKind.html>.