

第5回 直交多項式

理学部 齊藤国靖*

2022年11月9日

正規直交系のベクトルが互いに直交するのと同じように、互いに直交する関数列を定義することができる。これを正規直交関数といい、任意の関数は正規直交関数の線形結合で表すことができる。ベクトルの場合と同様、線形結合の係数は関数の内積で与えられ、これによりベクトルと関数の対応関係はより明確になる。正規直交関数の特別な場合として直交多項式があり、直交多項式を求める方法としてモーメント法がある。後半ではモーメント法を利用して、ルジャンドル多項式やラゲール多項式といった直交多項式を実際に求めてみる。

1 正規直交関数

1.1 関数の内積

2つの関数 $f(x)$, $g(x)$ があるとき、これらの関数の内積を

$$\langle f|g \rangle \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx \quad (1)$$

と定義する。ここで、 $f^*(x)$ は関数 $f(x)$ の複素共役であり、積分範囲は $a \leq x \leq b$ である。一方、**重み関数** $w(x) \geq 0$ を用いて、 $f(x)$ と $g(x)$ の**重み付き内積**を

$$\langle f, g \rangle \equiv \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx \quad (2)$$

と定義する。式(2)も関数の内積として有用であり、以後、目的に応じて使い分けることにする。

1.2 ベクトルの場合

話を進める前に、ベクトルの**正規直交系**を復習しよう。 n 個のベクトル

$$\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \quad (3)$$

の中から任意に選んだ2つのベクトルが

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (4)$$

* k.saitoh@cc.kyoto-su.ac.jp

を満たすとき、式 (3) のベクトルは正規直交系であるという。任意のベクトル \boldsymbol{x} は式 (3) の正規直交系の線形結合として

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^n c_i \boldsymbol{e}_i \quad (5)$$

と展開できる。ここで、展開係数 c_i は式 (5) の両辺と \boldsymbol{e}_i の内積を取ると求めることができ、

$$c_i = \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{x} \quad (6)$$

である。

1.3 関数の場合

関数の内積、式 (1) または (2) を用いれば、ベクトルの正規直交系と同様の計算ができる。まず、無限個の関数列

$$\phi_1(x), \dots, \phi_n(x), \dots \quad (7)$$

が与えられたとき、これらの中から任意に選んだ2つの関数が

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \int_a^b \phi_i^*(x) \phi_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (8)$$

を満たすとき、式 (7) の関数列は**正規直交関数**であるという。ここで、式 (7) と (8) はそれぞれベクトルの場合の式 (3) と (4) に対応する。

次に、任意の関数 $f(x)$ を式 (7) の正規直交関数の線形結合で展開すると、

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \phi_i(x) \quad (9)$$

となる。これはベクトルの場合の式 (5) に対応するもので、展開係数 c_i は式 (6) と同様、

$$c_i = \langle \phi_i | f \rangle = \int_a^b \phi_i^*(x) f(x) dx \quad (10)$$

で与えられる。式 (10) を導出するには、式 (9) の両辺と関数 $\phi_i(x)$ の内積を取り、正規直交条件である式 (8) を使えばよい。

2 直交多項式

2.1 グラム-シュミットの方法

正規直交ではない互いに独立な n 個のベクトル $\{\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n\}$ から正規直交系を作る方法に**グラム-シュミットの方法**がある。まず、最初のベクトルを用いて、

$$\boldsymbol{e}_1 \equiv \frac{\boldsymbol{a}_1}{|\boldsymbol{a}_1|} \quad (11)$$

とする。次に,

$$\mathbf{e}'_2 \equiv \mathbf{a}_2 - \mu_1 \mathbf{e}_1$$

として, \mathbf{e}_1 と \mathbf{e}'_2 が直交する様に μ_1 を決めると,

$$\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}'_2 = 0, \quad \therefore \mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 - \mu_1 \mathbf{e}_1) = 0, \quad \therefore \mu_1 = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{a}_2$$

となる。よって,

$$\mathbf{e}'_2 \equiv \mathbf{a}_2 - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{e}_1$$

であり, \mathbf{e}'_2 を規格化して,

$$\mathbf{e}_2 \equiv \frac{\mathbf{e}'_2}{|\mathbf{e}'_2|} \quad (12)$$

とする。また,

$$\mathbf{e}'_3 \equiv \mathbf{a}_3 - \lambda_1 \mathbf{e}_1 - \lambda_2 \mathbf{e}_2$$

