

京都大学工学部工業化学科

創成化学コース

化学数学

— 創成化学者のための応用数学 —

瀧川 敏算

京都大学 大学院工学研究科 材料化学専攻

吉崎 武尚

京都大学 大学院工学研究科 高分子化学専攻



まえがき

工業化学科の履修要覧に挙がっている全学共通科目の数学は「自然現象と数学」, 「微分積分学 A・B」, 「線形代数学 A・B」, 「微分積分学続論 A・B」である。「自然現象と数学」は工業化学科においても数学が必要であることを分かってもらい, 他の数学講義に向けた動機付けを目的としている。本当の意味での数学講義である「微分積分学 A・B」では一変数および多変数関数の微分・積分の, また「線形代数学 A・B」では多次元空間の線形写像の理解と演習を目的としている。多くの皆さんはそれで十分と考え, 「微分積分学続論 A・B」を履修した方は少数だと思われるが, そこではベクトル解析と常微分方程式について学ぶことになっている。

何れにせよ「もう数学は十分」と辟易しているのではないだろうか。しかし「自然現象と数学」でも触れられたように, 工業化学科で対象とする現象の多くは偏微分方程式の形で記述され, その解を考察するのに Fourier 変換, Laplace 変換が必要となる。さらに, それらの変換を理解するのに複素関数論が必要となる。かつて工学部には, それらの習得を目的とする「工業数学」という共通講義があったが, 工学部の組織再編後は工業化学科で独自に講義を行うことになった。創成化学コースでは, 物理化学関連講義の中にそれらを含めることを試みたが, やはり独立した講義が望ましいということで本講義を開講することになった。内容は大学の工学系において広く「応用数学」と呼ばれているものである。前半 6 回では瀧川が複素関数論を, 続く後半 6 回では吉崎が Fourier・Laplace 変換を担当する。普通は半期 2 回分ぐらいの講義時間が必要なのだが, 他の講義との関係で半期 1 回分に圧縮せざるを得ない。そのため, 内容は最低限必要な基本事項に絞られている。物足りなく感じたら, 読めそうな適当な本を見付け, 積極的に自学自習して欲しい。

瀧川 敏算・吉崎 武尚

目 次

1	複素数の基礎	1
1.1	複素数の定義	1
1.2	複素数の四則演算	1
1.3	複素平面と極座標	1
1.4	複素数を用いた物理現象の表記	2
2	複素関数の微分	5
2.1	導関数	5
2.2	正則関数	5
3	初等関数	9
3.1	べき関数 I	9
3.2	有理関数	9
3.3	指数関数	9
3.4	三角関数	9
3.5	双曲線関数	10
3.6	対数関数	10
3.7	べき関数 II	10
4	複素関数の積分	13
5	関数の展開	16
6	留数定理と実積分への応用	18
7	熱方程式と Fourier 級数	22
7.1	熱方程式	22
7.2	三角関数を用いた偏微分方程式 (7.6) の解法	23
7.3	他の線形偏微分方程式の例 — 波動方程式	24
8	Fourier 級数	26
8.1	複素指数関数を用いた Fourier 級数の表記	26
8.2	Fourier 級数展開定理	26
8.3	直交関数系	28
9	Fourier 変換	30
9.1	Fourier の積分定理	30
9.2	Fourier 変換	31
9.3	Fourier 変換の計算例	32
10	物理化学と Fourier 変換	34
10.1	核磁気共鳴 (NMR)	34
10.2	電磁波の散乱	35
10.3	透過率からの 2 次元像構成 — Radon 変換	37

11 Laplace 変換	39
11.1 Laplace 変換の定義	39
11.2 Laplace 変換の性質	40
11.3 Laplace 変換の計算例	41
12 Fourier 変換と Laplace 変換の応用	43
12.1 熱方程式	43
12.1.1 熱方程式の基本解	43
12.1.2 解法 1	43
12.1.3 解法 2	44
12.1.4 解法 3	44
12.2 波動方程式	45
A 多変数関数の偏微分と全微分	46
B Dirac の δ 関数	47
C Wiener–Khinchin の定理	48

1 複素数の基礎

1.1 複素数の定義

a と b を実数, i を虚数単位 ($i^2 = -1$) とすると, 複素数 z は一般に次のように書ける.

$$z = a + ib \quad (1.1)$$

z の実数部と虚数部をそれぞれ $\operatorname{Re} z$, $\operatorname{Im} z$ と表す. すなわち, $\operatorname{Re} z = a$, $\operatorname{Im} z = b$ であり, $z = \operatorname{Re} z + i \operatorname{Im} z$ である. z の共役複素数 (通常 \bar{z} と記す) は

$$\bar{z} = a - ib \quad (1.2)$$

である. 複素数 z の絶対値を $|z|$ で表し, 以下の式で $|z|$ を定義すると,

$$|z| = \sqrt{a^2 + b^2} \quad (1.3)$$

\bar{z} の絶対値も z の絶対値に等しくなることがわかる. すなわち,

$$|\bar{z}| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

である.

1.2 複素数の四則演算

二つの複素数 z_1 と z_2 を実数 a_i と b_i ($i = 1, 2$) を用いて以下のように書く.

$$z_1 = a_1 + ib_1$$

$$z_2 = a_2 + ib_2$$

複素数の加法と減法をそれぞれ次のように定義する.

$$z_1 + z_2 \equiv (a_1 + a_2) + i(b_1 + b_2) \quad (1.4)$$

$$z_1 - z_2 \equiv (a_1 - a_2) + i(b_1 - b_2) \quad (1.5)$$

次の (三角) 不等式はよく使われる.

$$||z_1| - |z_2|| \leq |z_1 + z_2| \leq |z_1| + |z_2| \quad (1.6)$$

乗法と除法はそれぞれ次のように定義する.

$$z_1 z_2 = (a_1 a_2 - b_1 b_2) + i(a_1 b_2 + a_2 b_1) \quad (1.7)$$

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{a_1 a_2 + b_1 b_2}{a_2^2 + b_2^2} + i \frac{a_2 b_1 - a_1 b_2}{a_2^2 + b_2^2} \quad (1.8)$$

1.3 複素平面と極座標

複素数 z が $z = x + iy$ で与えられている場合, z は Oxy 平面上の点 (x, y) と 1 対 1 の対応関係がつけられる. この平面を複素平面 (または Gauss 平面), Ox を実軸 (実数軸), Oy を虚軸 (虚数軸) という. 図 1.1 をみればわかるように, z はベクトル \vec{OP} と考えることもできる. 複素数をベクトルとみなすと, 複素数の加法, 減法の幾何学的な意味は直感的に理解しやすくなる.

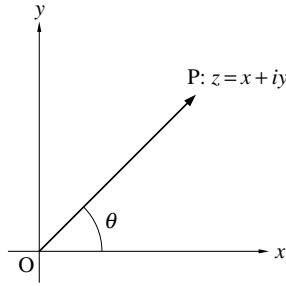


図 1.1 複素平面上的の複素数 z

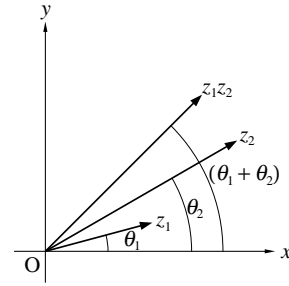


図 1.2 複素数の積の幾何学的な意味

複素数の乗法、除法の幾何学的な意味を考えるとときには、複素数の極座標表示が有効になる。複素数 z は極座標では、

$$z = r(\cos \theta + i \sin \theta) \quad (1.9)$$

と表される。 r は z の絶対値 ($r = |z|$) であり、 θ は z の偏角である。偏角については、 $\theta = \arg z$ と記す。 z^n (n : 整数) は、

$$z^n = r^n(\cos \theta + i \sin \theta)^n = r^n(\cos n\theta + i \sin n\theta) \quad (1.10)$$

となる。また、Euler の公式を用いて式 (1.9) 右辺の三角関数の部分は次のように表せる。

$$\cos \theta + i \sin \theta = e^{i\theta} \quad (1.11)$$

これを用いると z の極座標表示は次のように書ける。

$$z = re^{i\theta} \quad (1.12)$$

ある複素数に $e^{i\theta}$ をかけるとその複素数は反時計回りに角度 θ だけ回転する。二つの複素数 z_1 と z_2 をそれぞれ、 $z_1 = r_1 e^{i\theta_1}$ および $z_2 = r_2 e^{i\theta_2}$ とすると、積 $z_1 z_2$ は

$$z_1 z_2 = r_1 r_2 e^{i\theta_1} e^{i\theta_2} = r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}$$

となる。上の積を z_2 に z_1 をかける操作とみなすと（逆でもかまわないが）、それは z_2 の絶対値を r_1 倍引き延ばし、その後 z_2 を反時計回り θ_1 だけ回転させることに対応する（図 1.2）。もちろん、引き伸ばしと回転操作の順番は逆でもかまわない。

1.4 複素数を用いた物理現象の表記

複素数を使うといろいろな計算が簡単になる。特に、周期的に変化する刺激に対する応答を考えるときには複素数は有効である。ここでは交流電気回路の問題を例にとり説明する。図 1.3 のように抵抗 (R) とコイル (リアクタンス L) が直列につながった回路に周期的に変化する電圧を印加した場合の電流を計算する。

回路に印加する電圧 $V(t)$ を、振幅 V_0 、角周波数 ω 、時間 t を用い

$$V(t) = V_0 \sin \omega t$$

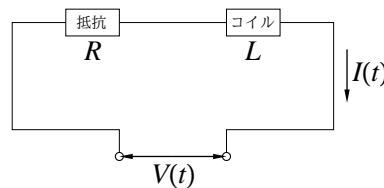


図 1.3 抵抗とコイルが直列につながった回路

とすると、回路を流れる電流 $I(t)$ は、オームの法則（式 (1.13)）から求めることができる。

$$\begin{aligned} RI(t) + L \frac{dI(t)}{dt} &= V(t) \\ &= V_0 \sin \omega t \end{aligned} \quad (1.13)$$

左辺の第 1 項は抵抗の両端にかかる電圧、第 2 項はコイルの両端にかかる電圧であり、これらの和が全体の電圧 $V(t)$ に等しくなるということを上の式は意味している。上の式の解（厳密には定常解とよばれる特殊解）を得るためには、通常は I を

$$I(t) = I_1 \sin \omega t + I_2 \cos \omega t$$

のように仮定して計算を進めて定数 I_1 と定数 I_2 を定めるという方法がとられる。しかし、この計算は非常に煩雑になる。

電気工学の分野では、電圧や電流を複素数で表す（一般には交流ベクトルとよばれている）ことにより上記のような計算を容易に行う方法が古くからとられている。上の例では、電圧 $V(t)$ を複素数を用い

$$V(t) = V_0 e^{i\omega t} \quad (1.14)$$

と表す。電流 $I(t)$ についても

$$I(t) = I_0 e^{i\omega t} \quad (1.15)$$

と仮定するが、定数 I_0 は複素数とする。これらの複素電圧 $V(t)$ と複素電流 $I(t)$ は、

$$\begin{aligned} RI(t) + L \frac{dI(t)}{dt} &= V(t) \\ &= V_0 e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (1.16)$$

を満たすものとして定数 I_0 を決める。式 (1.14) と (1.15) を式 (1.16) に代入して I_0 を求めると、

$$I_0 = \frac{V_0}{R + i\omega L} = \frac{V_0(R - i\omega L)}{R^2 + \omega^2 L^2}$$

なので、複素電流 I は

$$I(t) = \frac{V_0(R - i\omega L)}{R^2 + \omega^2 L^2} e^{i\omega t} \quad (1.17)$$

となる。電流の絶対値、回路の（複素）インピーダンス (Z)、電流と電圧の間の位相差 (δ) などは、複素電流と複素電圧から直接決定することができるので、交流ベクトルという概念は非常に有用である。 $V = V_0 \sin \omega t$ に対する電流応答が必要な場合には、まず複素電流を求めてその虚数部分をとればよい。これは、式 (1.16) の実数部分と虚数部分がそれぞれ

$$\begin{aligned} \left(R + L \frac{d}{dt}\right) \operatorname{Re}(I(t)) &= \operatorname{Re}(V_0 e^{i\omega t}) = V_0 \cos \omega t \\ \left(R + L \frac{d}{dt}\right) \operatorname{Im}(I(t)) &= \operatorname{Im}(V_0 e^{i\omega t}) = V_0 \sin \omega t \end{aligned} \quad (1.18)$$

を満足していることから明らかであろう。

例題 1.1

上で示した例について複素電圧と複素電流の位相差、回路のインピーダンスを求めよ。

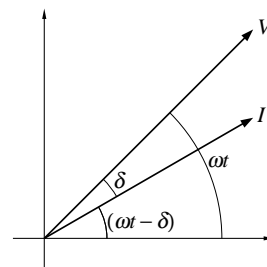
（解）時間 t での複素電圧と複素電流を複素平面に描くと右図のようになる。

電圧と電流の位相差 δ (≥ 0) の正接 ($\tan \delta$) は

$$\tan \delta = \frac{\omega L}{R}$$

であり、電圧の方が δ だけ進んでいる。 Z は次のようになる。

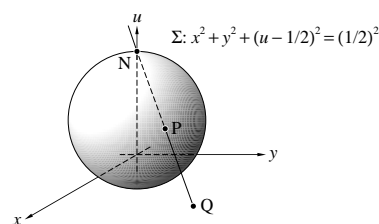
$$Z = \frac{V}{I} = R + i\omega L$$



補足

1. 無限遠点

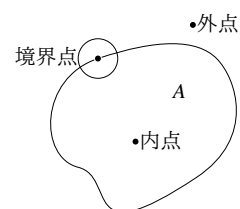
右のような球面 (Σ : リーマン球面または複素球面) とそれに接する xy -平面 (複素平面) との対応関係を考える. 球面の北極 (N) とそれ以外の点 P を通る直線は xy -平面とただ 1 点 (Q) で交わる. N 以外の球面上の点と xy -平面上の点には 1 対 1 の対応関係がある. N に対しては対応する xy -平面上の点がないので, N に対応する仮想的な点を導入する. この点を無限遠点とよび ∞ で表す. 複素平面は $|z| < \infty$ で表し, 平面 $|z| < \infty$ に無限遠点 $z = \infty$ を加えたものを $|z| \leq \infty$ で表し, 拡張された複素平面とよぶ.



関数 $f(z)$ の $z = \infty$ での性質とは, $\zeta = 1/z$ として, $g(\zeta) = f(1/\zeta)$ で定義した関数 $g(\zeta)$ の $\zeta = 0$ での性質のことである.

2. 点集合

点 z_0 に対して, $|z - z_0| < \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$) を満たす点 z の集合を z_0 の ε -近傍 (単に近傍という場合もある) という. 1 つの集合を A とする. 点 z_0 のどのような近傍も A の点に無数に含むとき, z_0 を A の集積点という. A の集積点の集合と A の和集合を A の閉包といい \bar{A} で表す. $A = \bar{A}$ なら A を閉集合という. 点 z_0 の近傍が集合 A に含まれるとき, z_0 を A の内点といい, 内点の集合を A の内部とよぶ. 内点のみからなる集合を開集合という. z_0 のどのような近傍も A の点と A 以外の点を含む場合, z_0 を境界点という. A の境界点の集合を ∂A で表し, A の境界とよぶ. ある点の近傍が A の点を全く含まなければその点を外点という. 開集合 A の任意の 2 点 ($z = \infty$ は除く) を折れ線で結ぶことができれば A を領域という. A が有界であるとは, A 内のどのような点 z に対しても, $|z| \leq K$ となる定数 K が存在することである.



練習問題

- (1) $z^4 = 1$ の解を求めよ.
- (2) ある行列 \mathbf{A} の各成分をその共役複素数で置き換えた行列を \mathbf{A} の共役行列といい $\bar{\mathbf{A}}$ で表す. $\bar{\mathbf{A}}$ の行と列を入れ替えた行列を \mathbf{A} の共役転置行列とよび \mathbf{A}^* で表す. $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$ が成り立つような行列を Hermite 行列といい, $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}^{-1}$ が成り立つような行列をユニタリ行列という. \mathbf{P} と \mathbf{Q} が

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1+i \\ 1-i & 2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

のとき, \mathbf{P} は Hermite 行列, \mathbf{Q} はユニタリ行列であることを示せ.

