Appendix B： クロネッカーの記号（Kronecker delta）、δ_{ij} と Dirac delta、$\delta(x-y)$ の関係、及び逆行列（inverse matrix）、A^{-1} とグリーン関数（Green's function）、$G(x,y)$ の関係についての素朴なイメージ

この項は、(数学的な厳密性を問わない）あくまでも初等的かつイメージ的な解説でる。またはイメージ的な復習であると言ってもよいかもしれない。

（1）Kronecker delta と Dirac delta

単位行列、I は周知のように、どんな行列、A やどんなベクトル、$\mathbf{a}$ をもってきても、

$$AI = IA = A,\quad I\mathbf{a} = \mathbf{a},\quad \mathbf{a}^T I = \mathbf{a}^T \quad (T:\text{transpose}) \tag{B-1}$$

を満足する。$I\mathbf{a} = \mathbf{a}$ を成分で書くと、

$$\sum_j \delta_{ij} a_j = a_i \tag{B-2}$$

となるが、クロネッカーの記号、δ_{ij} を、

$$\delta_{ij} = \delta(i-j) \tag{B-3}$$

と書き換えてみよう。すると、この δ 関数は、整数を引数とする関数で、

$$\delta(i) = \begin{cases} 1 & (i=0) \\ 0 & (i \neq 0) \end{cases} \tag{B-4}$$

となる。すると、式(B-2)は、

$$\sum_j \delta(i-j) a_j = a_i \tag{B-5}$$

と書けることになる。

一方、Dirac のデルタ関数は、どんな関数についても、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \delta(x-y) f(y) = f(x) \tag{B-6}$$

となるものであった。左辺の積分操作によって、右辺の関数の値、$f(x)$ に、x 以外の関数の値、$f(y)$ が混じらないためには、$x \neq y$ に対して、$\delta(x-y) = 0$ であることが必要であ

る。一方、$x=y$ に対して、$\delta(x-y)=c \quad (c:\text{finite})$ とすると、

左辺の積分は、ゼロとなってしまうので、$\delta(x-x)=\delta(0)=\infty$

でないといけないことになる（あくまでもデルタ関数を普通の関数であると思うとすると・・・）これが我々のデルタ関数の素朴なイメージである（図 B.1 を参照)。いずれにしろ、この素朴なイメージから、

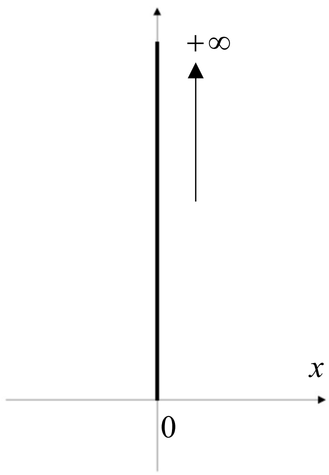

図 B.1

$$\int_{-h}^{h}\delta(x)dx=1 \quad \left(\text{for } {}^{\forall}h>0\right) \qquad \text{(B-7)}$$

など、よく知られたものが得られる。さて、式(B-6)を、図 B.2 にあるように、「ディジタル化」してみると、

$$\sum_j \int_{-h/2}^{h/2} dt\,\delta\left(x_i-\left(x_j+t\right)\right) f\left(x_j+t\right)=f\left(x_i\right) \qquad \text{(B-8)}$$

となる。これは、全く近似なしの正確な式、つまり式(B-6)と同じものである。ここで、

$$\int_{-h/2}^{h/2} dt\,\delta\left(x_i-\left(x_j+t\right)\right) g(t)=\delta(i-j)\,g(0)$$

（ここで、右辺の δ はクロネッカーの δ ）であるので、

$$f_i=f\left(x_i\right),\quad f_j=f\left(x_j\right)$$

とおくと、式(B-8)は、

$$\sum_j \delta(i-j) f_j=f_i \qquad \text{(B-9)}$$

となり、式(B-5)と同じ形をしていることがわかる。そもそも、式(B-2)は、単に、

$$a_i=a_i$$

を言っているようなもので、ほとんど意味がない（自明である）とも言える。これは式(B-9)

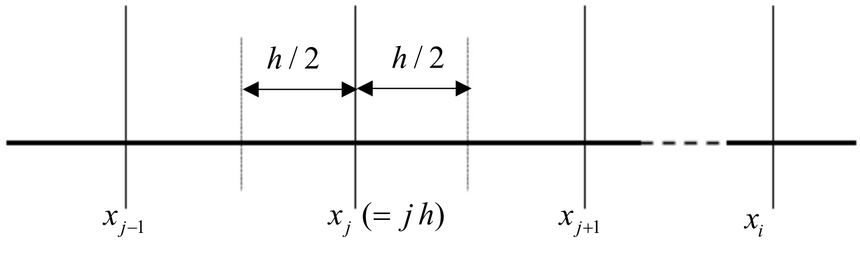

図 B.2

も同様です。しかし、多分、大切なのは、「形」、つまりその形式にあるだろう。変数が整数である discrete の場合の式(B-2)が変数を連続にした場合には式(B-6)が対応している。さら