として, \mathbf{e}'_3 と \mathbf{e}_1 および \mathbf{e}_2 が直交する様に λ_1 と λ_2 を決めると,

$$\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}'_3 = 0, \quad \therefore \mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{a}_3 - \lambda_1 \mathbf{e}_1 - \lambda_2 \mathbf{e}_2) = 0, \quad \therefore \lambda_1 = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}'_3 = 0, \quad \therefore \mathbf{e}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 - \lambda_1 \mathbf{e}_1 - \lambda_2 \mathbf{e}_2) = 0, \quad \therefore \lambda_2 = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{a}_3$$

となる。よって,

$$\mathbf{e}'_3 = \mathbf{a}_3 - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{a}_3) \mathbf{e}_1 - (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{a}_3) \mathbf{e}_2$$

である。以下同様に, n 番目のベクトルを

$$\mathbf{e}'_n \equiv \mathbf{a}_n - \sum_{i=1}^{n-1} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{a}_n) \mathbf{e}_i \quad (13)$$

とすれば, これを規格化して

$$\mathbf{e}_n \equiv \frac{\mathbf{e}'_n}{|\mathbf{e}'_n|} \quad (14)$$

を得る。従って, 式 (11), (12), (14) の順に正規直交系 $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ を作ることができる。

2.2 直交多項式

ベクトルの場合のグラム-シュミットの方法は内積さえ定義できればどんなものにも応用できる。従って, 互いに独立な関数列から正規直交関数を作ることにもできる。例えば, n 次多項式

$$f(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n \quad (15)$$

を考えると, 右辺は $n+1$ 個の関数列 $\{1, x, \dots, x^n\}$ の線形結合とみなせる。 x のべき乗は互いに独立な関数であるから, グラム-シュミットの方法を応用して正規直交関数 $\{\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n\}$ を作るすることができる。

式 (13) を参考にすれば、 i 番目の関数 ϕ_i は i 次多項式であり、係数を b_k として

$$\phi_i(x) = \sum_{k=0}^i b_k x^k \quad (16)$$

と書ける。ここで、右辺の和は $k = 0$ から i までである点に注意。また、式 (16) は特に直交多項式と呼ばれるものであり、重み付き内積による正規直交条件

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (17)$$

を満たすものとする。

2.3 モーメント法

具体的に x のべき乗の関数列 $\{1, x, \dots, x^n\}$ から直交多項式 $\{\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n\}$ を作る手順を説明する。まず、正規直交関数は任意の関数を展開できるから、 x^j を直交多項式で展開して、

$$x^j = \sum_{k=0}^j c_k \phi_k(x) \quad (18)$$

とする。ここで、 c_k は展開係数であり、 x^j は j 次多項式なので、右辺の和は $k = 0$ から j まででよい。 $j < i$ として、式 (18) と $\phi_i(x)$ の重み付き内積を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle x^j, \phi_i \rangle &= \sum_{k=0}^j c_k \langle \phi_k, \phi_i \rangle \\ &= 0, \quad (\because k < i) \end{aligned} \quad (19)$$

となる。但し、式 (17) の正規直交条件を用いた。よって、式 (19) の ϕ_i に式 (16) を代入すると、

$$\sum_{k=0}^i \langle x^j, x^k \rangle b_k = 0 \quad (20)$$

となる。

ここで、重み関数 $w(x)$ の l 次モーメント

$$\mu_l \equiv \int_a^b x^l w(x) dx \quad (21)$$

を導入すると、式 (20) の左辺の内積は

$$\langle x^j, x^k \rangle = \int_a^b x^j x^k w(x) dx = \int_a^b x^{j+k} w(x) dx = \mu_{j+k} \quad (22)$$

と書ける。よって、式 (20) は

$$\sum_{k=0}^i \mu_{j+k} b_k = 0 \quad (23)$$

であり, $k = i$ の項だけ右辺に移項すると,

$$\sum_{k=0}^{i-1} \mu_{j+k} b_k = -\mu_{j+i} b_i \quad (24)$$

となる.

式 (24) の添え字 j は $j < i$ なので, $j = 0$ から $i - 1$ まで具体的に書き出してみると,

$$\begin{aligned} \mu_{0+0} b_0 + \mu_{0+1} b_1 + \cdots + \mu_{0+i-1} b_{i-1} &= -\mu_{0+i} b_i \\ \mu_{1+0} b_0 + \mu_{1+1} b_1 + \cdots + \mu_{1+i-1} b_{i-1} &= -\mu_{1+i} b_i \\ &\vdots \\ \mu_{i-1+0} b_0 + \mu_{i-1+1} b_1 + \cdots + \mu_{i-1+i-1} b_{i-1} &= -\mu_{i-1+i} b_i \end{aligned}$$