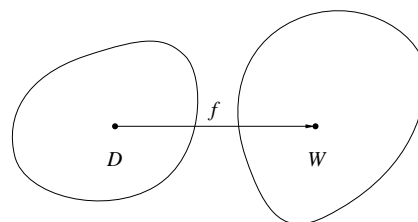
- (3) ユニタリ行列の行列式の絶対値は 1 となることを示せ.
- (4) 抵抗 (抵抗の値 R), コイル (リアクタンス L) およびコンデンサ (キャパシタンス C) が直列につながった回路がある. この回路に角周波数 ω の交流電圧を印加するとき, インピーダンス (Z) はいくらになるか.
- (5) t についての以下の微分方程式の定常解 ($t \gg 0$ のときの解) を求めよ. ただし, ω は定数である.

$$\frac{dy(t)}{dt} + y(t) = \cos \omega t$$

2 複素関数の微分

2.1 導関数

複素平面 (z -平面) 上のある領域内の点を別の複素平面 (w -平面) 上の点に写す写像 f を (複素) 関数といい, $w = f(z)$ と書く. (複素) 関数論では, 定義域は z -平面上の領域 D , 値域は w -平面上の領域 W で表されることが多い (右図). 定義域 D に属する z_0 に対し, z をどのように z_0 に近づけても, $\lim_{z \rightarrow z_0} f(z) = f(z_0)$ が成り立つとき, $f(z)$ は z_0 で連続であるという. $f(z)$ が D 内のすべての点で連続なら, $f(z)$ は D で連続であるという.



$f(z)$ は D で定義された関数とする. このとき, D 内の点 z_0 で次式

$$\lim_{z \rightarrow z_0} \frac{f(z) - f(z_0)}{z - z_0} \quad (2.1)$$

がどのような経路で $z \rightarrow z_0$ としても同じ (有限の) 極限值をとるとき, $f(z)$ は z_0 で微分可能であるといい, その極限値を z_0 での f の導関数という. 関数が z_0 以外の点でも微分可能なら, 導関数は z の関数となる. この場合, 導関数は $f'(z)$, $df(z)/dz$, w' , dw/dz などと表記される. $f(z)$ が z_0 の近傍で微分可能なら, $f(z)$ は z_0 で正則であるという.

例題 2.1 次の関数の微分可能性を調べよ.

(1) $f(z) = z^n$ ($|z| < \infty$, n は 1 以上の整数)

(解) h を任意の複素数として以下の極限値 P を考えると

$$P = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(z+h) - f(z)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(z^n + nz^{n-1}h + \cdots + h^n) - z^n}{h} = nz^{n-1}$$

P は h に依存しないので, この関数はいたるところで微分可能である.

(2) $f(z) = \bar{z}$ ($|z| < \infty$)

(解) (1) と同様に, h を任意の複素数として以下の極限値を考える.

$$P = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(z+h) - f(z)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\overline{(z+h)} - \bar{z}}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\bar{h}}{h}$$

となるので, $h = h_x + ih_y$ とおき上式を書き換えると,

$$P = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{h_x - ih_y}{h_x + ih_y}$$

となる. $h_x = 0$ として $h_y \rightarrow 0$ とすると, $P = -1$ となるが, $h_y = 0$ として $h_x \rightarrow 0$ とすると, $P = 1$ となる. P が経路によって変わるので微分不可能である.

2.2 正則関数

関数 $f(z)$ を $f(z) = f(x + iy) = u(x, y) + iv(x, y)$ とおく. このとき, $u(x, y)$ および $v(x, y)$ が全微分可能で, $z_0 = a + ib$ で

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.2)$$

を満たしていれば, $f(z)$ は z_0 で微分可能である. また, 逆も成り立つ. これは, 以下の議論から容易に理解できるであろう.

$z = x + ib$ とおき, $x \rightarrow a$ とすると

$$\frac{df}{dz} = \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.3a)$$

である. 次に $z = a + iy$ とおき, $y \rightarrow b$ とすると

$$\frac{df}{dz} = \frac{\partial f}{\partial(iy)} = \frac{1}{i} \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{1}{i} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + i \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -i \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.3b)$$

である. f は微分可能なので, 式 (2.3a) と式 (2.3b) の実数部分および虚数部分は互いに等しくなければならない. これから式 (2.2) が導かれる. 式 (2.2) を Cauchy–Riemann の関係式という.

z の領域 D のいたるところで $f(z)$ が微分可能なら, $f(z)$ は D で正則であるという. 二つの関数 $f(z)$, $g(z)$ がともに D で正則なら, $f(z) \pm g(z)$, $f(z)g(z)$ は D で正則であり, $f(z)/g(z)$ は $g(z) = 0$ をみたす z 以外の D で正則となる. 複素平面上のいたるところ ($|z| < \infty$) で正則な関数を整関数という. 関数 $w = f(z)$ が D で正則, $\zeta = g(w)$ が D の像 $f(D) = \{f(z)|z \in D\}$ を含む領域 W で正則なら, 合成関数 $\zeta = g(f(z))$ は D で正則で, 次の関係が成り立つ.

$$\frac{d\zeta}{dz} = \frac{d\zeta}{dw} \frac{dw}{dz} \quad (2.4)$$

例題 2.2 次の関数の微分可能性と正則性を調べよ. ただし, $z = x + iy$ である.

(1) $f(z) = x^2 - y^2 - 2x + 2i(x-1)y$

(解) $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ とすると, $u = x^2 - y^2 - 2x$, $v = 2(x-1)y$ であるので,

$$u_x \equiv \frac{\partial u}{\partial x} = 2x - 2, \quad u_y \equiv \frac{\partial u}{\partial y} = -2y, \quad v_x \equiv \frac{\partial v}{\partial x} = 2y, \quad v_y \equiv \frac{\partial v}{\partial y} = 2(x-1)$$

となる. これから, いたるところで $u_x = v_y$, $u_y = -v_x$ が成り立っていることがわかる. すなわち, いたるところで微分可能で正則である.

(2) $f(z) = x^2 + y^2 - 2ixy$

(解) 前問と同様に計算すると, $u_x = 2x$, $u_y = 2y$, $v_x = -2y$, $v_y = -2x$ となる. Cauchy–Riemann の関係式を書くと, $2x = -2x$, $2y = 2y$ となるが, これが成り立つためには $x = 0$ でなければならない. つまり, 虚数軸上では微分可能である (それ以外の点では微分不可能). しかし, どの点でも正則にはならない.

(3) $f(z) = \operatorname{Re}(2z)$

(解) この場合は, $u(x, y) = 2x$, $v(x, y) = 0$ なので, $u_x = 2$, $u_y = 0$, $v_x = 0$, $v_y = 0$ となり, いたるところで微分不可能で正則でない.

例題 2.3 関数 $\zeta = w^2$, $w = 2z + 1$ を z で微分せよ.

(解) 次のようになる.

$$\frac{d\zeta}{dz} = \frac{d\zeta}{dw} \frac{dw}{dz} = 2w \times 2 = 4(2z + 1)$$

補足

1. 数列, 級数の収束

C を複素数全体とする. 複素数列 $\{z_n\}$ に対し,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |z_n - z| = 0$$

を満たす $z \in C$ が存在するとき, $\{z_n\}$ は極限值 z に収束するといひ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} z_n = z$$

と表す. 複素数列 $\{s_n\}$ を $s_n = \sum_{k=1}^n z_k$ で定義する. $\{s_n\}$ が $s \in C$ に収束するとき, 級数は収束するといひ, $s = \sum_{k=1}^{\infty} z_k$ と表す. 級数 $\sum_{k=1}^{\infty} |z_k|$ が収束するとき, $\sum_{k=1}^{\infty} z_k$ は絶対収束するという. 絶対収束する級数は収束する.

$\{f_n\}$ を領域 A で定義された複素関数列とする. A の各点 z に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(z) = f(z)$$

なら, $\{f_n(z)\}$ は f に (単純) 収束するという. これを ε - δ 論法で表すと, 「任意の $\varepsilon > 0$ に対して, A 内の点 z に対して, 十分大きな自然数 N を選べば $n > N$ であるすべての自然数 n に対して,

$$|f_n(z) - f(z)| < \varepsilon$$

が成り立つことである」となる. 一般には, N は ε だけでなく z にも依存する. N が z とは無関係に選べる場合には $\{f_n(z)\}$ は $f(z)$ に一様収束するという. 一様収束すればその関数列は (単純) 収束する. 領域 A で定義されている $\{f_n(z)\}$ と $f(z)$ に対し, $A_0 \subseteq A$ となる任意の有界領域 A_0 で $\{f_n(z)\}$ が $f(z)$ に一様収束するとき, $\{f_n(z)\}$ は A で $f(z)$ に広義一様収束するという.

2. 連続について

$f(z)$ を z -平面内の集合 A で定義された 1 価関数とし, z_0, w_0 をそれぞれ z -平面上, w -平面上の点とする. このとき, 任意の $\varepsilon > 0$ に対して, $\delta > 0$ を十分小さくとれば $0 < |z - z_0| < \delta$ であるすべての $z \in A$ に対して

$$|f(z) - w_0| < \varepsilon$$

が成り立つとき, $f(z)$ は w_0 に収束するといひ, w_0 を A 内で $z \rightarrow z_0$ の場合の極限值といひ. z_0 が A の内点の場合には,

$$w_0 = \lim_{z \rightarrow z_0} f(z)$$

と表す. $z_0 \in A$, $z \in A$ に対して,

$$f(z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} f(z)$$

となるとき, $f(z)$ は z_0 で連続であるといひ. 連続であるといひのを ε - δ 論法で表すと, 「任意の $\varepsilon > 0$ に対して, A 中の点 z_0 について δ を適当に選べば $|z - z_0| < \delta$ であるすべての A 内の点 z に対して,

$$|f(z) - f(z_0)| < \varepsilon$$

が成り立つことである」となる. 一般には, δ は ε だけでなく z_0 にも依存する. δ が z_0 とは無関係に選べる場合には $f(z)$ は A で一様連続であるといひ.

3. 一次変換

a, b, c, d は複素数の定数で, $ad - bc \neq 0$ のとき,

$$w = \frac{az + b}{cz + d} \quad (\text{A1})$$

を 1 次変換 (正確には 1 次分数変換) という. 上の式を z について解くと

$$z = \frac{dw - b}{-cw + a} \quad (\text{A2})$$

となる. これを (A1) の逆変換といひ. 逆変換も 1 次変換になる. 1 次変換は円または直線を, 円または直線に写す変換である.

練習問題

(6) $f(z) = |z|^3$ の微分可能性と正則性を調べよ.

(7) 関数 $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ が D で正則なら, u と v は D で調和であることを示せ. ただし, u と v は 2 階微分可能であり, u と v が調和とは次の関係が成り立つことである.

$$\begin{aligned}\nabla^2 u &\equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u = 0 \\ \nabla^2 v &\equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v = 0\end{aligned}$$

(8) Cauchy–Riemann の関係式を極座標 (r, θ) で表すと, 次のようになることを示せ.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} \\ \frac{\partial u}{\partial \theta} &= -r \frac{\partial v}{\partial r}\end{aligned}$$

(9) $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ に対し, 次の関係式が成り立つことを示せ.

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = |f'(z)|^2$$

ただし, $\partial(u, v)/\partial(x, y)$ は次のように定義される Jacobian である.

$$\frac{\partial(u, v)}{\partial(x, y)} = \begin{vmatrix} u_x & u_y \\ v_x & v_y \end{vmatrix}$$

(10) 2 種類の複素偏微分を以下の式で定義する.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial z} &\equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} - i \frac{\partial f}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial f}{\partial \bar{z}} &\equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + i \frac{\partial f}{\partial y} \right)\end{aligned}$$

f が正則なら次の関係式成り立つことを示せ.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} &= 0 \\ \frac{df}{dz} &= \frac{\partial f}{\partial z}\end{aligned}$$

3 初等関数

以下に複素数 z を変数とする関数の例を示す.

3.1 ベキ関数 I

関数 $w = z^n$ (n : 自然数) は整関数であり, 導関数 dw/dz は, $dw/dz = nz^{n-1}$ である.

3.2 有理関数

z についての二つの多項式 $P(z)$ と $Q(z)$ を用いて, $P(z)/Q(z)$ と表される関数を有理関数という. この関数は, $Q(z) = 0$ を満たす点以外では正則である.

3.3 指数関数

z を $z = x + iy$ として, 関数 e^z ($\exp(z)$ と書くこともある) を以下の式で定義する.

$$e^z = e^x(\cos y + i \sin y) \quad (3.1)$$

指数関数はいたるところで Cauchy-Riemann の関係式を満たすので整関数である. 二つの指数関数の積については, $e^{(z_1+z_2)} = e^{z_1}e^{z_2}$ が成り立つ. 導関数については,

$$\frac{d}{dz}e^z = e^z$$

が成り立つ. $f(z) = e^z$ とすると, 式 (3.1) から $f(z) = f(z + 2m\pi i)$ ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$) となるので, e^z は周期 $2m\pi i$ の周期関数である. 指数関数 e^z は,

$$e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} z^n \quad (3.2)$$

で定義することもある. $z = iy$ とすると

$$\begin{aligned} e^{iy} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (iy)^n = 1 + iy - \frac{1}{2!} y^2 - i \frac{1}{3!} y^3 + \frac{1}{4!} y^4 + i \frac{1}{5!} y^5 - \dots \\ &= \left(1 - \frac{1}{2!} y^2 + \frac{1}{4!} y^4 - \dots\right) + i \left(y - \frac{1}{3!} y^3 + \frac{1}{5!} y^5 - \dots\right) \\ &= \cos y + i \sin y \end{aligned} \quad (3.3)$$

となり, Euler の式が得られる.

3.4 三角関数

複素数を変数とする余弦 (コサイン) 関数と正弦 (サイン) 関数を以下の式で定義する.

$$\begin{aligned} \cos z &= \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2} \\ \sin z &= \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i} \end{aligned} \quad (3.4)$$

e^{iz} と e^{-iz} はともに整関数なので, $\cos z$ および $\sin z$ も整関数である. これらの関数は周期 $2m\pi$ ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$) の周期関数である. 式 (3.4) からわかるように

$$e^{iz} = \cos z + i \sin z$$

となる ((3.1) 参照).