に言えば、Dirac のデルタ関数は、discrete の場合の単位行列に対応しているということである。

［余分なコメント］

dyadic 表現を知らない方は、このコメントは無視してもよい。

マトリックスとベクトルとの積は、

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x} \ , \quad y_i = A_{ij}x_j$$

であるが、

$$\mathbf{A} = A_{ij}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j$$

という dyadic 表現を使うと、上の積は、次のような dyadic の内積として書ける。

$$\begin{aligned}
&\mathbf{y} = y_i\mathbf{e}_i = \mathbf{A}\cdot\mathbf{x} = A_{ij}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j\cdot x_k\mathbf{e}_k = A_{ij}\mathbf{e}_i\left(\mathbf{e}_j\cdot\mathbf{e}_k\right)x_k = A_{ij}\mathbf{e}_i\delta_{jk}x_k \\
&= \mathbf{e}_i A_{ij}x_j
\end{aligned}$$

つまり、行列の積が dyadic 表現の内積と書けるのである。今、次の積分、

$$\int f(x)g(x)dx \approx \sum f(x_i)g(x_i)\Delta x_i$$

を（連続）無限次元のベクトル、$f(x)$, $g(x)$ の内積、$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g}$ であると解釈すると、

$$g(x) = \int w(x,y)f(y)dy$$

は、演算子、$w(x,y)$ とベクトル、$f(y)$ との内積であると解釈できるのである。

つまり、

$$g(x) = g_x = w_{xy}\cdot f_y = \int w(x,y)f(y)dy$$

たとえば、式(B-6)は、

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-y)f(y)dy = \int \delta_{xy}f(y)dy$$

であるが、これを、

$$f_x = \delta_{xy}\cdot f_y$$

というように、dyadic の内積と見なすことができる。なんでわざわざ、こんな面倒なことをするかというと、それは以下のようなことからである。

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

の解は、明らかで、$G = A^{-1}$（勿論、逆行列が存在すると仮定）とおくと、

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} = G\mathbf{b}$$

となる。一方、「線形」演算子（例えば微分演算子）、L に関する方程式、

$$L\,f(x) = g(x)$$

の解は、形式的に、$f = L^{-1}g$ と書けるが、グリーン関数、G が存在する場合には、

$$f(x) = \int G(x, y) g(y) dy$$

と書ける。これは、dyadic 表現を使えば、それぞれ、

$$\mathbf{x} = G \cdot \mathbf{b}$$

$$f(x) = f_x = G_{xy} \cdot g_y$$

と、dyadic の内積で同じように書けるのである。

（２）inverse matrix

（２－１）前準備

まず、非常に明らかなことを述べておこう。ある行列、B について、

$$B\mathbf{a} = 0 \ , \ \ BV = 0 \tag{B-10}$$

のどちらかの式が、任意のベクトル、$\mathbf{a}$ または任意の行列、V が成り立つとすると、B は、

$$B = 0 \tag{B-11}$$

とゼロ行列になる（証明は超簡単なので略）。

同様に、ある関数、$w(x)$ について、

$$\int w(x) f(x) dx = 0 \tag{B-12}$$

が任意の関数、$f(x)$ について成り立つとすると、$w(x)$ は、

$$w(x) = 0 \tag{B-13}$$

となるであろうということである。

[コメント]

若干、うるさいことを言えば、測度（measure）ゼロの領域を除いて、式(B-13)になるということである。今は、式(B-12)はリーマン積分、またはもっと素朴な積分を想定しており、

その範囲での測度である。たとえば、ある一点を除いてゼロの関数は、式(B-12)を満たすのである。よって、ルベーグ積分の用語を借りて言えば、式(B-13)は、ほとんど至る所で（almost everywhere で）成り立っていると見なすのである。そして、測度ゼロでの違いを無視すると、同じ値を持つ関数は同じであると見なすのである（同一視するのである）。さらに、関数、$w(x)$ に Dirac のデルタ関数（「普通の関数」と見なした時の関数）のような関数が含まれているとしても、同じであることがわかる。また、任意の関数、$f(x)$ に Dirac のデルタ関数を含めて考える場合には、デルタ関数を含む積分は、デルタ関数をあくまでも滑らかな関数、または細長い矩形と近似して積分し、その積分結果の極限である考えると、全く同様に、式(B-13)が成り立つであろう。もっとも現実の物理的空間では、数学的な measure zero の世界はなく、なめらかな空間であり、微小（無限小？）領域で数学的空間を平均化したものが現実の物理的空間であると勝手に考えると（と想定すると）、式(B-13)はすべての点で成り立つとしてよいであろう。

以上の初等的考察から、すべてのベクトル、$\mathbf{a}$ について、

$$X\mathbf{a}=\mathbf{a} \tag{B-14}$$

となる行列は、$X=I$ しかないことがわかる。それは、

$$B=X-I \tag{B-15}$$

とすれば、$B=0$ であることから、直ちにわかる。また、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\, w(x,y) f(y) = f(x) \tag{B-16}$$