となる. これを行列の掛け算で表せば,

$$\begin{pmatrix} \mu_{0+0} & \mu_{0+1} & \cdots & \mu_{0+i-1} \\ \mu_{1+0} & \mu_{1+1} & \cdots & \mu_{1+i-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{i-1+0} & \mu_{i-1+1} & \cdots & \mu_{i-1+i-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{i-1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mu_{0+i} \\ \mu_{1+i} \\ \vdots \\ \mu_{i-1+i} \end{pmatrix} b_i \quad (25)$$

となる. 両辺を b_i で割って, b_k/b_i ($k = 0, \dots, i - 1$) を改めて b_k と書けば, 式 (25) は

$$\mathcal{M} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{i-1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mu_{0+i} \\ \mu_{1+i} \\ \vdots \\ \mu_{i-1+i} \end{pmatrix} \quad (26)$$

となる. ここで,

$$\mathcal{M} \equiv \begin{pmatrix} \mu_{0+0} & \mu_{0+1} & \cdots & \mu_{0+i-1} \\ \mu_{1+0} & \mu_{1+1} & \cdots & \mu_{1+i-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{i-1+0} & \mu_{i-1+1} & \cdots & \mu_{i-1+i-1} \end{pmatrix} \quad (27)$$

のことをモーメント行列という. 従って, 全てのモーメント μ_l を計算すれば, 式 (26) より係数 b_k ($k = 0, \dots, i - 1$) が求まり, 直交多項式 (16) が求められる.

3 直交多項式の例

モーメント法を用いて, 実際に直交多項式を求める. そのために, l 次モーメントに含まれる重み関数 $w(x)$ と積分区間 $a \leq x \leq b$ を指定しなければならない. 以下, 重み関数と積分区間を具体的に与えて, 直交多項式をいくつか計算してみよう.

3.1 ルジャンドル多項式

式 (21) において, 重み関数を $w(x) = 1$, 積分区間を $-1 \leq x \leq 1$ とすると, l 次モーメントは

$$\mu_l = \int_{-1}^1 x^l dx \quad (28)$$

となる.

まず, 式 (16) と (26) で $i = 1$ とすると,

$$\phi_1(x) = x + b_0 \quad (29)$$

$$\mu_0 b_0 = -\mu_1 \quad (30)$$

となる (x の最高次数の係数を 1 にしている点に注意). 式 (28) によると, $\mu_0 = 2, \mu_1 = 0$ と計算できるので, 式 (30) より,

$$\therefore b_0 = 0$$

となる. つまり,

$$\phi_1(x) = x$$

が最初の直交多項式である.

次に, 式 (16) と (26) で $i = 2$ とすると,

$$\phi_2(x) = x^2 + b_1 x + b_0 \quad (31)$$

$$\begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 \\ \mu_1 & \mu_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} \quad (32)$$

となる (x の最高次数の係数を 1 にしている点に注意). 式 (28) によると, $\mu_2 = 2/3, \mu_3 = 0$ と計算できるので, 式 (32) より,

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 2/3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\therefore b_0 = -\frac{1}{3}, \quad b_1 = 0$$

となる. つまり,

$$\phi_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

が 2 番目の直交多項式である.

以下, $i = 3$ 以降の直交多項式も同様に求められ, 得られる正規直交関数 $\{\phi_1(x), \phi_2(x), \dots\}$ をルジャンドル多項式という.

3.2 ラゲール多項式

式 (21) において, 重み関数を $w(x) = e^{-x}$, 積分区間を $0 \leq x < \infty$ とすると, l 次モーメントは

$$\mu_l = \int_0^{\infty} x^l e^{-x} dx \quad (33)$$

となる. これはガンマ関数の定義を使うと,

$$\mu_l = \Gamma(l+1) = l! \quad (34)$$

となる点に注意しよう.

先程と同様に, 式 (16) と (26) で $i = 1$ とすると,

$$\phi_1(x) = x + b_0 \quad (35)$$

$$\mu_0 b_0 = -\mu_1 \quad (36)$$

となる. 式 (34) によると, $\mu_0 = 1, \mu_1 = 1$ なので, 式 (36) より,

$$\therefore b_0 = -1$$

となる. つまり,

$$\phi_1(x) = x - 1$$

が得られる. また, 式 (16) と (26) で $i = 2$ とすると,

$$\phi_2(x) = x^2 + b_1 x + b_0 \quad (37)$$

$$\begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 \\ \mu_1 & \mu_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} \quad (38)$$

となり, 式 (34) によると, $\mu_2 = 2, \mu_3 = 6$ なので, 式 (38) より,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$$\therefore b_0 = 2, \quad b_1 = -4$$

となる. つまり,

$$\phi_2(x) = x^2 - 4x + 2$$

が得られる. 以下, $i = 3$ 以降も同様に求められ, 得られる直交多項式 $\{\phi_1(x), \phi_2(x), \dots\}$ をラゲール多項式という.