余弦関数と正弦関数の導関数については

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz} \cos z &= -\sin z \\ \frac{d}{dz} \sin z &= \cos z\end{aligned}\tag{3.5}$$

が成り立つ。また、正接（タンジェント）関数は $\tan z = \sin z / \cos z$ で定義される。

3.5 双曲線関数

z を変数とする双曲線関数, $\sinh z$ と $\cosh z$ を

$$\begin{aligned}\sinh z &= \frac{1}{2}(e^z - e^{-z}) \\ \cosh z &= \frac{1}{2}(e^z + e^{-z})\end{aligned}$$

で定義する。これらの関数の周期は $2m\pi i$ ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$) である。

$\tanh z$ は $\tanh z = \sinh z / \cosh z$ で定義される。

3.6 対数関数

指数関数の逆関数を対数関数という（すなわち, $w = e^z$ なら, $z = \log w$ と表す）。複素数 z を変数とする対数関数（底は e ）は, $|z|$ と $\arg z = \theta + 2n\pi$ ($-\pi < \theta \leq \pi$, n は整数) を用いて次のように書ける。

$$\log z = \ln |z| + i \arg z\tag{3.6}$$

$\log z$ は多価関数である。 θ を $\arg z$ の主値とよんで $\text{Arg } z$ と表記し, それを用いて次のように定義される 1 価関数 $\text{Log } z$ を $\log z$ の主値とよぶ。

$$\text{Log } z = \ln |z| + i \text{Arg } z\tag{3.7}$$

$\log z$ と $\text{Log } z$ の関係は次のようになる。

$$\log z = \text{Log } z + i(2n\pi) \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

それぞれの n に対する関数を $\log z$ の分枝という。 $\text{Log } z$ は $\log z$ の $n = 0$ に対応する分枝であり, 主枝とよばれる。

3.7 ベキ関数 II

一般のべき関数 p^q (p と q は複素数) を, $p^q = e^{q \log p}$ で定義する。関数 $w = z^k$ ($k > 0$, k は非整数) は多価関数になる。これは,

$$w = \exp(k \log z) = \exp[k(\text{Log } z + 2in\pi)] = \exp(k \text{Log } z) \exp(2ikn\pi)$$

と書けることから明らかであろう。

例 $w = z^{1/2} \quad (z = w^2)$

(解) $z = re^{i\theta}$, $w = \rho e^{i\varphi}$ とおくと,

$$\rho = \sqrt{r}, \quad e^{i\varphi} = e^{i\theta/2}$$

となる。 z が A から出発し再び A に戻るまでの間には, w は P から Q までしか動かない。しかし, z がもう一周まわると w は P まで戻る。

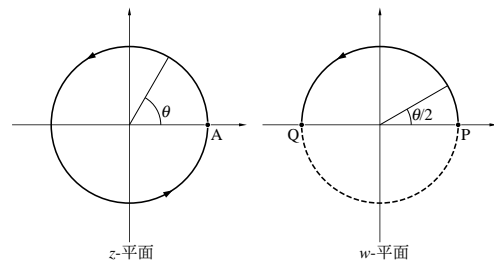


図 3.1 $z^{1/2}$ の定義域と値域

z と w を 1 対 1 に対応させるためには、右図のように 2 枚の z 平面をつなぎ合わせた平面を考えるとよい。このような面は Riemann 面とよばれ、この面上の点と w 平面上の点とは 1 対 1 に対応する。

z が原点のまわりを 2 回まわると関数の値はもとに戻る。このとき原点は 2 位の分岐点であるという。一般に、ある点の周りを n 回まわれば関数の値がもとに戻る場合、その点は n 位の分岐点という。分岐点は後述の特異点の一種である。

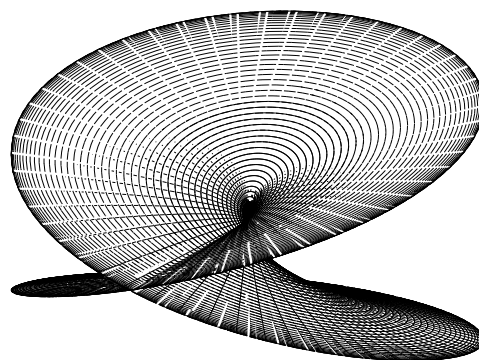


図 3.2 $z^{1/2}$ の Riemann 面

例題 3.1 次の問いに答えよ。

(1) $\cos z = 10$ を解け。

(解)

$$\cos z = \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2}$$

なので

$$\frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2} = 10$$

を解けばよい。 $t = e^{iz}$ とおけば、 $t^2 - 20t + 1 = 0$ より、 $t = e^{iz} = 10 \pm 3\sqrt{11}$ となる。 よって、

$$z = 2n\pi - i \ln(10 \pm 3\sqrt{11}) \quad (n : \text{整数})$$

となる。

(2) $\log(-2)$ の値を求めよ。

(解) 以下のとおり。

$$\begin{aligned} \log(-2) &= \ln|-2| + i \arg(-2) \\ &= \ln 2 + i(\pi + 2n\pi) = \ln 2 + i(2n+1)\pi \end{aligned}$$

ただし、 n は整数である。

(3) $\cosh iz = \cos z$, $\sinh iz = i \sin z$ となることを示せ。

(解) 定義より、

$$\begin{aligned} \cosh z &= \frac{e^z + e^{-z}}{2} \\ \sinh z &= \frac{e^z - e^{-z}}{2} \end{aligned}$$

である。 $z = iz$ とおけば、 次のようになる。

$$\begin{aligned} \cosh iz &= \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2} = \cos z \\ \sinh iz &= \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2} = \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i} \cdot i = i \sin z \end{aligned}$$

練習問題

(11) $\sin z = \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y$ ($z = x + iy$) を示せ.

(12) $\sin i\pi$ の値を求めよ.

(13) $\lim_{z \rightarrow 0} \frac{\sin z}{z}$ を求めよ.

(14) $\cos z = i$ を解け.

(15) 対数関数に対し Riemann 面を定義せよ.

4 複素関数の積分

曲線 C に沿った関数 $f(z)$ の (複素) 積分を次のように書く.

$$\int_C f(z)dz \quad (4.1a)$$

特に, 曲線 C が閉曲線のときには次のように書く.

$$\oint_C f(z)dz \quad (4.1b)$$

この場合, 閉曲線で囲まれた領域を左手に見ながら進む向きを正の向きといい, 積分は C の正の向きに行うこととする.

例題 4.1 次の積分を計算せよ.

$$(1) \int_C (z+1)dz, \quad C = \{z|z = (1+i)t, 0 \leq t \leq 1\} \quad (\text{原点が始点, } 1+i \text{ が終点})$$

(解) 以下のとおり.

$$\begin{aligned} \int_C (z+1)dz &= (1+i) \int_0^1 [(1+i)t+1]dt = (1+i) \left[\frac{(1+i)}{2}t^2 + t \right]_0^1 \\ &= \frac{(1+i)(3+i)}{2} \end{aligned}$$

$$(2) \oint_C z^2 dz, \quad C = \{z||z| = 1\}$$

(解) $z = e^{i\theta}$ ($0 \leq \theta < 2\pi$) とおくと, 次のようになる.

$$\oint_C z^2 dz = \int_0^{2\pi} e^{2i\theta} \cdot ie^{i\theta} d\theta = i \int_0^{2\pi} e^{3i\theta} d\theta = i \left[\frac{e^{3i\theta}}{3i} \right]_0^{2\pi} = 0$$

z -平面上の閉曲線およびその内部の領域 (単連結領域) D で正則な関数 $f(z)$ をその閉曲線 (D の外周: 今後, 外周を ∂D , $D \cup \partial D$ を \overline{D} と表す) に沿って積分すると 0 になる:

$$\oint_{\partial D} f(z)dz = 0 \quad (4.2)$$

これを Cauchy の積分定理とよぶ. この定理が成り立つことは, Green の定理

$$\int_{\partial D} P(x,y)dx + Q(x,y)dy = \iint_D \left(\frac{\partial Q(x,y)}{\partial x} - \frac{\partial P(x,y)}{\partial y} \right) dx dy$$

から簡単に示すことができる. ここで, P と Q は滑らかな関数である. Cauchy の定理は有限個の単純閉曲線で囲まれた領域 (多重連結領域) に拡張することができる. 単連結領域 D で定義された関数 $f(z)$ に対して,

$$F'(z) = f(z) \quad (4.3)$$

となる正則な関数 $F(z)$ が存在すれば, $F(z)$ を D における $f(z)$ の原始関数という. $f(z)$ が $z=0$ で正則なら $F(z)$ は常に存在する. 関数 $f(z)$ が領域 D において $F(z)$ を持てば, D 内の滑らかな任意の積分経路 (曲線 C : 始点 a , 終点 b) に対し

$$\int_C f(z)dz = F(b) - F(a) \quad (4.4)$$

となる.

$f(z)$ が \bar{D} で正則な関数なら, D の内部の点 z における $f(z)$ の値は

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D} \frac{f(\zeta)}{\zeta - z} d\zeta \quad (4.5)$$

で与えられる. これを Cauchy の積分表示という. 式 (4.5) から, $f(z)$ の n 階の導関数 $f^{(n)}(z)$ について以下の関係が導かれる.

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{\partial D} \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (4.6)$$

例題 4.2 次の積分を計算せよ. ただし, 積分は C の正の向きとする.

(1) $\oint_C \frac{z^2}{(z^2 - 40)(z - 3i)} dz, \quad C = \{z \mid |z| = 1\}$

(解) $|z| \leq 1$ で被積分関数は正則なので,

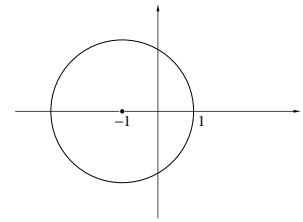
$$\oint_C \frac{z^2}{(z^2 - 40)(z - 3i)} dz = 0$$

(2) $\oint_C \frac{\sin z}{1 + z} dz, \quad C = \{z \mid |z + 1| = 2\}$

(解) $\sin z$ は C 上およびその内部で正則なので,

$$\oint_C \frac{\sin z}{1 + z} dz = 2\pi i \sin(-1) = \pi(e^{-i} - e^i)$$

である.



(3) $\oint_C |dz|, \quad C = \{z \mid |z| = 2\}$

(解) $z = 2e^{i\theta} \quad (0 \leq \theta < 2\pi)$ とおけるので, $dz = 2ie^{i\theta} d\theta$ である. よって, $|dz| = 2d\theta$ となるので次のようになる.

$$\oint_C |dz| = 2 \int_0^{2\pi} d\theta = 4\pi$$

補足

1. 曲線と領域

$x(t)$ と $y(t)$ を実変数 t ($a \leq t \leq b$) の連続 1 価関数とする. このとき, $z(t) = x(t) + iy(t)$ で定義される曲線を連続曲線という. 連続曲線で, $z(a) = z(b)$ となるものを閉曲線という. 連続曲線で $t_1 \neq t_2$ なら $z(t_1) \neq z(t_2)$ となるような曲線を Jordan 弧という. $z(a) = z(b)$ でそれ以外では, $t_1 \neq t_2$ なら $z(t_1) \neq z(t_2)$ である曲線を Jordan 閉曲線 (または単純閉曲線) という. Jordan 閉曲線の内部の点からなる集合を単連結領域 (または, Jordan 領域) という. 単連結でない領域を多重連結領域という.

2. Green の定理 (2 次元)

xy -平面内の有界な領域 A の内部, およびその境界 ∂A 上で滑らかな関数 $F(x, y)$ では,

$$\begin{aligned} \iint_A \frac{\partial F(x, y)}{\partial x} dx dy &= \oint_{\partial A} F(x, y) dy \\ \iint_A \frac{\partial F(x, y)}{\partial y} dx dy &= - \oint_{\partial A} F(x, y) dx \end{aligned}$$

が成り立つ. この関係を使うと,

$$\oint_{\partial A} P(x, y)dx + Q(x, y)dy = \iint \left(\frac{\partial Q(x, y)}{\partial x} - \frac{\partial P(x, y)}{\partial y} \right) dx dy$$

が得られる.

練習問題

積分の向きはすべて正方向として以下の問いに答えよ.

(16) $\oint_{|z-a|=b} (z-a)^n dz$ を求めよ. ただし, n は整数, $a(\neq 0)$ と $b(> 0)$ は定数である.

(17) $C = \{z \mid |z| = r\}$ とする. f が C 上および C の内部で正則なら, $\oint_C f(z) d\theta = 2\pi f(0)$ となることを示せ. ただし, $z = re^{i\theta}$ である.

(18) $\oint_C \log z dz$ を以下に示す二つの経路 A と B について求めよ.

A: 半径 1 の単位円上を $z = 1$ から 1 周する経路.

B: 半径 1 の単位円上を $z = i$ から 1 周する経路.

(19) $\oint_{|z|=1} \frac{e^{-z} \cos z}{z^2} dz$ を求めよ.

(20) $\oint_{|z|=1} (z-2)|dz|$ を求めよ.

5 関数の展開

関数 $f(z)$ に対し, $f(z) = 0$ を満たす点 α を零点という. 点 α で

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = f''(\alpha) = \cdots = f^{(n-1)}(\alpha) = 0, \quad f^{(n)}(\alpha) \neq 0$$

であれば, α を $f(z)$ の n 位の零点とよぶ.

関数 $f(z)$ について, α では正則でないが, α のどの近傍の点も正則であるとき, α を $f(z)$ の孤立特異点という. 孤立特異点はいくつかの種類に分類できる. もし, $\lim_{z \rightarrow \alpha} f(z)$ が有限値をもてば, α は除去可能な特異点であるという. $\lim_{z \rightarrow \alpha} f(z)$ が有限値をとらないときでも, $\lim_{z \rightarrow \alpha} (z - \alpha)^n f(z)$ が有限値となるような正の整数 n が存在する場合がある. この場合, α を $f(z)$ の m 位の極という (ただし, m は n の最小のものである). 孤立特異点で, 除去可能な特異点でも極でもないものを (孤立) 真性特異点という. 先に述べた分岐点は除去可能な特異点でもなく, 極でも (孤立) 真性特異点でもない特異点である.

孤立特異点ではない例 :

$$z = 0 \quad \text{for} \quad f(z) = \frac{1}{\sin\left(\frac{1}{z}\right)}$$

除去可能な (孤立) 特異点 :

$$\text{例えば, } z = 0 \quad \text{for} \quad f(z) = \frac{\sin z}{z}$$

関数 $f(z)$ が $|z - \alpha| < r$ で正則なら, $f(z)$ はこの領域で

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(\alpha)}{k!} (z - \alpha)^k \quad (5.1)$$

と一義的に展開できる. これを関数 $f(z)$ の Taylor 展開という.

関数 $f(z)$ が $0 \leq \rho < |z - \alpha| < r$ で正則なら, $f(z)$ はこの領域で

$$f(z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k (z - \alpha)^k \quad (5.2a)$$

$$c_k = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\zeta)}{(\zeta - \alpha)^{k+1}} d\zeta \quad (5.2b)$$

と展開できる. ここで, C はこの領域内で α を囲む任意の曲線である. これを $f(z)$ の Laurent 展開という. 特に, 式 (5.2a) の k の負の部分の Laurent 展開の主要部という. 主要部の項の数が有限なら極, 無限なら真性特異点をもつことになる.

極: 例えば, $z = \alpha$ for $f(z) = \frac{1}{(z - \alpha)^2}$, $z = \alpha$ は 2 位の極

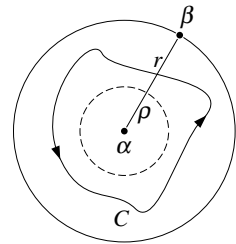
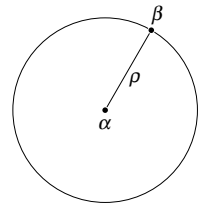
(孤立) 真性特異点: 例えば, $z = 0$ for $f(z) = e^{1/z}$, $z = 0$ は孤立真性特異点

例題 5.1 次の関数を展開せよ.

(1) $f(z) = \sin z$ ($z = 0$ のまわり)

(解) $z = 0$ は特異点ではないので, この点の周りでは Taylor 展開が可能である ($|z| < \infty$).

$$\sin z = z - \frac{1}{3!}z^3 + \frac{1}{5!}z^5 - \cdots + (-1)^n \frac{1}{(2n+1)!}z^{2n+1} + \cdots$$



(2) $f(z) = \frac{1}{1+z^2}$ ($z=i$ のまわりで $0 < r < 1$ の領域)

(解) $z=i$ は $f(z)$ の 1 位の極である. $r < 1$ の領域には他に特異点はない. よって, 次の様になる.

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{(z-i)(z+i)} = \frac{1}{z-i} \cdot \frac{1}{2i\left(1 + \frac{z-i}{2i}\right)} \\ &= \frac{1}{2i(z-i)} \left[1 - \left(\frac{z-i}{2i}\right) + \left(\frac{z-i}{2i}\right)^2 - \cdots + (-1)^n \left(\frac{z-i}{2i}\right)^n + \cdots \right] \\ &= \frac{1}{2i} \frac{1}{z-i} - \frac{1}{(2i)^2} + \frac{1}{(2i)^3}(z-i) - \cdots + (-1)^n \frac{1}{(2i)^{n+1}}(z-i)^n + \cdots \end{aligned}$$

(注意) Laurent 展開が可能な領域は $0 < r < 1$ だけではない. $r > 1$ の領域でも可能である (しかし, 展開式の表式は異なる. ただし, $r=2$ は除く.).

補足

解析接続

領域 A_1 で定義された正則関数を $f_1(z)$ とする. 領域 A_1 と A_2 が $A_1 \cap A_2 \neq \phi$ (空集合) であるとき, $A_1 \cap A_2$ で $f_1(z)$ に等しく, A_2 で正則な関数 $f_2(z)$ が存在すれば, $f_2(z)$ を $f_1(z)$ の A_2 への解析接続であるという. 解析接続は一意的に決まる.

練習問題

(21) $\sin \frac{1+z^2}{1-z^2}$ の特異点を求めよ.

(22) $f(z) = z^2 e^{1/z}$ を原点のまわりで Laurent 展開せよ.

(23) $f(z) = \frac{1}{z(1+z)}$ を原点のまわりで Laurent 展開せよ. また, それが成立する領域を示せ.

(24) $f(z) = \frac{1}{1+z^2}$ の Laurent 展開を以下の二つの領域で求めよ.

(A) $0 < |z-i| < 2$

(B) $|z-i| > 2$

(25) (孤立) 真性特異点を持つ関数では, 特異点での極限値は近づけ方に依存して変わる. このことを具体的な関数を用いて示せ.