となる関数、w は、$w=\delta(x-y)$ しかないことも同様にわかるのである。

（２－２）inverse matrix

さて、次に固有値と固有ベクトルについて、簡単に復習しておこう。ただし、行列及び（微分）演算子は、自己随伴型（エルミート型）であるとする。特に、固有値はゼロではないとしよう（さらには、一応、すべての固有値は正値であるとしておこう。ただし、固有値の「極限」がゼロとなる場合でも、固有値の数密度がゼロとなって、例えば、固有値の逆数×数密度が有限となる場合には、演算子の逆が意味をもつことがある）。このような仮定をおくと、物事が簡単になり、以下の周知の事実が成り立つのである（証明は簡単であるが、単なる復習となるので、やめておくことにする）。

$$M\,\mathbf{v}_n=\lambda_n\mathbf{v}_n\,,\quad \left(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j\right)=\mathbf{v}^*{}_i\cdot\mathbf{v}_j=\delta_{ij} \tag{B-17}$$

ただし、固有ベクトルは正規化されているとしている（詳細な notation の説明は不要であろう）。すると、固有ベクトルを並べた、行列、V は、

$$V=\begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix} \tag{B-18}$$

となる。ここで、各ベクトル、$\mathbf{v}$ は、縦ベクトルであるとしている。すると、

$$V^{*T}\,V=\begin{bmatrix}\mathbf{v}^{*}{}_1^{T} \\ \mathbf{v}^{*}{}_2^{T} \\ \vdots \\ \mathbf{v}^{*}{}_n^{T}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix}=I \tag{B-19}$$

となる。ここで、$\mathbf{v}^T$ は横ベクトルである。そして、

$$V^{*T}=V^{-1},\quad VV^{*T}=I \tag{B-20}$$

等々となる（V はユニタリー行列(unitary matrix)である）。さて、

$$\begin{aligned}M\,V&=M\begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}M\,\mathbf{v}_1 & M\,\mathbf{v}_2 & \cdots & M\,\mathbf{v}_n\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}\lambda_1\mathbf{v}_1 & \lambda_2\mathbf{v}_2 & \cdots & \lambda_n\mathbf{v}_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n\end{bmatrix}\Lambda\end{aligned} \tag{B-21}$$

となる。ここで、Λ は、対角に固有値が並んだ対角行列、

$$\Lambda=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix} \tag{B-22}$$

である。よって、

$$\begin{aligned}M&=V\,\Lambda V^{-1}=V\,\Lambda V^{*T}\\&=\begin{bmatrix}\lambda_1\mathbf{v}_1 & \lambda_2\mathbf{v}_2 & \cdots & \lambda_n\mathbf{v}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{v}^{*}{}_1^{T} \\ \mathbf{v}^{*}{}_2^{T} \\ \vdots \\ \mathbf{v}^{*}{}_n^{T}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{B-23}$$

と（よく知られているように）行列の積に分解される。しかし、この行列の積を、次のような（若干、怪しげに見えるかもしれない）ベクトル的な積で表してみよう。

$$\begin{bmatrix}\lambda_1\mathbf{v}_1 & \lambda_2\mathbf{v}_2 & \cdots & \lambda_n\mathbf{v}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{v}^{*}{}_1 \\ \mathbf{v}^{*}{}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{v}^{*}{}_n\end{bmatrix} \tag{B-24}$$

ここで、各因子は、スカラー的と見なして、その集まりをベクトル的と思うのである。また、

$\mathbf{v}^{*T}$ の transpose の記号は、(各因子を同様にスカラー的と見なして) 外すのである。そして、怪しいままに、式(B-24)の積を実行すると、

$$\tilde{M} = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}^*{}_1 + \lambda_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}^*{}_2 + \cdots + \lambda_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}^*{}_n \tag{B-25}$$

という dyadic 表現が得られることになる。この dyadic 表現がいい加減なものでないことを確認するために、式(B-25)の dyadic とベクトル、 $\mathbf{v}_i$ と内積を取ってみよう。

$$\begin{aligned} \tilde{M} \cdot \mathbf{v}_i &= \left(\lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}^*{}_1 + \lambda_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}^*{}_2 + \cdots + \lambda_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}^*{}_n \right) \cdot \mathbf{v}_i \\ &= \lambda_i \mathbf{v}_i \left(\mathbf{v}^*{}_i \cdot \mathbf{v}_i \right) = \lambda_i \mathbf{v}_i \end{aligned} \tag{B-26}$$

となる。一方、怪しげでない式(B-23)と $\mathbf{v}_i$ の(普通の)積は、当然のことながら、

$$M\,\mathbf{v}_i = \left[\lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \lambda_2 \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \lambda_n \mathbf{v}_n \right] \begin{bmatrix} \mathbf{v}^*{}_1{}^T \\ \mathbf{v}^*{}_2{}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}^*{}_n{}^T \end{bmatrix} \mathbf{v}_i = \left[\lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \lambda_2 \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \lambda_n \mathbf{v}_n \right] \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \cdots i)$$

$$= \lambda_i \mathbf{v}_i$$

となるのである。これから、なぜ dyadic の構成の際に、transpose の記号を外したかがわかるのである(逆に、行列表示で内積をとる場合には、transpose を取らないと意味がないのである)。さて、式(B-23)から、

$$M^{-1} = \left(V \Lambda V^{*T} \right)^{-1} = \left(V^{*T} \right)^{-1} \Lambda^{-1} V^{-1} = V \Lambda^{-1} V^{*T} \tag{B-27}$$