6 留数定理と実積分への応用

関数 $f(z)$ が孤立特異点 α のまわりで (5.2) 式のように Laurent 展開できたとする. このとき, 展開係数 c_{-1} を $f(z)$ の α における留数といい, $\text{Res}(\alpha)$ と書く. $f(z)$ が α で m 位の極をもつ場合, その点での留数 $\text{Res}(\alpha)$ は一般に

$$\text{Res}(\alpha) = \frac{1}{(m-1)!} \lim_{z \rightarrow \alpha} \frac{d^{m-1}(z-\alpha)^m f(z)}{dz^{m-1}} \quad (6.1)$$

で与えられる. しかし, m が大きい場合はこの方法で留数を求めるのはあまり有用ではなく, Laurent 展開から求める方が現実的である.

関数 $f(z)$ が領域 \bar{D} 内に有限個の孤立特異点 $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ を持ち, それらの点以外で正則なら,

$$\oint_{\partial D} f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^m \text{Res}(\alpha_k) \quad (6.2)$$

となる. これを留数定理とよぶ. 留数定理を使うとさまざまな実関数の定積分が計算できる. 例えば, 以下のような実関数積分が計算できる.

(1) $\int_0^{2\pi} F(\cos \theta, \sin \theta) d\theta$ 型の積分

$F(x, y)$ を 2 変数の実関数とする. $z = e^{i\theta}$ とすると, $|z| = 1$ であり,

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \frac{1}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) = \frac{1}{2} \left(z + \frac{1}{z} \right) \\ \sin \theta &= \frac{1}{2i} (e^{i\theta} - e^{-i\theta}) = \frac{1}{2i} \left(z - \frac{1}{z} \right) \end{aligned}$$

となる. また, $dz/d\theta = ie^{i\theta} = iz$ なので,

$$\int_0^{2\pi} F(\cos \theta, \sin \theta) d\theta = \oint_{|z|=1} F \left[\frac{1}{2} \left(z + \frac{1}{z} \right), \frac{1}{2i} \left(z - \frac{1}{z} \right) \right] \frac{dz}{iz}$$

となる. 右辺の積分は, 被積分関数の特異点における留数を求めれば計算できる.

(2) $\int_{-\infty}^{\infty} R(x) dx$ 型の積分

$R(z)$ が有理関数で, (i) 実軸上に極を持たず, (ii) $z \rightarrow \infty$ のとき $z^2 R(z)$ が有限確定値をもつ場合は留数定理から定積分が計算できる. このときの積分経路 C を図 6.1 に示す.

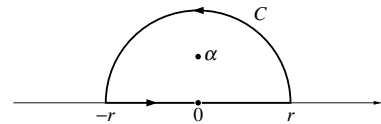


図 6.1 積分経路

円周 $|z| = r$ の上半分を C_1 , 実軸の $-r$ から r までの部分を C_2 とし, それらを加えたものを C とする. r が十分大きい場合, C_1 上では,

$$|R(z)| \leq \frac{M}{r^2}$$

となる定数 M が存在する. また, 一般に関数 $g(z)$ に対しては, どのような経路 A についても以下の不等式が成り立つ.

$$\left| \int_A g(z) dz \right| \leq \int_A |g(z)| |dz|$$

したがって,

$$\left| \int_{C_1} R(z) dz \right| \leq \frac{M}{r^2} \cdot \pi r \rightarrow 0 \quad (r \rightarrow \infty)$$

となる. 留数定理より

$$\oint_C R(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^m \text{Res}(\alpha_k)$$

となるが,

$$\oint_C R(z)dz = \int_{C_1} R(z)dz + \int_{-\infty}^{\infty} R(x)dx \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} R(x)dx$$

なので,

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x)dx = 2\pi i \sum_{k=1}^m \text{Res}(\alpha_k)$$

となる. ここで留数は上半平面 ($\text{Im } z > 0$) にあるすべての特異点についてのものの和である.

(3) $\int_{-\infty}^{\infty} R(x)e^{ix} dx$ 型の積分 [ただし, $R(z)$ は (2) と同じ条件を満たす有理関数とする.]

(2) と同じ積分経路を考えると, C_1 上では,

$$|R(z)| \leq \frac{M}{r^2}$$

$$|e^{iz}| = |e^{ix}||e^{-y}| = |e^{-y}| \leq 1 \quad (\because y > 0)$$

なので,

$$\left| \int_{C_1} R(z)e^{iz} dz \right| \leq \frac{M}{r^2} \cdot \pi r \rightarrow 0 \quad (r \rightarrow \infty)$$

となる. よって,

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x)e^{ix} dx = 2\pi i \sum_{k=1}^m \text{Res}(\alpha_k)$$

となる.

(4) 主値積分

以下の積分を考える.

$$\int_a^c \frac{f(x)}{x-b} dx \quad (a < b < c) \quad (6.3)$$

この積分は普通の意味では実行不可能であるが, この積分を

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_a^{b-\varepsilon} \frac{f(x)}{x-b} dx + \int_{b+\varepsilon}^c \frac{f(x)}{x-b} dx \right] \quad (\varepsilon > 0) \quad (6.4)$$

とみなすと積分の値が確定することがある. 上の積分を

$$P \int_a^c \frac{f(x)}{x-b} dx \quad (6.5)$$

と表し, 主値積分とよぶ. 主値積分を求めるのにも複素積分が役に立つ.

(5) 虚数軸に沿った積分

$f(z)$ は半平面 $\text{Re } z < \alpha$ ($\alpha > 0$) において有限個の点 $(a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$ を除いて正則で,

$$\lim_{z \rightarrow \infty, \text{Re } z \leq \alpha} f(z) = 0$$

とする. このとき, $t > 0$ に対して

$$\int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{zt} f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^n \left[\text{Res} (e^{z_i} f(z))_{z=a_k} \right] \quad (6.6)$$

となる. ただし, 左辺の積分の意味は次のとおりである.

$$\int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{zt} f(z) dz \equiv i \int_{-\infty}^{\infty} e^{(\alpha+iy)t} f(\alpha+iy) dy \quad (z = \alpha + iy)$$

例題 6.1 以下の積分を求めよ.

$$(1) \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2 \theta}{1 + 2a \cos \theta + a^2} d\theta \quad (0 < |a| < 1)$$

(解) この積分は (1) 型の積分である. 求める積分を I として, I を z の積分に書き換えると,

$$I = \frac{1}{4i} \oint_{|z|=1} \frac{z^4 + 2z^2 + 1}{z^2(a z + 1)(z + a)} dz$$

となる. 被積分関数の特異点を調べると, $|z| < 1$ にあるものは, $z = 0$ (2位の極) と $z = -a$ (1位の極) の二つである. 留数定理から,

$$I = 2\pi i [\text{Res}(-a) + \text{Res}(0)]$$

となるが, 留数は被積分関数を $g(z)$ とすると

$$\text{Res}(-a) = \lim_{z \rightarrow -a} (z + a) \cdot g(z) = \frac{1}{4i} \frac{a^4 + 2a^2 + 1}{a^2(1 - a^2)}$$

$$\text{Res}(0) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d}{dz} [z^2 g(z)] = -\frac{1}{4i} \frac{1 + a^2}{a^2}$$

なので, 次の結果を得る.

$$I = \frac{\pi(1 + a^2)}{1 - a^2}$$

$$(2) \int_0^\infty \frac{dx}{(1 + x^2)^2}$$

(解) これは (2) 型の積分であるので,

$$R(z) = \frac{1}{(1 + z^2)^2}$$

とおき, この関数を以下のような積分経路 C で積分することを考える. $R(z)$ は $z = \pm i$ で 2 位の極をもつが, C の内部にあるのは $z = i$ のみである. よって,

$$I \equiv \int_C R(z) dz = 2\pi i \text{Res}(i)$$

である. $\text{Res}(i)$ は

$$\text{Res}(i) = \lim_{z \rightarrow i} \frac{d}{dz} \frac{1}{(z + i)^2} = \frac{1}{4i}$$

となる. C に沿っての積分を円周部分と実軸上の部分に分ける. 円周部分 (C_1) での z を $z = re^{i\theta}$ ($0 \leq \theta < \pi$) とおくと,

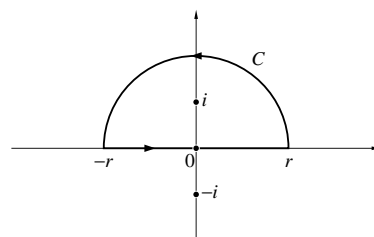
$$\left| \int_{C_1} R(z) dz \right| = \left| \int_0^\pi \frac{ire^{i\theta}}{[1 + (re^{i\theta})]^2} d\theta \right| \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

なので, I は実軸上の積分に等しくなる. 実軸上では $z = x$ となるので, I は

$$I = \int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{(1 + x^2)^2} = 2\pi i \cdot \frac{1}{4i} = \frac{\pi}{2}$$

となる. $R(x)$ は偶関数なので, 次の結果を得る

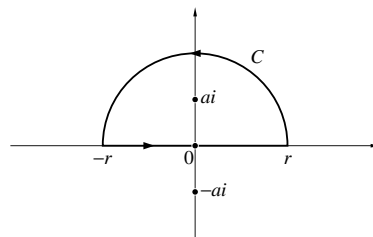
$$\int_0^\infty \frac{dx}{(1 + x^2)^2} = \frac{\pi}{4}$$



$$(3) \int_0^\infty \frac{\cos x}{x^2 + a^2} dx \quad (a > 0)$$

(解) これは (3) 型の積分である. これを求めるために,

$$I \equiv \int_C R(z) dz = \int_C \frac{e^{iz}}{z^2 + a^2} dz$$



とおき, 以下の積分経路 (C) で I を計算する. 閉曲線 C で囲

まれた領域にある特異点は $z = ai$ だけである. $z = ai$ は 1 位の極で, そこでの留数は

$$\text{Res}(ai) = \lim_{z \leftarrow ai} (z - ai) R(z) = \frac{e^{-1}}{2ai}$$

である.

先の問題と同様に C についての積分を円周部分と実軸上の部分とにわけて考えると, 円周上の部分は $r \rightarrow \infty$ のときには 0 になるので, I を与えるのは実軸上の積分ということになる. よって,

$$I = \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ix}}{x^2 + a^2} dx = 2\pi i \cdot \frac{e^{-a}}{2ai} = \frac{\pi}{a} e^{-a}$$

となる. 求める積分は

$$\text{Re } I = \text{Re} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ix}}{x^2 + a^2} dx = \int_{-\infty}^\infty \frac{\cos x}{x^2 + a^2} dx = \frac{\pi}{a} e^{-a}$$

より, 次の結果を得る.

$$\int_0^\infty \frac{\cos x}{x^2 + a^2} dx = \frac{\pi}{2a} e^{-a}$$

練習問題

以下の積分を求めよ.

$$(26) \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{5 + 3 \sin \theta}$$

$$(27) \int_0^\infty \frac{x^{-a}}{1+x} dx \quad (0 < a < 1)$$

$$(28) \int_0^\infty \cos x^2 dx = \int_0^\infty \sin x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} \quad (\text{Fresnel 積分})$$

$$(29) \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R \frac{\sin x}{x} dx = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2}$$

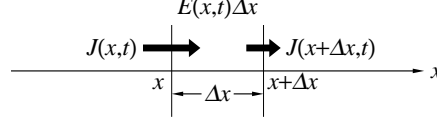
$$(30) \text{P} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ix}}{x} dx$$

$$(31) \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} \frac{e^{zt}}{z^{n+1}} dz \quad (z = x + iy, \alpha > 0, t > 0) \quad (n \text{ は自然数})$$

7 熱方程式と Fourier 級数

7.1 熱方程式

時刻 0 にある温度分布を持った 1 次元の熱伝導体は、時刻 t でどのような温度分布になっているのか？



時刻 t において点 x の熱伝導体を持つ単位長さ当りの熱エネルギーを $E(x, t)$ とする。単位長さ当りの熱容量 C が温度に依存しないと仮定¹すると、時刻 t における点 x の温度 $f(x, t)$ は $E(x, t)$ を用いて次のように書ける。

$$f(x, t) = \frac{1}{C} E(x, t) \quad (7.1)$$

また、時刻 t に点 x を通って流れる単位時間当りの熱エネルギー（熱流束）を $J(x, t)$ とする。ただし、 x の正方向への流れを正とする。 x から $x + \Delta x$ の間の微小な熱伝導体の熱エネルギー $E(x, t)\Delta x$ が、時刻 t から $t + \Delta t$ への変化する量 $[E(x, t + \Delta t) - E(x, t)]\Delta x$ は $-[J(x + \Delta x, t) - J(x, t)]\Delta t$ に等しい（エネルギー保存則）から、次の関係が成立する。

$$[E(x, t + \Delta t) - E(x, t)]\Delta x = -[J(x + \Delta x, t) - J(x, t)]\Delta t \quad (7.2)$$

したがって、次の連続の式（continuity equation）²が成り立つ³。

$$\frac{\partial}{\partial t} E(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t) \quad (7.3)$$

さらに、 $J(x, t)$ は点 x における温度勾配の大きさに比例して高温側から低温側に流れると仮定⁴すると、 $J(x, t)$ は次のように書ける。

$$J(x, t) = -\kappa \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) \quad (7.4)$$

ここで、 κ は熱伝導係数である。式 (7.1), (7.3), (7.4) より、次の熱方程式が導かれる。

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = \frac{\kappa}{C} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) \quad (7.5)$$

熱方程式はエネルギーの移動を記述する偏微分方程式であるが、エネルギーの代わりに質量の移動を考えたものが拡散方程式である。熱方程式あるいは拡散方程式を代表的に次のように書く。

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = D f(x, t) \quad (7.6)$$

ここで、 D は次のように定義される微分演算子である。

$$D = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (7.7)$$

比例定数 D は、熱方程式あるいは拡散方程式の場合、正である。

¹熱力学で習うように、一般に C は温度に依存し、熱力学第 3 法則の要請により絶対零度で 0 となる。しかし、室温近辺の狭い温度領域において、その温度依存性は余り大きくないので、近似的に一定と見なしても問題はない。また、ここで考える温度は絶対温度ではなく、ある特定の温度を基準としてそれからの差を考えた Celsius 温度のようなものである。

²エネルギーや質量が保存されることを表現した式で、物理化学の基礎式としてよく現れる。

³ $\partial/\partial t$, $\partial/\partial x$ はそれぞれ t および x に関する偏微分を表し（附録 A）、 $\partial^2/\partial x^2 = (\partial/\partial x)(\partial/\partial x)$ である。

⁴温度勾配が大きくなると必ずしもそうはならない。変化の度合いが小さいと、それに伴って起こる流れが比例すると仮定する線形近似で現象を記述できることが多い。

7.2 三角関数を用いた偏微分方程式 (7.6) の解法

熱方程式あるいは拡散方程式の解はどのように書けるか？

演算子 \mathcal{D} は次のような線形性を持つ (線形演算子)。

$$\mathcal{D}(f+g) = \mathcal{D}f + \mathcal{D}g, \quad \mathcal{D}(\alpha f) = \alpha \mathcal{D}f \quad (7.8)$$

ここで, f, g はともに x の関数であり, α は x に依存しない定数である。したがって, $f(x, t), g(x, t)$ がともに偏微分方程式 (7.6) の (特) 解であるとする, $\alpha f(x, t) + \beta g(x, t)$ (β も x に依存しない定数) も解である。すなわち, 解の重ね合わせが可能である。このことは, 熱方程式や拡散方程式に限らず, 任意の偏微分方程式を式 (7.6) の形に整理したとき, \mathcal{D} に相当する演算子が線形であれば常に成り立つ。

\mathcal{D} を三角関数 $\cos(\alpha x), \sin(\alpha x)$ に作用させると次のようになる。

$$\mathcal{D} \cos(\alpha x) = -\alpha^2 \mathcal{D} \cos(\alpha x), \quad \mathcal{D} \sin(\alpha x) = -\alpha^2 \mathcal{D} \sin(\alpha x) \quad (7.9)$$

すなわち, $\cos(\alpha x), \sin(\alpha x)$ は \mathcal{D} の固有関数である。これより, $e^{-\alpha^2 D t} \cos(\alpha x), e^{-\alpha^2 D t} \sin(\alpha x)$ が偏微分方程式 (7.6) の特解であることが分かる。したがって, 種々の α を持つ $\cos(\alpha x)$ と $\sin(\alpha x)$ を用いて初期温度分布 $f(x, 0)$ を表すことができれば, $e^{-\alpha^2 D t} \cos(\alpha x)$ と $e^{-\alpha^2 D t} \sin(\alpha x)$ を重ね合わせることで任意の時刻の温度分布を書き表すことができる。