よって、これの dyadic 表現は、

$$\tilde{M}^{-1} = \frac{\mathbf{v}_1 \mathbf{v}^*{}_1}{\lambda_1} + \frac{\mathbf{v}_2 \mathbf{v}^*{}_2}{\lambda_2} + \cdots + \frac{\mathbf{v}_n \mathbf{v}^*{}_n}{\lambda_n} \tag{B-28}$$

となる。たとえば、

$$M\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{B-29}$$

の解、 $\mathbf{x}$ は、

$$\mathbf{x} = M^{-1} \mathbf{b} \tag{B-30}$$

で与えられるが、dyadic 表現では、

$$\mathbf{x} = \tilde{M}^{-1} \cdot \mathbf{b} \tag{B-31}$$

となり、具体的には、

$$\mathbf{x} = \frac{\left(\mathbf{v}^*{}_1 \cdot \mathbf{b}\right)}{\lambda_1}\mathbf{v}_1 + \frac{\left(\mathbf{v}^*{}_2 \cdot \mathbf{b}\right)}{\lambda_2}\mathbf{v}_2 + \cdots + \frac{\left(\mathbf{v}^*{}_n \cdot \mathbf{b}\right)}{\lambda_n}\mathbf{v}_n \tag{B-32}$$

となる。なお、当然ではあるが、

$$\tilde{M} \cdot \mathbf{x} = \sum_i \lambda_i \mathbf{v}_i\, \mathbf{v}^*{}_i \cdot \sum_j \frac{\left(\mathbf{v}^*{}_j \cdot \mathbf{b}\right)}{\lambda_j}\mathbf{v}_j = \sum_i \mathbf{v}_i\left(\mathbf{v}^*{}_j \cdot \mathbf{b}\right) = \mathbf{b} \tag{B-33}$$

ここで、$\mathbf{v}^*{}_i \cdot \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$ と $\mathbf{b}$ の固有ベクトル、$\mathbf{v}_i$ による展開を使っている（ただし、展開したものが、元の $\mathbf{b}$ になることを仮定している）。

（３）グリーン関数

（３－１）Fourier 展開

関数の展開で、もっとも有名なのは、Fourier 級数展開や Fourier 積分公式とか呼ばれるものであろう。ある有限区間（長さ：ℓ、区間を $\left[-\ell/2,\ \ell/2\right]$ と仮定）を周期とする関数、または有限区間で与えれた関数をその区間を周期とするように（無限まで）拡張した関数が、

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(\frac{2\pi i n}{\ell}x\right) \tag{B-34}$$

と展開されたとしよう（$2\pi/\ell$ ：最小の波数ベクトル）。すると、

$$\int_{-\ell/2}^{\ell/2} f(y)\exp\left(-\frac{2\pi i n}{\ell}y\right)dy = \ell c_n$$

となる。よって、

$$f(x) = \frac{1}{\ell}\int_{-\ell/2}^{\ell/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{2\pi i n}{\ell}(x-y)\right) f(y)\,dy \tag{B-35}$$

となる。ここで、

$$k_n = \frac{2\pi}{\ell}n$$

とし、その増分を、$\Delta k = \dfrac{2\pi}{\ell}\Delta n$ と書こう。そして、$\Delta n = 1$ の場合を考えると、式(B-35)は、

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\ell}\int_{-\ell/2}^{\ell/2} \Delta n \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(i k_n (x-y)\right) f(y)\,dy \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\ell/2}^{\ell/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta k \exp\left(i k_n (x-y)\right) f(y)\,dy \end{aligned} \tag{B-36}$$

と書けることがわかる。さらに、ここで、$\ell \to \infty$（つまり有限区間を無限区間）とすると、n に関する和は、積分と見なすことができる。つまり式(B-36)は、

$$f(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(ik\left(x-y\right)\right)dk\ f\left(y\right)dy \tag{B-37}$$

となる。これが Fourier の積分公式と呼ばれるものであった。

ここで、式(B-16)の議論を使うと、式(B-35)及び式(B-37)から、

$$\frac{1}{l}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{2\pi i n}{\ell}\left(x-y\right)\right)=\delta_{\ell}\left(x-y\right) \tag{B-38}$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(ik\left(x-y\right)\right)dk=\delta\left(x-y\right) \tag{B-39}$$

となる（であろう）ことがわかる。ただし、式(B-38)は、区間が有限であるから、式(B-16)はそのまま適用できない（式(B-16)では、「世界」の広さは無限ではなく、有限の区間であると考えると、式(B-38)を導くことができる。そして、外の世界は、この区間の繰り返しであるとすると・・・）。実際、式(B-38)は周期、ℓ をもつ周期デルタ関数である。逆に、右辺が周期デルタ関数だと思って、Fourier 展開すれば、左辺が得られるのである。一方、式(B-39)は、言わずと知れた「忘れてはいけない」有名かつ有用な公式である。例えば、式(B-39)の左辺は、（簡単のために、$z=x-y$ とおいて）以下のように変形して積分すると、