熱伝導体の長さが有限の場合を考え, その長さを $2l$, x が取りうる値の範囲を $-l \leq x \leq l$ とする。その上で定義された関数 $f(x)$ が $\cos \frac{n\pi x}{l}, \sin \frac{n\pi x}{l}$ を用いて,

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right) \quad (7.10)$$

のように展開できると仮定する。 $\cos \frac{m\pi x}{l}, \sin \frac{n\pi x}{l}$ の積の定積分が

$$\begin{aligned} \int_{-l}^l \cos \frac{m\pi x}{l} \cos \frac{n\pi x}{l} dx &= \delta_{mn} l \quad (m, n = 0, 1, 2, \dots) \\ \int_{-l}^l \cos \frac{m\pi x}{l} \sin \frac{n\pi x}{l} dx &= 0 \quad (m = 0, 1, 2, \dots; n = 1, 2, \dots) \\ \int_{-l}^l \sin \frac{m\pi x}{l} \sin \frac{n\pi x}{l} dx &= \delta_{mn} l \quad (m, n = 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (7.11)$$

となる⁵こと (直交性) を用いれば, 式 (7.10) の展開係数 a_n, b_n は次のように書ける。

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ b_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (7.12)$$

したがって, $f(x)$ が $f(x, t)$ の初期状態 $f(x, 0)$ だとすると, $f(x, t)$ は次のように表すことができる。

$$f(x, t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{n^2 \pi^2 D}{l^2} t\right) \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right) \quad (7.13)$$

$f(x)$ として次のような (周期的) 階段関数を考えてみよう。

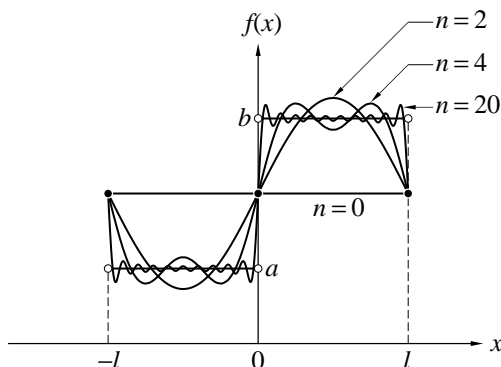
$$\begin{aligned} f(x) &= a & (-l < x < 0) \\ &= b & (0 < x < l) \\ &= \frac{1}{2}(a+b) & (x = -l, 0, l) \end{aligned} \quad (7.14)$$

⁵ δ_{mn} は Kronecker の δ であり, $m = n$ のとき $\delta_{mn} = 1$, $m \neq n$ のとき $\delta_{mn} = 0$ である。

ただし, $a < b$. 式 (7.12) を用いて展開係数 a_n , b_n を求めると,

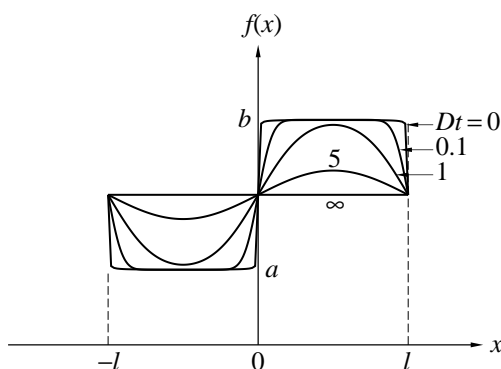
$$\begin{aligned} a_n &= \delta_{n0}(a+b) \\ b_n &= \frac{2(b-a)}{n\pi} \quad (n: \text{奇数}) \\ &= 0 \quad (n: \text{偶数}) \end{aligned} \quad (7.15)$$

となり, 展開 (7.10) において和を $n = 0, 2, 4, 20$ までで打ち切った場合を示したのが次の図である.



n が大きくなるにしたがって, より精度よく近似されることが分かり, $n \rightarrow \infty$ の極限で階段関数に収束しそうである. しかし, 本当にそうかどうかについては理論的な検討が必要であり, それについては次節で考えることにするが, 展開 (7.10) のように関数を (無限個の) 三角関数の重ね合わせで表すことを **Fourier 級数** に展開するという.

一般に, 熱方程式あるいは拡散方程式の解は, 考えている領域の端で解が満たすべき条件 (境界条件) に依存する. 展開 (7.10) は, $x = l$ の点が $x = -l$ の点に接合された, 周期境界条件の場合に適切な表現であり, 式 (7.13) で与えられる $f(x, t)$ もその場合の解である. 実際に, $f(x, t)$ の時間変化を示したのが次の図である. ただし, 式 (7.13) の和は $n = 100$ までを考慮した. (還元) 時間 Dt が経つに連れて, 系の温度差が小さくなり, 最終的には一定値 $\frac{1}{2}(a+b)$ になる様子が分かる.



7.3 他の線形偏微分方程式の例 — 波動方程式

弦の微小振動はどのような偏微分方程式で記述されるか?

張力 T で張られた弦の横方向の微小振動について考える. ギターの弦の振動を想像してもらえればよい. 静止状態において弦上の各点の位置を x で表し (印を付け), 時刻 t における点 x の横方向への変位を $f(x, t)$ とする. 弦の横方向への微小変移によって弦の長さはほとんど変化しないので⁶, 張力 T は一定と考えてよ

⁶弦の長さの変化は微小変移の 2 乗のオーダーである.

い. 弦の単位長さ当たりの質量を ρ とすると, x から $x + \Delta x$ の微小部分の運動方程式は次のように書ける.

$$\rho \Delta x \frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x, t) = -T \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) + T \left[\frac{\partial}{\partial x} f(x, t) \right]_{x+\Delta x} \quad (7.16)$$

ここで,

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} f(x, t) \right]_{x+\Delta x} = \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) + \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) \right] \Delta x \quad (7.17)$$

であることに留意すると, 式 (7.16) は次のようになる.

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x, t) = \frac{T}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) \quad (7.18)$$

これが弦の微小振動を記述する偏微分方程式である.

式 (7.18) を代表的に

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x, t) = v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) \quad (7.19)$$

と書こう. 今の場合, $v = \sqrt{T/\rho}$ である. 一般的に, $f_+(x - vt)$ および $f_-(x + vt)$ のように, $f(x, t)$ が $x \pm vt$ の関数であるようなものは式 (7.19) の解となっている. $f_+(x - vt)$ と $f_-(x + vt)$ はそれぞれ x の正方向と負方向に速さ v で平行移動する波のようなものを表している. したがって, 式 (7.19) の解は $f_+(x - vt)$ と $f_-(x + vt)$ の重ね合わせ — 正方向と負方向に速さ v で進む波の重ね合わせで表すことができる. 上で考えた弦の微小振動以外にも, 媒体中を伝播する音波など, 空間を何かの変移が伝播する様子は, 変移が小さい場合, 式 (7.19) のように表すことができ, 波動方程式と呼ばれる.

練習問題

(32) $e^{-\alpha^2 Dt} \cos(\alpha x)$, $e^{-\alpha^2 Dt} \sin(\alpha x)$ が偏微分方程式 (7.6) の特解であることを示せ.

(33) 直交関係式 (7.11) が成り立つことを示せ.

(34) 展開係数 (7.15) を求めよ.

(35) 式 (7.10), (7.15) より, 次の Leibniz の公式を導け.

$$\sum_0^\infty \frac{(-1)^n}{2n+1} = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \cdots = \frac{\pi}{4}$$

(36) $f_+(x - vt)$ と $f_-(x + vt)$ が式 (7.19) を満たしていることを示せ.

(37) 弦の方程式 (7.18) の解を, Fourier 級数を用いて考察せよ. ただし, 弦の長さを $2l$ とし, その両端は固定されているものとする.

8 Fourier 級数

8.1 複素指数関数を用いた Fourier 級数の表記

複素指数関数 e^{ix} を用いると式 (7.10) はどのように表記されるか？

Euler の公式 (3.3) より, $e^{\pm ix}$ を用いて $\cos x$, $\sin x$ はそれぞれ次のように書ける.

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}, \quad \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (8.1)$$

これを用いて式 (7.10) を書き直すと次のようになる.

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/l} \quad (8.2)$$

ただし,

$$c_n = \frac{a_n - ib_n}{2} \quad (8.3)$$

であり, $n < 0$ のときの a_n , b_n を次のように拡張定義する.

$$a_{-n} = a_n, \quad b_{-n} = -b_n \quad (8.4)$$

定義より $b_0 = 0$ である.

複素指数関数の列 $\dots, e^{-2i\pi x/l}, e^{-i\pi x/l}, 1, e^{i\pi x/l}, e^{2i\pi x/l} \dots$ は次の直交性を持つ.

$$\int_{-l}^l e^{im\pi x/l} \overline{e^{in\pi x/l}} dx = \int_{-l}^l e^{i(m-n)\pi x/l} dx = 2\delta_{mn}l \quad (8.5)$$

したがって, 三角関数の場合の展開係数 a_n , b_n の表記 (7.12) に対応して, 複素指数関数の場合の展開係数 c_n は次のように書ける.

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{-in\pi x/l} dx \quad (8.6)$$

展開式 (8.2) が妥当ならば, 次の等式が成立することになる.

$$f(x) = \frac{1}{2l} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\pi x/l} \int_{-l}^l f(y) e^{-in\pi y/l} dy \quad (8.7)$$

これまで, 熱方程式あるいは波動方程式の解の記述という視点で話をしてきたので, 暗黙の内に $f(x)$ が実数値関数と考えてきたが, 複素数値関数でも全く同様の議論が成り立つ.

8.2 Fourier 級数展開定理

式 (8.7) の成立は保証されるのか？

式 (8.7) において l を π と置いても一般性を失わないことに留意し, 保証して欲しいことを整理すると次のような定理の形にまとめることができる.

Fourier 級数展開定理

実数 x の複素数値関数 $f(x)$ が, 周期 2π の周期関数であり, また任意の有限区間において区分的に滑らかであるとき, 各点に対して次の等式が成立する.

$$\frac{1}{2} [f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N \frac{e^{inx}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f(y) \frac{e^{-iny}}{\sqrt{2\pi}} dy$$

ここで, $f(x \pm 0)$ は ε を正の数として

$$f(x \pm 0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f(x \pm \varepsilon)$$

の極限値を表す. また, 区分的に滑らかとは, 閉区間 $[a, b]$ が有限個 n の区間 $a = a_0 < a_1 < a_2 < \cdots < a_n = b$ に分割でき, 各開区間 (a_j, a_{j+1}) ($j = 0, 1, 2, \dots, n-1$) において導関数 $f'(x)$ が連続であり, かつ $f'(a_j + 0)$ と $f'(a_j - 0)$ がともに有限確定値であることを意味する.

複素数値関数 $f(x)$ の実数部と虚数部について上の定理が成り立つから, 簡単のために $f(x)$ を実数値関数と考えても一般性を失わない. また,

$$f(y)e^{in(x-y)} = f(y)\cos[n(x-y)] + if(y)\sin[n(x-y)]$$

であり, $f(y)\cos[n(x-y)]$ と $f(y)\sin[n(x-y)]$ がそれぞれ n に関して偶関数と奇関数になっていることに留意すると, 上の定理を証明するためには, 次式を示せばよい.

$$\frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-N}^N \int_{-\pi}^{\pi} f(y)\cos[n(x-y)] dy \quad (8.8)$$

さらに,

$$\frac{1}{2} + \cos \theta + \cos 2\theta + \cdots + \cos N\theta = \frac{\sin\left[\frac{2N+1}{2}\theta\right]}{2\sin\frac{\theta}{2}} \quad (8.9)$$

であることを用いると, 次式を示せばよいことになる.

$$\frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} S_N \quad (8.10)$$

ただし,

$$S_N = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(y) \frac{\sin\left[\frac{2N+1}{2}(x-y)\right]}{2\sin\left[\frac{1}{2}(x-y)\right]} dy \quad (8.11)$$

式 (8.11) 右辺の被積分関数の分母が $y = x$ のとき 0 となるので, 以下のように処理する. 被積分関数は周期 2π の周期関数であるので, その積分範囲 $(-\pi, \pi)$ を $(-\pi+x, \pi+x)$ に変えても積分値は変わらない. したがって, S_N は次のように書ける.

$$S_N = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi+x}^x f(y) \frac{\sin\left[\frac{2N+1}{2}(x-y)\right]}{2\sin\left[\frac{1}{2}(x-y)\right]} dy + \frac{1}{\pi} \int_x^{\pi+x} f(y) \frac{\sin\left[\frac{2N+1}{2}(x-y)\right]}{2\sin\left[\frac{1}{2}(x-y)\right]} dy \quad (8.12)$$

一つ目の積分で $(x-y)/2 \rightarrow z$, 二つ目で $(y-x)/2 \rightarrow z$ の変数変換を行うと,

$$S_N = \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [f(x-2z) + f(x+2z)] \frac{\sin[(2N+1)z]}{\sin z} dz \quad (8.13)$$

ここで,

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin[(2N+1)x]}{\sin x} dx = \frac{\pi}{2} \quad (8.14)$$

であることを用いると,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ S_N - \frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)] \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [g^-(z) + g^+(z)] \sin[(2N+1)z] dz \quad (8.15)$$

となる. ただし,

$$g^{\pm}(z) = \frac{f(x \pm 2z) - f(x \pm 0)}{\sin z} \quad (8.16)$$

したがって, 式 (8.15) の右辺が 0 となれば定理が示されたことになるが, $f(x)$ の条件より $g^{\pm}(z)$ は区間 $(0, \frac{\pi}{2})$ において有界かつ有限個の点を除いて連続であるので, 次の Riemann-Lebesgue の定理を各連続区間に適用することにより, それは保証される.

Riemann–Lebesgue の定理

区間 (a, b) の有界な連続関数 $f(x)$ に対して,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) \sin(Nx) dx = 0$$

変数 x を $x + \frac{\pi}{N}$ に変換すると

$$\int_a^b f(x) \sin(Nx) dx = \int_{a-\frac{\pi}{N}}^{b-\frac{\pi}{N}} f\left(x + \frac{\pi}{N}\right) \sin\left[N\left(x + \frac{\pi}{N}\right)\right] dx = - \int_{a-\frac{\pi}{N}}^{b-\frac{\pi}{N}} f\left(x + \frac{\pi}{N}\right) \sin(Nx) dx$$

となるから,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \sin(Nx) dx &= -\frac{1}{2} \int_{a-\frac{\pi}{N}}^a f\left(x + \frac{\pi}{N}\right) \sin(Nx) dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_a^{b-\frac{\pi}{N}} \left[f(x) - f\left(x + \frac{\pi}{N}\right) \right] \sin(Nx) dx + \frac{1}{2} \int_{b-\frac{\pi}{N}}^b f(x) \sin(Nx) dx \end{aligned}$$

$f(x)$ は有界であるから右辺第 1, 3 項は $N \rightarrow \infty$ の極限で 0 となり, また $f(x)$ は連続関数であるから右辺第 2 項も $N \rightarrow \infty$ の極限で 0 となる.

これで, 区分的に滑らかな周期 $2l$ の関数に対して Fourier 級数展開 (8.7) が各点収束する⁷ことが示され, 安心してそれを使えるようになった. このように無限個の関数の重ね合わせで任意の関数を再現できる場合, その関数の組は**完備**であるという⁸. ところで, 式 (8.7) は次のように表現することもできる.

$$\frac{1}{2} [f(x+0) + f(x-0)] = \int_{-l}^l f(y) \delta(y-x) dy \quad (8.17)$$

ただし, $\delta(x)$ は次のように定義される関数である.

$$\delta(x) = \frac{1}{2l} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\pi x/l} \quad (8.18)$$

$\delta(x)$ は, $x \neq 0$ のときは常に 0 であるにもかかわらず積分値だけは 1 という, 奇妙な関数である. 物理学の分野で Dirac によって導入された関数なので, Dirac の δ 関数と呼ばれる (附録 B). 数学的に厳密に定義するには関数概念の拡張が必要となり, 数学を専門としない者にはややこしいが, 式 (8.18) のように表現できることを憶えておくと便利ことがある.

8.3 直交関数系

e^{inx} ($-\pi < x < \pi$) 以外にも便利な直交関数系はあるのだろうか?

区間 (a, b) において定義された正値をとる重み関数 $\rho(x)$ を用いて, 二つの複素数値関数 $f(x)$, $g(x)$ の重み付き内積 $(f, g)_\rho$ を次のように定義する.

$$(f, g)_\rho = \int_a^b \rho(x) f(x) \overline{g(x)} dx \quad (8.19)$$

さらに, 複素数値関数の列 $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$, \dots が次の条件を満たすとき, この関数列は $\rho(x)$ を重みとして区間 (a, b) において正規直交関数系をなすという.

$$(\varphi_m, \varphi_n)_\rho = \delta_{mn} \quad (8.20)$$

⁷ $f'(x)$ が区分的に滑らかな周期 2π の周期関数であれば, さらに絶対かつ一様収束することが示される.

⁸ 数学的に厳密な表現にはなっていない. 例えば, 複素指数関数 $\dots, e^{-2i\pi x/l}, e^{-i\pi x/l}, 1, e^{i\pi x/l}, e^{2i\pi x/l} \dots$ の場合, その中の何個かを取り除いても無限個であることに変わりはないが, もはや任意の関数を再現することはできなくなる. 任意の関数を再現できるようにちゃんと揃っているという意味を表しているのだろう.

上で考えた複素指数関数の場合, $\frac{e^{inx}}{\sqrt{2\pi}}$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) が 1 を重みとして区間 $(-\pi, \pi)$ で正規直交関数系をなしていることになる. 物理化学によく現れる正規直交関数系として, 区間 $(-1, 1)$ で $\rho(x) = 1$ の Legendre 多項式系:

$$\sqrt{\frac{1}{2}}P_0(x), \sqrt{\frac{3}{2}}P_1(x), \dots, \sqrt{\frac{2n+1}{2}}P_n(x), \dots$$

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

区間 $(-\infty, \infty)$ で $\rho(x) = e^{-x^2}$ の Hermite 多項式系:

$$\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} H_0(x), \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} H_1(x), \dots, \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!}} H_n(x), \dots$$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

がある.

以下では $\rho(x) = 1$ の場合に話を限り, 簡単のために内積記号に付けた添字 ρ を省略する. 関数列 $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ が完備な場合, 任意の関数は次のように展開できる.

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n \quad (8.21)$$

ただし,

$$c_n = (f, \varphi_n) \quad (8.22)$$

この場合, 式 (8.18) に対応して

$$\delta(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n \overline{\varphi_n} \quad (8.23)$$

と表現できる.

展開係数 c_n の組 $\{c_n\} = (c_1, c_2, \dots)$ の大きさを

$$(f, f) = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad (8.24)$$

とし, f と $g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n \varphi_n$ の内積から $\{c_n\}$ と $\{d_n\}$ の内積を

$$(\{c_n\}, \{d_n\}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \overline{d_n} \quad (8.25)$$

と定義すれば, $\{c_n\}$ は無限次元ベクトル空間 (Hilbert 空間) を構成し, それが区間 (a, b) 上の関数全体に対応していることになる.

練習問題

(38) 式 (7.10) が式 (8.2) のように書けることを示せ.

(39) 式 (8.9) を導け.

(40) 式 (8.11) 右辺の被積分関数が周期 2π の周期関数であることを示せ.

(41) 式 (8.9) を用いて式 (8.14) を導け.

(42) 式 (8.16) で定義される $g^{\pm}(x)$ が区間 $(0, \frac{\pi}{2})$ において有界かつ有限個の点を除いて連続であることを示せ.

(43) 次の (i), (ii) の関数 $f(x)$ を周期 2π の関数として Fourier 級数を求めよ.

(i) $f(x) = x$ ($-\pi < x < \pi$)

(ii) $f(x) = x^2$ ($-\pi < x < \pi$)

9 Fourier 変換

9.1 Fourier の積分定理

Fourier 級数を考えた区間を $(-\infty, \infty)$ に拡大するとどうなるか？

$\varepsilon = \pi/l$ として式 (8.7) を書き換えると次のようになる.

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varepsilon \frac{e^{inx\varepsilon}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/\varepsilon}^{\pi/\varepsilon} f(y) \frac{e^{-iny\varepsilon}}{\sqrt{2\pi}} dy \quad (9.1)$$

ここで,

$$g(\xi; x) = \frac{e^{i\xi x}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/\varepsilon}^{\pi/\varepsilon} f(y) \frac{e^{-i\xi y}}{\sqrt{2\pi}} dy \quad (9.2)$$

と置くと, 式 (9.1) は

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varepsilon g(n\varepsilon; x) \quad (9.3)$$

$l \rightarrow \infty$ ($\varepsilon \rightarrow 0$) の極限では

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi; x) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\xi x}}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(y) \frac{e^{-i\xi y}}{\sqrt{2\pi}} dy \right] d\xi \quad (9.4)$$

と書いても良さそうである. 区間 $(-\infty, \infty)$ 上の関数 $f(x)$ は, 式 (9.4) の y に関する積分が意味を持つようなものである必要があり, 次のように整理される.

Fourier の積分定理

区間 $(-\infty, \infty)$ 上の複素数値関数 $f(x)$ が, 任意の有限区間において区分的に滑らかであり, 条件:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < +\infty$$

を満たすとき, 次の等式が成立する.

$$\frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-N}^N \frac{e^{i\xi x}}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(y) \frac{e^{-i\xi y}}{\sqrt{2\pi}} dy \right] d\xi$$

Fourier 級数展開定理の場合と同様に

$$f(y)e^{i\xi(x-y)} = f(y) \cos[\xi(x-y)] + if(y) \sin[\xi(x-y)]$$

として, ξ の積分区間が $(-N, N)$ であるので, ξ に関して偶関数部分のみが寄与することに留意すると,

$$\frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_0^N \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \cos[\xi(x-y)] dy \right\} d\xi \quad (9.5)$$

を示せばよい.

式 (9.5) において y と ξ の積分順序は入れ換えられる⁹ ので

$$\begin{aligned} \int_0^N \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \cos[\xi(x-y)] dy \right\} d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \left\{ \int_0^N \cos[\xi(x-y)] d\xi \right\} dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \frac{\sin[N(x-y)]}{x-y} dy \end{aligned} \quad (9.6)$$

⁹複素数値関数 $f(x)$ が満たす条件により, 積分順序の入れ換えが可能なが示されるが, その証明は省略する.

式 (9.6) の最終式において, $y = x$ のとき分母が 0 となるので, 積分区間を $y = x$ で二つに分け, 区間 $(-\infty, x)$ において $x - y \rightarrow z$, 区間 (x, ∞) において $x - y \rightarrow -z$ の変換を行うと,

$$\frac{1}{2}[f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \left[\int_0^\infty f(x-z) \frac{\sin(Nz)}{z} dz + \int_0^\infty f(x+z) \frac{\sin(Nz)}{z} dz \right] \quad (9.7)$$

を示せばよいことになる. ここで,

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{x} dx = \lim_{A \rightarrow \infty} \int_0^A \frac{\sin x}{x} dx = \frac{\pi}{2} \quad (9.8)$$

であること [練習問題 (29)] を用いると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_0^A [g^-(z) + g^+(z)] \sin(Nz) dz + \frac{1}{\pi} \int_A^\infty [f(x-z) + f(x+z)] \frac{\sin(Nz)}{z} dz \\ - \frac{1}{\pi} [f(x+0) + f(x-0)] \int_A^\infty \frac{\sin(Nz)}{z} dz \end{aligned} \quad (9.9)$$

が $N \rightarrow \infty$, しかる後 $A \rightarrow \infty$ の極限で 0 になればよい. ただし,

$$g^\pm(z) = \frac{f(x \pm z) - f(x \pm 0)}{z} \quad (9.10)$$

である. Riemann-Lebesgue の定理より式 (9.9) の第 1 項は $N \rightarrow \infty$ の極限で 0 となる. また, $(-\infty, \infty)$ 上の $|f(x)|$ の積分が有界であるから $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$ であることと式 (9.8) より, $A \rightarrow \infty$ とすると第 2, 3 項も 0 となる.

9.2 Fourier 変換

Fourier の積分定理が成り立ったからどうしたの?

Fourier の積分定理で考えた条件を満たす関数の Fourier 像 $\hat{f}(\xi)$ を次式で定義する.

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty f(x) e^{-i\xi x} dx \quad (9.11)$$

関数から関数への線形写像 $f \mapsto \hat{f}$ を Fourier 変換と呼ぶ. Fourier の積分定理によれば,

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty \hat{f}(\xi) e^{i\xi x} d\xi \quad (9.12)$$

となり, 元の $f(x)$ に戻る. この逆写像 $\hat{f} \mapsto f$ も線形であり, Fourier 逆変換と呼ぶ.

元の関数 $f(x)$ を複素指数関数 (三角関数と同等) $e^{i\xi x}$ の重ね合わせとして表したとき, $\hat{f}(\xi)$ はその振幅 (強度) を表すことになる. 物理化学の分野では, ある量の時間変動あるいは空間分布の Fourier 像が実験で測定される場合があり, 測定量と元の量を結び付けるために Fourier 変換, Fourier 逆変換が頻繁に用いられる. その際, 元の量の数学的性質の吟味が甘いこともあるが, 結果の辻褄が合っていれば大丈夫ということにしている. しかし, 例外的な特異な挙動が起こっていても, それを見逃す危険性があるので, 考察対象としている量の数学的性質に対してもある程度の注意は払った方がよい. 具体的な例については次節で説明する.

$f(x)$ の導関数 $f'(x)$ も $f(x)$ と同様の性質を持つ場合, その像関数は, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$ であることに留意すると, $\hat{f}(\xi)$ を用いて次のように書ける.

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty f'(x) e^{-i\xi x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [f(x)e^{-i\xi x}]_{-\infty}^\infty + \frac{i\xi}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty f(x) e^{-i\xi x} dx = i\xi \hat{f}(\xi) \quad (9.13)$$

同様に, n 階までの導関数 $f^{(n)}(x)$ が $f(x)$ と同様の性質を持つ場合, その像関数は $(i\xi)^n \hat{f}(\xi)$ となる. したがって, 元の関数に対する微分演算が像関数では代数的演算となり, 微分方程式を解く際に便利ことがある.

また、式 (8.18) に対応して、 δ 関数に対して次の Fourier 表示が得られる。

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\xi x} d\xi \quad (9.14)$$

9.3 Fourier 変換の計算例

Fourier 像の具体的計算例は？

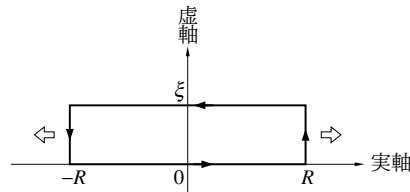
物理化学に現れる Fourier 変換の具体例を二つ示す。

$f(x) = e^{-x^2/2}$ (Gauss 関数)

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} e^{-i\xi x} dx = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x+i\xi)^2/2} dx = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R+i\xi}^{R+i\xi} e^{-z^2/2} dz$$

関数 $e^{-z^2/2}$ は全複素平面で正則であるので、Cauchy の定理（節 4）より、閉じた経路を一巡する積分は 0 となる。

$$\left(\int_{-R}^R + \int_R^{R+i\xi} + \int_{R+i\xi}^{-R+i\xi} + \int_{-R+i\xi}^{-R} \right) e^{-z^2/2} dz = 0$$



したがって

$$\int_{-R+i\xi}^{R+i\xi} e^{-z^2/2} dz = \left(\int_{-R}^R + \int_R^{R+i\xi} + \int_{-R+i\xi}^{-R} \right) e^{-z^2/2} dz$$

$R \rightarrow \infty$ とすると右辺の第 2, 3 項は因子 $e^{-R^2/2}$ によって 0 となるので、結局実軸上で積分すればよいことになる。

$$\hat{f}(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} dx = e^{-\xi^2/2}$$

ここで、次の定積分の値を用いた。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} dx = \sqrt{2\pi} \quad (9.15)$$

$f(x) = e^{-\alpha x} \sin(\omega x + \delta) \quad (x \geq 0)$
 $= 0 \quad (x < 0) \quad (\alpha > 0) \quad (\text{減衰振動})$

$$\begin{aligned} \hat{f}(\xi) &= \frac{e^{i\delta}}{2\sqrt{2\pi}i} \int_0^{\infty} e^{-(\alpha-i\omega+i\xi)x} dx - \frac{e^{-i\delta}}{2\sqrt{2\pi}i} \int_0^{\infty} e^{-(\alpha+i\omega+i\xi)x} dx \\ &= \frac{e^{i\delta}}{2\sqrt{2\pi}i(\alpha-i\omega+i\xi)} - \frac{e^{-i\delta}}{2\sqrt{2\pi}i(\alpha+i\omega+i\xi)} \\ &= \frac{(\alpha+i\xi) \sin \delta + \omega \cos \delta}{\sqrt{2\pi}[(\alpha+i\xi)^2 + \omega^2]} \end{aligned}$$

練習問題

(44) 式 (9.8) の定積分は次の様に考えて (広義) 積分することができる.

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \lim_{\alpha \rightarrow +0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} \frac{\sin x}{x} dx$$

これが $\frac{\pi}{2}$ となることを示せ.

(45) 式 (9.15) を示せ.

(46) 次の (i)~(iv) の関数 $f(x)$ の Fourier 像を求めよ.

(i) $f(x) = \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \quad (\alpha > 0)$

(ii) $f(x) = x e^{-\alpha x} \quad (x \geq 0)$
 $= 0 \quad (x < 0) \quad (\alpha > 0)$

(iii) $f(x) = e^{-\alpha|x|} \quad (\alpha > 0)$

(iv) $f(x) = 1 \quad (|x| \leq 1)$
 $= 0 \quad (|x| > 1)$

10 物理化学と Fourier 変換

物理化学の実験では、ある物理量の時間変化を周期関数の重ね合わせで表したときの各成分の強度（スペクトル）や、原子・分子の空間分布の Fourier 像を問題とすることが多く、Fourier 変換は非常に身近な存在である。この節では、三つの具体例を紹介する。

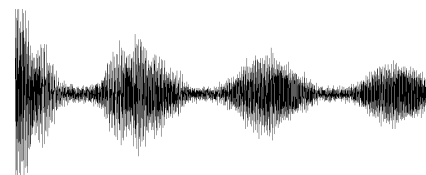
10.1 核磁気共鳴（NMR）

FT NMR の FT って何？

^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P のように、原子番号か質量数の何れかが奇数の原子核は磁気双極子モーメント¹⁰を持つ。これを核スピン（nuclear spin）と呼ぶ。そのような原子核を含む系に強力な外部磁場 \mathbf{B}_0 を加えると、 \mathbf{B}_0 の方向（ z 軸方向）に平行な核スピン成分（ z 成分）は z 軸方向に向きが揃い、巨視的な磁化ベクトルが誘起される。（ \mathbf{B}_0 を太字にしたのは 3 次元ベクトルであることを示すためである。）一方、 z 軸に垂直な核スピン成分（ xy 成分）は、 \mathbf{B}_0 の大きさ B_0 と原子核の種類によって決まる一定の角振動数 — Larmor 角振動数で回転しているらしい¹¹。ある一つの原子核には、外部磁場 \mathbf{B}_0 の他に、近接する原子団によって作り出される微弱な局所磁場も働くので、原子核の種類が同じであっても、分子内での位置によって Larmor 角振動数は若干異なってくる。その違いを検出し、分子構造に関する情報を得るのが核磁気共鳴（Nuclear Magnetic Resonance）法である。

外部磁場 \mathbf{B}_0 を加えただけでは、核スピンの xy 成分の回転運動の位相は原子核ごとにまちまちであるので、 xy 平面内に巨視的な回転磁化ベクトルが誘起されることはない。しかし、ある特殊な外部摂動磁場¹²を加えることによって、ある程度位相の揃った xy 成分を作り出すことができ、巨視的な回転磁化ベクトルが現れる。その回転磁化ベクトルによって発生する微弱な電磁波の角振動数は xy 成分の Larmor 角振動数に等しいので、その電磁波の角振動数を解析することにより、原子核の置かれた（磁氣的）環境、すなわち分子構造に関する情報を得ることができる。原子核の磁氣的環境と Larmor 角振動数の関係は有機化学で学ぶことにして、ここでは電磁波データと Larmor 角振動数の関係について説明する。

xy 平面内の回転磁化ベクトルによって発生した微弱な電磁波は、検出コイルに誘起される誘導電流として観測され、FID (Free Induction Decay) 信号と呼ばれる。例として、エチルベンゼンの ^1H の FID データを右に示す。原理的には、種々の Larmor 角振動数 ω_j を持つ減衰振動の重ね合わせである FID 信号 $f(t)$ を Fourier 変換して Larmor 角振動数に関する情報を得る。



$$f(t) = \sum_{j=1}^n A_j e^{-\alpha_j t} \sin(\omega_j t + \delta_j) \quad (t > 0) \quad (10.1)$$