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(ikz\right)dk=\frac{1}{2\pi}\lim_{N\to\infty}\int_{-N}^{N}\exp\left(ikz\right)dk=\lim_{N\to\infty}\frac{\exp\left(iNz\right)-\exp\left(-iNz\right)}{2\pi i z}$$
$$=\lim_{N\to\infty}\frac{\sin Nz}{\pi z}=\delta\left(z\right)$$

(B-40)

となり、式(B-39)の右辺が得られる。ここで、Appendix D にある式を使っている。勿論、右辺を Fourier 展開すれば、（Fourier 係数が 1 であるので）直ちに左辺が得られる。

式(B-38)の左辺は、よく知られている、

$$\begin{aligned}\sum_{n=-N}^{N}\exp\left(i\theta n\right)&=e^{-iN\theta}\left(1+e^{i\theta}+e^{2i\theta}+\cdots+e^{2Ni\theta}\right)\\&=e^{-iN\theta}\frac{e^{(2N+1)i\theta}-1}{e^{i\theta}-1}=\frac{e^{(N+1)i\theta}-e^{-iN\theta}}{e^{i\theta/2}\left(e^{i\theta/2}-e^{-i\theta/2}\right)}=\frac{e^{i\theta/2}}{e^{i\theta/2}}\cdot\frac{2i\sin\left(\left(N+1/2\right)\theta\right)}{2i\sin\left(\theta/2\right)}\\&=\frac{\sin\left(\left(N+1/2\right)\theta\right)}{\sin\left(\theta/2\right)}\end{aligned} \tag{B-41}$$

を使うと、

$$\frac{1}{l}\lim_{N\to\infty}\sum_{n=-N}^{N}\exp\left(i\frac{2\pi z}{\ell}n\right)=\frac{\pi}{l}\lim_{N\to\infty}\frac{\sin\left(\left(N+1/2\right)\frac{\pi z}{\ell}\right)}{\pi\sin\left(\frac{\pi z}{\ell}\right)} \tag{B-42}$$

となることがわかるのであるが、その性質は、元に戻って、式(B-41)の最後の式、

$$f_N(\theta)=\frac{\sin\left(\left(N+1/2\right)\theta\right)}{\sin\left(\theta/2\right)}=\frac{\sin\left(\left(2N+1\right)\theta/2\right)}{\sin\left(\theta/2\right)} \tag{B-43}$$

を調べる方が簡単である。この式は、

$$\frac{\sin\left(\left(2N+1\right)\theta/2\right)}{\sin\left(\theta/2\right)}=\frac{\sin\left(\left(2N+1\right)\theta/2\right)}{\theta/2}\cdot\frac{\theta/2}{\sin\left(\theta/2\right)} \tag{B-44}$$

と変形すると、原点付近では、

$$\approx\frac{\sin\left(\left(2N+1\right)\theta/2\right)}{\theta/2}\cdot\frac{\theta/2}{\theta/2}=2\pi\frac{\sin\left(\left(N+1/2\right)\theta\right)}{\pi\theta}$$

となる。よって、

$$\lim_{N\to\infty}f_N(\theta)=2\pi\,\delta(\theta) \tag{B-45}$$

となるが、実は原点と等価な場所が、$\theta=2\pi n$ にもあることが容易にわかる。これらの点についても、式(B-44)と同様に、

$$\frac{\sin\left(\left(2N+1\right)\theta/2\right)}{\sin\left(\theta/2\right)}=\frac{\sin\left(\left(2N+1\right)\theta/2\right)}{\left(\theta-2\pi n\right)/2}\cdot\frac{\left(\theta-2\pi n\right)/2}{\sin\left(\theta/2\right)} \tag{B-46}$$

と変形すると、$\theta=2\pi n$ 付近では、ロピタルの定理を使って（ただし、最後の因子のみに）

$$\approx\frac{\sin\left(\left(N+1/2\right)\left(\theta-2\pi n+2\pi n\right)\right)}{\left(\theta-2\pi n\right)/2}\cdot\frac{1/2}{1/2\cdot\cos\pi n} \tag{B-47}$$

となる。ここで、

$$\sin\left(\left(N+1/2\right)\left(\theta-2\pi n+2\pi n\right)\right)=\sin\left(\left(N+1/2\right)\left(\theta-2\pi n\right)+2\pi nN+\pi n\right)$$
$$=\left(-1\right)^n\sin\left(\left(N+1/2\right)\left(\theta-2\pi n\right)\right)$$

であるので、式(B-47)は、

$$=2\pi\frac{\sin\left(\left(N+1/2\right)\left(\theta-2\pi n\right)\right)}{\pi\left(\theta-2\pi n\right)}$$