節 9.3 で減衰振動の Fourier 像を求めたが、その結果を次のように整理する。

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty e^{-\alpha_j t} \sin(\omega_j t + \delta_j) e^{-i\omega t} dt = \frac{-ie^{i\delta_j}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\alpha_j - i(\omega - \omega_j)}{\alpha_j^2 + (\omega - \omega_j)^2} + \frac{ie^{-i\delta_j}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\alpha_j - i(\omega + \omega_j)}{\alpha_j^2 + (\omega + \omega_j)^2}$$

α_j に比べて $\omega \simeq \omega_j$ は非常に大きいので、第 2 項は 0 と見なすことができる。その場合、 $f(t)$ の Fourier 像 $\hat{f}(\omega)$ は次のように書ける。

$$\hat{f}(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} \sum_{j=1}^n e^{i(\delta_j - \pi/2)} A_j [L_a(\omega - \omega_j; \alpha_j) + iL_d(\omega - \omega_j; \alpha_j)] \quad (10.2)$$

¹⁰棒磁石のように N 極と S 極がある距離を隔てて存在する状態。

¹¹巨視的な磁石の場合、 z 軸方向を向いてしまうと、 xy 成分はなくなってしまうが、核スピンの場合、 z 成分と xy 成分は互いに独立な成分と考えなければならないようである。

¹²Larmor 角振動数を持つ、外部磁場 \mathbf{B}_0 に垂直方向の振動磁場。このような摂動磁場を加えると xy 成分の回転運動の位相が揃う理由については物理化学で学ぶはずである。

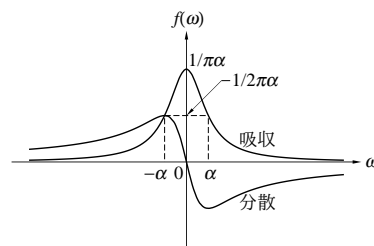
ここで、 $L_a(\omega; \alpha)$ と $L_d(\omega; \alpha)$ はそれぞれ Lorentz 型の吸収関数 (absorption) と分散関数 (dispersion) であり、次のように定義される。

$$L_a(\omega; \alpha) = \frac{1}{\pi} \frac{1/\alpha}{1 + \omega^2/\alpha^2}, \quad L_d(\omega; \alpha) = -\frac{1}{\pi} \frac{\omega/\alpha^2}{1 + \omega^2/\alpha^2} \quad (10.3)$$

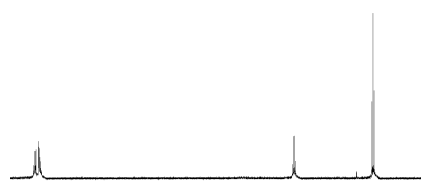
ただし、これらの関数は

$$\int_{-\infty}^{\infty} L_a(\omega; \alpha) d\omega = 1 \quad (10.4)$$

となるように規格化されている。 $L_a(\omega; \alpha)$ と $L_d(\omega; \alpha)$ を右上に示す。位相因子 $e^{i(\delta_j - \pi/2)}$ が 1 となるようにすると、式 (10.2) の実数部は吸収曲線を重ね合わせたものとなるが、実際目にする NMR スペクトルはそうになっている。



前頁に示したエチルベンゼンの FID データを Fourier 変換して得られた ^1H NMR スペクトルを右に示す。スペクトルにおいて、各吸収ピークの中心位置が Larmor 角振動数 ω_j に相当し、その面積は原子核の数に比例する。また、ピークの半値半幅は減衰速度 α_j に等しい。 α_j は分子の回転運動に関する情報を与え、分子運動が速い方が小さくなることが知られている。スペクトルの解釈については有機化学の講義で学ぶはずである。

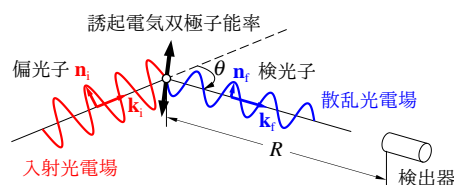


10.2 電磁波の散乱

散乱実験から何が分かるの？

電磁波あるいは粒子線が物質によって散乱される現象の中で、散乱体となる原子、原子団、あるいは分子の密度が低い系による可視光の弾性および準弾性散乱¹³は特に Rayleigh 散乱と呼ばれる。可視光の角振動数 $\sim 10^{15} \text{ sec}^{-1}$ は軌道電子の共鳴角振動数に比べて十分小さいので、入射光によって作られる振動電場の中に置かれた分子は分極し、入射光と同じ角振動数で振動する電気双極子能率が誘起される。これが 2 次光源となって入射方向とは異なる方向に光が散乱される。

実際の散乱実験では、入射光の断面形状と検出器のスリット形状によって規定される、ある散乱体積 V の中に存在する散乱体からの散乱光の総和が検出される。上の図に示したように、入射光と θ の角度をなす方向への散乱光の強度を $I(\theta)$ とする。 $I(\theta)$ は、散乱体積中に含まれる散乱体の総数と各散乱光の干渉によって決まり、散乱体 (分子) の空間分布に関する情報を与えてくれる。



散乱実験の幾何学的な条件から、問題を 1 次元に簡単化することはできないので、以下のように Fourier 変換を 3 次元に拡張する。三つの直交する座標軸、 x 軸、 y 軸、 z 軸によって構成される 3 次元直角座標系を考え、3 次元空間内の点を $\mathbf{r} = (x, y, z)$ で表す。太字の変数は、節 10.1 の外部磁場 \mathbf{B}_0 の場合と同様、3 次元ベクトルを表す。三つの変数 x, y, z に対応する変数をそれぞれ ξ_x, ξ_y, ξ_z とし、 $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ と表記する。また、二つの 3 次元ベクトル $\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}$ の内積を次のように表記する。

$$\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\xi} = x\xi_x + y\xi_y + z\xi_z \quad (10.5)$$

¹³ 散乱電磁波のエネルギー (角振動数) が入射電磁波と変わらない散乱を弾性散乱と呼ぶ。散乱体が液体あるいは気体の場合、不規則な密度あるいは濃度揺らぎによって変調を受け、散乱電磁波の角振動数は入射電磁波の角振動数を中心として分布を持つが、その分布形状を問題とする場合は特に準弾性散乱と呼ぶ。その場合、準弾性散乱光の積分強度が弾性散乱光強度に対応する。これに対し、Raman 散乱のように散乱体物質との相互作用によるエネルギー授受が行われ、散乱電磁波の角振動数がシフトするような散乱は非弾性散乱と呼ばれる。

\mathbf{r} を変数とする関数 $f(\mathbf{r})$ が

$$\int |f(\mathbf{r})| d\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x, y, z)| dx dy dz < +\infty \quad (10.6)$$

のとき, $f(\mathbf{r})$ の Fourier 変換 $\hat{f}(\boldsymbol{\xi})$ を次のように定義する.

$$\begin{aligned} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) &= (2\pi)^{-3/2} \int f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\xi}} d\mathbf{r} \\ &= (2\pi)^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y, z) e^{-i(x\xi_x + y\xi_y + z\xi_z)} dx dy dz \end{aligned} \quad (10.7)$$

同様に Fourier 逆変換を次のように定義する.

$$f(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) e^{i\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\xi}} d\boldsymbol{\xi} \quad (10.8)$$

数学的な準備が済んだので, 物理化学的な話に戻り, 密度関数 $\rho(\mathbf{r})$ — 単位体積当り含まれる分子の数について考えよう. これまで, 気体や液体などを連続体として考えることが多かったので, それらの密度というと, 単位体積当りの質量あるいは mol 数が思い浮かび, 系全体に渡って一定と考えてしまう. しかし, 気体や液体の微小部分を考えると, そこに含まれる分子の数は平均値の周りで揺らいでおり, $\rho(\mathbf{r})$ は \mathbf{r} によって異なる値をとる. 極端な話, 非常に小さなスケールで系を見た場合, ある場所に分子が存在しないこともある. これから分かるように, 系を観察したり記述したりするときの長さのスケールによって $\rho(\mathbf{r})$ の表現が異なってくる. 私達が日常体感できるスケールでは, 気体や液体は密度が一定の連続体でよいが, 系の微小部分と電磁波との相互作用を考える場合は, その不均一さが見えるようなスケールで $\rho(\mathbf{r})$ を表現する必要がある. N 個の分子が含まれる系で, 個々の分子の大きさを考える必要がない場合, $\rho(\mathbf{r})$ は次のように表現できる.

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (10.9)$$

ここで, \mathbf{r}_j ($j = 1, 2, \dots, N$) は j 番目の分子の位置を表し, $\delta(\mathbf{r})$ は次式のように定義される 3 次元の Dirac の δ 関数である.

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) \quad (10.10)$$

式 (10.9) を \mathbf{r} について積分すると, 確かに系に含まれる分子の数 N が得られる. 次に, このように定義された $\rho(\mathbf{r})$ の Fourier 像 $\hat{\rho}(\boldsymbol{\xi})$:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{\xi}) = (2\pi)^{-3/2} \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\xi}} d\mathbf{r} = (2\pi)^{-3/2} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{r}_j\cdot\boldsymbol{\xi}} \quad (10.11)$$

を用いて構造因子 $S(\boldsymbol{\xi})$ を次のように定義する.

$$S(\boldsymbol{\xi}) = (2\pi)^3 N^{-1} \langle \hat{\rho}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\hat{\rho}(\boldsymbol{\xi})} \rangle = (2\pi)^3 N^{-1} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \langle e^{-i(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})\cdot\boldsymbol{\xi}} \rangle \quad (10.12)$$

ここで, $\langle \dots \rangle$ は系に含まれる分子の位置に関する平衡平均を意味する. 気体や液体に関する物理量を平衡平均した結果は等方的¹⁴であるので, $S(\boldsymbol{\xi})$ は $\boldsymbol{\xi}$ の大きさ ξ が一定であれば $\boldsymbol{\xi}$ の方向には依存しない. したがって, S は ξ の関数 $S(\xi)$ となり, 気体や液体の構造を記述する重要な関数である.

電磁気学に従って $I(\theta)$ を計算すると,

$$I(\theta) \propto S(\xi) \quad (10.13)$$

となる. ただし, θ と ξ は次のように関係付けられる.

$$\xi = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \quad (10.14)$$

¹⁴直角座標系をどのような向きにとっても結果は変わらない.

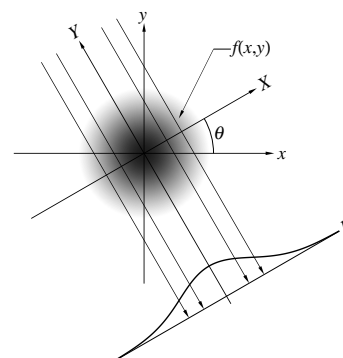
ここで、 λ は電磁波の波長である。この結果は、 $I(\theta)$ または $I(\xi)$ は、分子の空間分布を ξ で指定される周期関数に分解したとき、 $|\xi| = \xi$ の周期関数の振幅に関係する量であることを意味する。

以上の話は、私達が体感できる程度の長い時間に渡って散乱光を時間平均した結果に関するものであるが、非常に短い時間間隔で散乱光を測定した場合、その強度は時間とともに変化する。系の微小部分に含まれる分子数の変動にともない散乱光強度が変動するためである。その場合、散乱光の角振動数は入射光の角振動数を中心にして幅を持つが、その角振動数分布と散乱光強度の時間変化もまた Fourier 変換で関係付けられる（附録 C）。

10.3 透過率からの 2 次元像構成 — Radon 変換

CT ってどうやって作るの？

右図に示したように、 xy 平面上にある 2 次元の物体に電磁波をあて、その透過率を測定することを考えよう。図は、 x 軸と θ の角をなす X 軸に平行な直線 l 上での測定を表している。健康診断の X 線撮影を想像してもらえればよい。物体中のある部分による電磁波の吸収がその場所の密度分布 $f(x, y)$ に比例すると考えると、測定結果から $f(x, y)$ を l 上に投影した結果を知ることができる。すなわち、 X 軸に垂直（ Y 軸に平行）な直線に沿って $f(x, y)$ を積分した値を知ることができる。その値は X と θ の関数なので $g(X, \theta)$ (l 上に示したグラフ) と書くことにすると、 $g(X, \theta)$ と $f(x, y)$ に次の関係が成り立つ。



$$g(X, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \delta(x \cos \theta + y \sin \theta - X) dx dy \quad (10.15)$$

変換 $f(x, y) \mapsto g(X, \theta)$ は Radon 変換と呼ばれる。逆変換 $g(X, \theta) \mapsto f(x, y)$ を行えば、 θ を変えて測定した投影 $g(X, \theta)$ から $f(x, y)$ を知ることができる。

δ 関数の Fourier 表示 (9.4) を用いると、 $g(X, \theta)$ は次のように書ける。

$$g(X, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\xi \cos \theta, \xi \sin \theta) e^{i\xi X} d\xi \quad (10.16)$$

ここで、 $\hat{f}(\xi, \eta)$ は次のように定義される、 $f(x, y)$ の (2 次元) Fourier 像である。

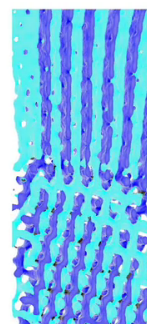
$$\hat{f}(\xi, \eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-i\xi x} e^{-i\eta y} dx dy \quad (10.17)$$

式 (10.16) の両辺を X について Fourier 変換すると、 $\hat{f}(\xi \cos \theta, \xi \sin \theta)$ は次のように書かれる。

$$\hat{f}(\xi \cos \theta, \xi \sin \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(X, \theta) e^{-i\xi X} dX \right] \quad (10.18)$$

したがって、ある θ における投影 $g(X, \theta)$ を X について Fourier 変換して $\hat{f}(\xi \cos \theta, \xi \sin \theta)$ を求め、次に異なる θ の結果を総合して $\hat{f}(\xi, \eta)$ を求め、最後に $\hat{f}(\xi, \eta)$ を Fourier 逆変換することによって、原理的には $f(x, y)$ を決定することができる。

3 次元の物体 $f(x, y, z)$ の 2 次元平面への投影図から、まず z がある値 z_0 のときの断面図（断面の密度分布） $f(x, y, z_0)$ を上の手順で求め、次に z_0 の値が異なる断面図をつなぐことで、 $f(x, y, z)$ を構成することができる。このような手法は、X 線を用いた非破壊検査法 — CT [コンピュータ断層撮影, Computerized (あるいは Computed) Tomography] として実用化され、医療診断を始め多くの領域で利用されている。さらに、電子顕微鏡を用いた CT では、化学材料のナノ・スケールの構造解析が可能となる。右図はその方法を用いて高分子材料の複雑な微細構造を再現したものである [V. H. Mareau et al., *Macromolecules*, **40**, 9032 (2007)].



練習問題

(47) 式 (10.4) を示せ.

(48) 3次元の Fourier 変換 (10.7) において, $f(\mathbf{r})$ が $r = |\mathbf{r}|$ のみの関数 [$f(\mathbf{r}) = f(r)$] であるとき, $\hat{f}(\boldsymbol{\xi})$ も $\xi = |\boldsymbol{\xi}|$ のみの関数 [$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \hat{f}(\xi)$] となることを示せ.