となり、$\theta=2\pi n$ 付近では、

$$\lim_{N\to\infty}f_N(\theta)=2\pi\,\delta(\theta-2\pi n) \tag{B-48}$$

となる。つまり、$\lim\limits_{N\to\infty}f_N(\theta)$ は、周期、2π をもつ周期的 δ 関数であることがわかる。

$$\lim_{N\to\infty} f_N\left(\theta\right)=2\pi\sum_n \delta(\theta-2\pi n) \tag{B-49}$$

これから、式(B-42)は、

$$\begin{aligned}\frac{1}{\ell}\lim_{N\to\infty}\sum_{n=-N}^{N}\exp\left(i\frac{2\pi z}{\ell}n\right)&=\frac{2\pi}{\ell}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(\frac{2\pi z}{\ell}-2\pi n\right)\\&=\frac{2\pi}{\ell}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(\frac{2\pi}{\ell}\left(z-n\ell\right)\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(z-n\ell\right)=\delta_\ell\left(z\right)\end{aligned} \tag{B-50}$$

なお、ここで、$\delta(a\,x)=\delta(|a|x)=\delta(x)/|a|$というよく知られた(簡単に示すことができる)$\delta$関数の性質を使っている。

さて、式(B-38)は、

$$\phi_n\left(x\right)=\frac{1}{\sqrt{\ell}}e^{\frac{2\pi i n}{\ell}x} \tag{B-51}$$

とおくと、

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\phi_n^*\left(y\right)\phi_n\left(x\right)=\delta_\ell\left(x-y\right) \tag{B-52}$$

と書ける。また、規格化積分は、

$$\int_{-\ell/2}^{\ell/2}\phi_m^*\left(x\right)\phi_n\left(x\right)dx=\delta_{mn} \tag{B-53}$$

となる。

一方、式(B-39)は、

$$\phi_k\left(x\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \tag{B-54}$$

とおくと、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_k^*\left(y\right)\phi_k\left(x\right)dk=\delta\left(x-y\right) \tag{B-55}$$

と書ける。また、規格化積分は、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_k^*\left(x\right)\phi_{k'}\left(x\right)dx=\delta\left(k'-k\right) \tag{B-56}$$

となる。これは、式(B-39)で、$x,y\to k',k$, $k\to x$とすれば、得られる。またはδ関数を定義する式(例えば、式(B-40))から直ちに得られる。

(3－2)(固有関数による)展開

より一般に、関数、$f\left(x\right)$が、ある直交関数系で展開できると仮定しよう。ここで、この関数系は、一応、完全(complete)であると仮定するのであるが、完全であるかどうかなど

のむつかしい問題は問わないことにしよう。

可算個の関数系の場合

$$f(x)=\sum_i a_i\phi_i(x) \tag{B-57}$$

と $f(x)$ が展開されたとしよう。この場合、式(B-53)のように、

$$\int\phi_i^*(x)\phi_j(x)dx=\delta_{ij} \tag{B-58}$$

と規格化されているとすると（以下のコメントを参照)、式(B-57)から、

$$a_i=\int\phi_i^*(x)f(x)dx \tag{B-59}$$

と求まり、これを式(B-57)に代入すると、

$$f(x)=\sum_i\int\phi_i^*(y)f(y)dy\,\phi_i(x)=\int\left[\sum_i\phi_i^*(y)\phi_i(x)\right]f(y)dy \tag{B-60}$$

よって、式(B-16)の議論から、

$$\sum_i\phi_i^*(y)\phi_i(x)=\delta(x-y) \tag{B-61}$$

［コメント］

直交系ではあるが、規格化積分が、1 ではなく、

$$\int\phi_i^*(x)\phi_i(x)dx=c$$

となっている場合には、$\phi_i\to\phi_i/\sqrt{c}$ とすれば、規格化できる。しかし、仮に、

$$\int\phi_i^*(x)\phi_i(x)dx=\infty$$

となってしまった場合には、例えば、$f(x)$ が、ある短い区間のみで有限な関数であるとすると、

$$\int\phi_i^*(x)f(x)dx=\text{finite}=a_i\int\left|\phi_i(x)\right|^2dx=a_i\cdot\infty$$

となり、$a_i=0$ でないといけないことになる。よって、式(B-57)から $f(x)=0$ となり、矛盾が生じることとなる。つまり、そもそも、「ある（可算個の）直交関数系で展開できると仮定」したこと自体がマズイのである。

次に、関数がベクトルである場合で、次のように、ある直交系、$\mathbf{v}_i$ で展開できたと仮定しよう。

$$\mathbf{f}(x) = \sum_i a_i \mathbf{v}_i(x) \tag{B-62}$$

として、規格化は、

$$\int \mathbf{v}_i^*(x) \cdot \mathbf{v}_j(x) dx = \delta_{ij} \tag{B-63}$$

となっているとすると、

$$a_i = \int \mathbf{f}(x) \cdot \mathbf{v}_i^*(x) dx \tag{B-64}$$

と求まる。これを式(B-62)に代入して、

$$\mathbf{f}(x) = \int \mathbf{f}(y) \cdot \sum_i \mathbf{v}_i^*(y) \mathbf{v}_i(x) dy \tag{B-65}$$

となるが、スカラー関数の場合と同様に、式(B-65)の右辺は、δ 関数的でないといけないことがわかる。また、ベクトルの積、$\mathbf{v}_i \mathbf{v}_i$ を dyadic 積と考えて、それとの内積をとった時に元の形に戻るためには、その dyadic 積は、単位 dyadic であることがわかる。よって、

$$\sum_i \mathbf{v}_i^*(y) \mathbf{v}_i(x) = \mathbf{I} \delta(y-x) \tag{B-66}$$

となるはずである。実際、これを式(B-65)に代入すると、

$$\int \mathbf{f}(y) \cdot \sum_i \mathbf{v}_i^*(y) \mathbf{v}_i(x) dy = \int \mathbf{f}(y) \cdot \mathbf{I} \delta(y-x) dy = \int \mathbf{f}(y) \delta(y-x) dy = \mathbf{f}(x)$$

となる。

<u>非可算個の関数系の場合</u>

関数、$f(x)$ が次のように直交関数系で展開されたとしよう。

$$f(x) = \int dk' \, a(k') \phi_{k'}(x) \tag{B-67}$$

すると、

$$\int \phi_k^*(x) f(x) dx = \int dk' \, a(k') \int \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx \tag{B-68}$$

ここで、ϕ_k は、直交系であるとしているので、少なくとも、

$$\int \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx = 0 \quad (k' \neq k)$$

であるはずである。今、

$$\int \phi_k^*(x)\phi_k(x)dx = \mathrm{finite}$$

とすると、明らかに、式(B-68)の右辺は、ゼロとなり、係数、$a(k)$が求まらないことになる。よって、上式の右辺は無限大になる必要があるが、適当にϕ_kを係数倍することによって、

$$\int \phi_k^*(x)\phi_{k'}(x)dx = \delta(k-k') \tag{B-69}$$

と規格化されているようにすることができる。すると、式(B-68)から、

$$a(k) = \int \phi_k^*(x) f(x)dx \tag{B-70}$$

となり、これを式(B-67)に代入すると、

$$f(x) = \int \left[\int dk\phi_k^*(y)\phi_k(x)\right] f(y)dy \tag{B-71}$$

と書けることになる。可算個の関数系の場合と同様に、式(B-16)の議論から、

$$\int dk\phi_k^*(y)\phi_k(x) = \delta(y-x) \tag{B-72}$$

となっていることがわかる。ベクトル関数の場合にも、全く同様の議論により、

$$\int dk\, \mathbf{v}_k^*(y)\mathbf{v}_k(x) = \mathbf{I}\,\delta(y-x) \tag{B-73}$$

となる。なお、ベクトル関数の場合には、

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(x) &= \int a(k)\mathbf{v}_k(x)dk \\ a(k) &= \int \mathbf{f}(x)\cdot\mathbf{v}_k^*(x)dx \end{aligned} \tag{B-74}$$

という展開になり、また、ほとんど繰り返しになるが、

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(x) &= \int a(k)\mathbf{v}_k(x)dk = \int dy\,\mathbf{f}(y)\cdot\int \mathbf{v}_k^*(y)\mathbf{v}_k(x)dk \\ &= \int \mathbf{f}(y)\cdot\mathbf{I}\,\delta(y-x)dy = \int \mathbf{f}(y)\delta(y-x)dy = \mathbf{f}(x) \end{aligned} \tag{B-75}$$

となる。

（３－3）グリーン関数の（固有関数による）展開

　最初に、ほとんど繰り返しとなるが、対比のために、行列の場合（エルミート行列で、かつゼロの固有値がない正則な場合）の逆行列と解を書いておこう。

$$M\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{B-76}$$

の解を固有ベクトルの展開で求める。

$$\mathbf{x}=\sum_i x_i \mathbf{v}_i\ ,\quad \mathbf{b}=\sum_i b_i \mathbf{v}_i \tag{B-77}$$

とすると、式(B-76)は、

$$M\sum_i x_i \mathbf{v}_i=\sum_i x_i \lambda_i \mathbf{v}_i=\sum_i b_i \mathbf{v}_i \tag{B-78}$$

となり、これから、

$$x_i=b_i/\lambda_i \tag{B-79}$$

と求まる。よって、

$$\mathbf{x}=\sum_i \frac{b_i}{\lambda_i}\mathbf{v}_i=\sum_i \frac{\left(\mathbf{v}^*{}_i\cdot\mathbf{b}\right)}{\lambda_i}\mathbf{v}_i=\sum_i \frac{\mathbf{v}_i\mathbf{v}^*{}_i}{\lambda_i}\cdot\mathbf{b} \tag{B-80}$$

となる。つまり、

$$\mathbf{x}=\mathbf{G}\cdot\mathbf{b}\ ,\quad \mathbf{G}=\sum_i \frac{\mathbf{v}_i\mathbf{v}^*{}_i}{\lambda_i} \tag{B-81}$$

と書けることになる。勿論、$\mathbf{G}$ は、M の逆行列の dyadic 表現である。

次に、スツルムーリウヴィル型（自己随伴型の）演算子、L をもつベクトル方程式、

$$L\mathbf{f}=\mathbf{g} \tag{B-82}$$

を考えよう。（ここでは省略するが）よく知られているように（これらは、簡単に示すことができるが・・）、演算子、L の固有ベクトルは正規直交系を成し、固有値は実数である。ここでは、さらに、固有値はゼロではないとしよう。また、まずは、固有ベクトルの個数は、可算個であるとしよう。行列の場合と同様に、$\mathbf{f},\mathbf{g}$ を固有ベクトルで、

$$\mathbf{f}=\sum_i f_i \mathbf{v}_i\ ,\quad \mathbf{g}=\sum_i g_i \mathbf{v}_i \tag{B-83}$$

と展開し、これを式(B-82)に代入すると、

$$L\mathbf{f}=L\sum_i f_i \mathbf{v}_i=\sum_i f_i\,\lambda_i \mathbf{v}_i=\sum_i g_i \mathbf{v}_i \tag{B-84}$$

となり、これから、$f_i=g_i/\lambda_i$ と求まる。これから、行列の場合と同様に、

$$\mathbf{f}=\sum_i \frac{g_i}{\lambda_i}\mathbf{v}_i=\sum_i \frac{\left(\mathbf{v}^*{}_i\cdot\mathbf{g}\right)}{\lambda_i}\mathbf{v}_i=\sum_i \frac{\mathbf{v}_i\mathbf{v}^*{}_i}{\lambda_i}\cdot\mathbf{g} \tag{B-85}$$

となる。つまり、

$$\mathbf{f}=\mathbf{G}\cdot\mathbf{g}\ ,\quad \mathbf{G}=\sum_i \frac{\mathbf{v}_i\mathbf{v}^*{}_i}{\lambda_i} \tag{B-86}$$

となり、行列の場合と全く同じ形に書ける。しかし、もう少し、式(B-85)の内積及び引数を丁寧に書くと、

$$\mathbf{f}(x)=\sum_i \frac{\left(\int \mathbf{v}^*{}_i(y)\cdot\mathbf{g}(y)dy\right)}{\lambda_i}\mathbf{v}_i(x)=\int dy\left(\sum_i \frac{\mathbf{v}_i(x)\mathbf{v}^*{}_i(y)}{\lambda_i}\right)\cdot\mathbf{g}(y) \qquad \text{(B-87)}$$

となる。式(B-87)の括弧の式、または式(B-86)で引数を丁寧に書いた、

$$\mathbf{G}(x,y)=\sum_i \frac{\mathbf{v}_i(x)\mathbf{v}^*{}_i(y)}{\lambda_i} \qquad \text{(B-88)}$$

が、通常、グリーン関数（の dyadic 表現）と呼ばれるものである。スカラー方程式、

$$Lf=g \qquad \text{(B-89)}$$

の場合には、固有関数をϕ_iとすれば、

$$f=\int G(x,y)g(y)dy\,,\ G(x,y)=\sum_i \frac{\phi_i(x)\phi_i(y)}{\lambda_i} \qquad \text{(B-90)}$$

となる。また、式(B-90)から、

$$L\,G(x,y)=\sum_i \phi_i(x)\phi_i(y)=\delta(x-y) \qquad \text{(B-91)}$$

となる。逆に言えば、グリーン関数とは、

$$L\,G(x,y)=\delta(x-y) \qquad \text{(B-92)}$$

を満たす関数、演算子を作用させると、δ関数になるものであり、式(B-92)からグリーン関数が求まるのであれば、固有ベクトルの展開は不要である。また、ベクトル方程式の場合には、式(B-88)から、

$$L\,\mathbf{G}(x,y)=\sum_i \mathbf{v}_i(x)\mathbf{v}^*{}_i(y)=\mathbf{I}\,\delta(x-y) \qquad \text{(B-93)}$$

となる（式(B-73)を参照のこと）。

また、固有値が非可算の場合（連続スペクトルの場合）には、$\sum$ 記号を$\int$ に変えればよいのである。例えば、式(B-88)及び式(B-90)の二番目の式は、

$$\mathbf{G}(x,y)=\int dk\,\frac{\mathbf{v}_k(x)\mathbf{v}^*{}_k(y)}{\lambda_k} \qquad \text{(B-94)}$$

$$G(x,y)=\int dk\,\frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\lambda_k} \qquad \text{(B-95)}$$

などとなる。

［コメント］

式(B-94)や(B-95)で、固有値にゼロが含まれていても、dk で積分すれば、有限（つまり、固有値ゼロからの寄与は実質ゼロ）となり、発散しない場合がある。例えば、演算子が、Laplacian の場合で、3 次元の場合には、

$$\lambda_k \propto k^2 \,,\quad dk \to dk_x dk_y dk_z = k^2 dk\, d\Omega$$

となり、

$$\frac{dk}{\lambda_k} \propto dk\, d\Omega$$

となるので、固有値ゼロの寄与は実質ゼロ、無限小であると言える。