11 Laplace 変換

「Fourier 級数・変換だけでうんざりなので、もう結構」という気持ちは分かるが、あと一つ、Fourier 変換の親戚筋に当る Laplace 変換を紹介する。

11.1 Laplace 変換の定義

Fourier 変換の他に有用な積分変換は？

Fourier 変換の有難みを実感できていないと思うが、仮に有難いとして、それが適用できる関数 $f(x)$ は $(-\infty, \infty)$ 上の $|f(x)|$ の積分が有界であるという条件を満たす必要があり、かなり限定される。そこで、条件を緩和した積分変換である Laplace 変換を次のように定義する。

Laplace 変換

区間 $(-\infty, \infty)$ 上の複素数値関数 $f(x)$ は次の二つ条件を満たす。

- (i) 任意の有限区間において区分的に滑らかである。
- (ii) 区間 (α, β) に含まれる任意の ξ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi x} |f(x)| dx < +\infty$$

が成り立つような α, β が存在する。

このとき、 $\zeta = \xi + i\eta$ ($\alpha < \xi < \beta$) に対して

$$\tilde{f}(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\zeta x} f(x) dx \quad (11.1)$$

は収束し、かつ

$$\frac{1}{2} [f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\eta}^{\xi+i\eta} e^{\zeta x} \tilde{f}(\zeta) d\zeta \quad (11.2)$$

が成り立つ。

この結果は Fourier の積分定理から直ちに導かれる。

$$|\tilde{f}(\zeta)| = \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi+i\eta)x} f(x) dx \right| \leq \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi x} |e^{-i\eta x} f(x)| dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi x} |f(x)| dx$$

であるので、条件 (ii) より $\tilde{f}(\zeta)$ は収束する。 $\alpha < \xi < \beta$ のとき、関数 $e^{-\xi x} f(x)$ に対して Fourier の積分定理が適用できるので、

$$\frac{1}{2} e^{-\xi x} [f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-N}^N \frac{e^{i\eta x}}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi y} f(y) \frac{e^{-i\eta y}}{\sqrt{2\pi}} dy \right] d\eta$$

両辺に $e^{\xi x}$ を乗じると

$$\frac{1}{2} [f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-N}^N \frac{e^{\zeta x}}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(y) \frac{e^{-\zeta y}}{\sqrt{2\pi}} dy \right] d\eta$$

さらに、 ξ は固定されているので $d\zeta = i d\eta$ となり、

$$\frac{1}{2} [f(x+0) + f(x-0)] = \lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\eta}^{\xi+i\eta} e^{\zeta x} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(y) e^{-\zeta y} dy \right] d\zeta \quad (11.3)$$

関数 $f(x)$ として

$$f(x) = 0 \quad (x < 0)$$

を考える場合、 $\beta = \infty$ とすることができる。物理化学の問題で Laplace 変換を用いるのは、時刻 $t = 0$ にある値（初期値）をとる物理量が t とともにどのように変化するかを考える場合が多いので、Laplace 変換 (11.1) と逆 Laplace 変換 (11.2) は次の形で定義されることが多い。

Laplace 変換（普通の定義）

区間 $[0, \infty)$ 上の任意の有限区間において区分的に滑らかな複素数値関数 $f(t)$ に対して、

$$\tilde{f}(p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt \quad (p = \xi + i\eta) \quad (11.4)$$

が $\text{Re } p = \xi > \alpha$ で収束するなら、

$$\frac{1}{2} [f(t+0) + f(t-0)] = \lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\eta}^{\xi+i\eta} e^{pt} \tilde{f}(p) dp \quad (11.5)$$

Laplace 像 \tilde{f} の変数を p で表すことが多いので、それに従った。ある $\xi = \text{Re } p$ に対して式 (11.4) の積分が収束すれば、 $\text{Re } p' = \xi' \geq \xi$ であるすべての p' に対しても積分は収束する。一方、ある $\xi = \text{Re } p$ に対しての積分が発散すれば、 $\text{Re } p' = \xi' \leq \xi$ であるすべての p' に対しても積分は発散する。したがって、積分の収束と発散の境界に対応する実数 a が存在するが、それを Laplace 変換の絶対収束軸あるいは絶対収束の横座標と呼ぶ。また、証明は省略するが、 $\tilde{f}(p)$ は $\text{Re } p > a$ で正則な関数である。

定義より $f \mapsto \tilde{f}$, $\tilde{f} \mapsto f$ はともに線形写像であり、それを \mathcal{L} , \mathcal{L}^{-1} と表記することが多い。すなわち、

$$\tilde{f}(p) = \mathcal{L}[f(t)](p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt \quad (11.6)$$

$$\frac{1}{2} [f(t+0) + f(t-0)] = \mathcal{L}^{-1}[\tilde{f}(p)](t) = \lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\eta}^{\xi+i\eta} e^{pt} \tilde{f}(p) dp \quad (11.7)$$

11.2 Laplace 変換の性質

で、Laplace 変換は便利なの？

Laplace 変換は以下のような性質を持つので、後に示すように、微分方程式の解を考える上で有用である。

性質 1: $\mathcal{L}[f'(t)](p) = p\tilde{f}(p) - f(0)$

$$\int_0^{\infty} e^{-pt} f'(t) dt = [e^{-pt} f(t)]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} (-p)e^{-pt} f(t) dt$$

$f(t)$ の Laplace 変換が存在すれば、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |e^{-pt} f(t)| = 0$$

であるから、性質 1 が示される。

性質 2: $\mathcal{L}\left[\int_0^t f(s) ds\right](p) = \frac{\tilde{f}(p)}{p}$

$f(t)$ の Laplace 変換が存在するとき、関数 $g(t)$ を

$$g(t) = \int_0^t f(s) ds$$

のように定義すると、 $g'(t) = f(t)$ で $g(0) = 0$ 。この $g(t)$ も性質 1 を持つので、性質 2 が示される。

性質 3: $\mathcal{L}\left[\int_0^t f(t-s)g(s)ds\right](p) = \tilde{f}(p)\tilde{g}(p)$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\int_0^t f(t-s)g(s)ds\right](p) &= \int_0^\infty e^{-pt}\left[\int_0^t f(t-s)g(s)ds\right]dt \\ &= \int_0^\infty \left[\int_0^t e^{-p(t-s)}f(t-s)e^{-ps}g(s)ds\right]dt\end{aligned}$$

$f(t)$, $g(t)$ の Laplace 変換が存在すれば, それらの絶対座標軸の大きい方を a とすると $\operatorname{Re} p > a$ の領域で被積分関数の絶対値は積分可能であり, s , t の積分の順序を入れ換えることができる.

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\int_0^t f(t-s)g(s)ds\right](p) &= \int_0^\infty \left[\int_s^\infty e^{-p(t-s)}f(t-s)dt\right]e^{-ps}g(s)ds \\ &= \int_0^\infty e^{-pt}f(t)dt \int_0^\infty e^{-ps}g(s)ds \\ &= \tilde{f}(p)\tilde{g}(p)\end{aligned}$$

この形の積分はたたみ込みと呼ばれる.

性質 1 を用いると, 例えば次のような線形非同時微分方程式の初期値問題を機械的に解くことができる.

$$f''(t) + k^2 f(t) = g(t)$$

両辺を Laplace 変換すると,

$$p^2 \tilde{f}(p) - f'(0) - pf(0) + k^2 \tilde{f}(p) = \tilde{g}(p)$$

これを $\tilde{f}(p)$ について解くと,

$$\tilde{f}(p) = \frac{\tilde{g}(p) - f'(0) - pf(0)}{p^2 + k^2}$$

これを Laplace 逆変換したものが解である. 多くの場合, 次に示す変換公式を利用することが多い. 私が学生時代は「だから Laplace 変換は便利だ」と教えられた. が, 今時は Maple などの数式処理ソフトウェアを使うとあっという間に解を見付けてくれる. とは言え, Laplace 変換の数学的仕組みを知っておくのも教養の一つとして悪くない.

11.3 Laplace 変換の計算例

Laplace 変換の具体的計算例は?

例 1: $\mathcal{L}[h(t)](p) = \frac{1}{p}$ [$h(t)$ は式 (B.6) で定義される Heaviside 関数, $\operatorname{Re} p > 0$]

$$\mathcal{L}[h(t)](p) = \int_0^\infty e^{-pt} dt = \left[-\frac{e^{-pt}}{p}\right]_0^\infty = \frac{1}{p}$$

例 2: $\mathcal{L}[h(t)t^{\alpha-1}](p) = \frac{\Gamma(\alpha)}{p^\alpha}$ ($\alpha > 0$ であり, $\operatorname{Re} p > 0$)

ただし, $\Gamma(\alpha)$ は

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty x^{\alpha-1}e^{-x}dx$$

で定義される **Euler のガンマ関数**であり, $\alpha = n$ (自然数) のとき $\Gamma(n) = (n-1)!$ である.

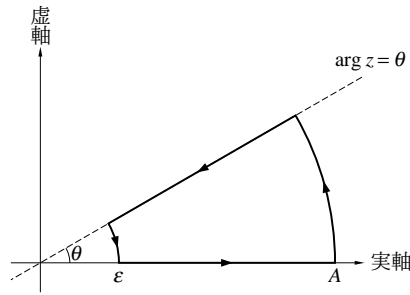
$p = \xi$ (実数) の場合,

$$\mathcal{L}[h(t) t^{\alpha-1}](p) = \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{-\xi t} dt = \frac{1}{\xi^\alpha} \int_0^\infty (\xi t)^{\alpha-1} e^{-\xi t} d(\xi t) = \frac{\Gamma(\alpha)}{\xi^\alpha}$$

p が複素数の場合, $\frac{1}{p^\alpha}$ は一般に多価関数となるので (節 3.7), p が実数のときに $\frac{1}{p^\alpha}$ も実数となる分枝を選ぶ. すなわち, $\arg p = \theta$ ($0 \leq \theta < 2\pi$) に $\arg \frac{1}{p^\alpha} = -\alpha\theta$ を対応させる. p の極座標表示を $p = re^{i\theta}$ と書くと, $\operatorname{Re} p > 0$ より $0 \leq \theta < \frac{\pi}{2}$, $\frac{3\pi}{2} < \theta < 2\pi$ であり,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[h(t) t^{\alpha-1}](p) &= \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{-pt} dt \\ &= \frac{1}{p^\alpha} \int_0^\infty (pt)^{\alpha-1} e^{-pt} p dt \\ &= \frac{1}{p^\alpha} \int_0^\infty (e^{i\theta} t)^{\alpha-1} e^{-e^{i\theta} t} e^{i\theta} dt \\ &= \frac{1}{p^\alpha} \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ A \rightarrow \infty}} \int_{\varepsilon e^{i\theta}}^{A e^{i\theta}} z^{\alpha-1} e^{-z} dz \end{aligned}$$

ただし, $\arg z = \theta$ の直線上で積分を行う.



$z^{\alpha-1} e^{-z}$ は $\operatorname{Re} z > 0$ で正則であるから, Cauchy の定理 (節 4) より,

$$\left(\int_\varepsilon^A + \int_A^{A e^{i\theta}} + \int_{A e^{i\theta}}^{\varepsilon e^{i\theta}} + \int_{\varepsilon e^{i\theta}}^\varepsilon \right) z^{\alpha-1} e^{-z} dz = 0$$

$\varepsilon \rightarrow 0$ の極限で第 4 項が 0 に収束し, 上記の θ の範囲では, $A \rightarrow \infty$ の極限で第 2 項が 0 に収束するので, 結局,

$$\mathcal{L}[h(t) t^{\alpha-1}](p) = \frac{1}{p^\alpha} \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ A \rightarrow \infty}} \int_\varepsilon^A z^{\alpha-1} e^{-z} dz = \frac{\Gamma(\alpha)}{p^\alpha}$$

練習問題

(49) $\mathcal{L}[e^{\lambda t} f(t)](p) = \tilde{f}(p - \lambda)$ となることを示せ.

(50) $\mathcal{L}[\sin(\omega t)](p)$ を計算せよ.

(51) $\mathcal{L}[\sinh(\omega t)](p)$ を計算せよ.

(52) $\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{p}{(p+1)^3}\right](t)$ を計算せよ.

(53) 線形常微分方程式 $f''(t) - 4f'(t) + 5f(t) = 0$ の解を初期条件 $f(0)$, $f'(0)$ を用いて表せ.

12 Fourier 変換と Laplace 変換の応用

節 7 で考えた熱方程式と波動方程式を, Fourier 変換と Laplace 変換を利用して解いてみる. なお, 二つの変換の対象となる関数を考えるので, x , t の区間はそれぞれ $(-\infty, \infty)$, $[0, \infty)$ である.

12.1 熱方程式

12.1.1 熱方程式の基本解

節 7.2 でも述べたように熱方程式 (7.6) の解は重ね合わせが可能である. $t = 0$ のときに $\delta(x - x_0)$ となる特解を $G(x, t|x_0, 0)$:

$$G(x, 0|x_0, 0) = \delta(x - x_0) \quad (12.1)$$

とすると, それを重ね合わせた

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, t|x_0, 0) f_0(x_0) dx_0 \quad (12.2)$$

は与えられた初期条件 $f(x, 0) = f_0(x)$ に対する解になっている. したがって, そのように都合のよい $G(x, t|x_0, 0)$ を見付けることができれば, 線形偏微分方程式は解けたことになるので, $G(x, t|x_0, 0)$ は基本解と呼ばれる.

12.1.2 解法 1

式 (7.6) を, x について Fourier 変換, t について Laplace 変換すると, 次のようになる.

$$pF(\xi, p) - \hat{f}(\xi, 0) = -D\xi^2 F(\xi, p) \quad (12.3)$$

ただし, $F(\xi, p)$ は $f(x, t)$ を x について Fourier 変換, t について Laplace 変換したものである. また, $\hat{f}(\xi, 0)$ は $f(x, 0)$ を Fourier 変換したものであり, $f(x, 0) = \delta(x - x_0)$ の場合, 次のように書かれる.

$$\hat{f}(\xi, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) e^{-i\xi x} dx = \frac{e^{-i\xi x_0}}{\sqrt{2\pi}} \quad (12.4)$$

式 (12.3), 式 (12.4) より, $F(\xi, p)$ は簡単に計算でき, 次のようになる.

$$F(\xi, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-i\xi x_0}}{p + D\xi^2} \quad (12.5)$$

これが $G(x, t|x_0, 0)$ を x について Fourier 変換, t について Laplace 変換したものということになる. したがって, これを Fourier 逆変換, Laplace 逆変換すればよいが, 先ず Laplace 逆変換すると

$$\hat{G}(\xi, t|x_0, 0) = \frac{e^{-Dt\xi^2 - i\xi x_0}}{\sqrt{2\pi}} \quad (12.6)$$

ただし, 節 11.3 の例 1 と練習問題 (49) の結果を用いた. さらに, Fourier 逆変換すると, 望む結果が得られる.

$$G(x, t|x_0, 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt\xi^2 - i\xi x_0} e^{i\xi x} d\xi = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-(x-x_0)^2/4Dt} \quad (12.7)$$

この結果は, $t = 0$ のときに $x = x_0$ に集中していたエネルギーあるいは質量が拡散していく様子を表している.

12.1.3 解法 2

Fourier 変換, Laplace 変換を用いない解法も結構面白い. 式 (7.6) の形式解は次のように書くことができる.

$$f(x, t) = e^{t\mathcal{D}} f(x, 0) \quad (12.8)$$

ここで, $e^{t\mathcal{D}}$ は次のように定義される演算子であり, 時間発展演算子 (time-shift operator) と呼ばれる.

$$e^{t\mathcal{D}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{D})^n}{n!} \quad (12.9)$$

この形式解 (12.8) が拡散方程式を満足することは,

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{t\mathcal{D}} = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n \mathcal{D}^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{n-1} \mathcal{D}^n}{(n-1)!} = \mathcal{D} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{D})^n}{n!} = \mathcal{D} e^{t\mathcal{D}} \quad (12.10)$$

より明らかである.

δ 関数の Fourier 表示 (9.14) を用いると, 初期条件は次のように書ける.

$$f(x, 0) = \delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\xi(x-x_0)} d\xi \quad (12.11)$$

これを, 形式解に代入すると,

$$f(x, t) = e^{t\mathcal{D}} f(x, 0) = \frac{1}{2\pi} e^{t\mathcal{D}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\xi(x-x_0)} d\xi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{t\mathcal{D}} e^{-i\xi x}) e^{i\xi x_0} d\xi \quad (12.12)$$

ここで,

$$e^{t\mathcal{D}} e^{-i\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n \mathcal{D}^n}{n!} e^{-i\xi x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-Dt\xi^2)^n}{n!} e^{-i\xi x} = e^{-Dt\xi^2} e^{-i\xi x} \quad (12.13)$$

したがって,

$$f(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt\xi^2 + i\xi x_0} e^{-i\xi x} d\xi \quad (12.14)$$

となり, 式 (12.7) に一致する.

12.1.4 解法 3

中途半端に Laplace 変換だけを利用する解法も一寸面白い. 式 (7.6) を Laplace 変換すると,

$$p\tilde{f}(x, p) - f(x, 0) = \mathcal{D}\tilde{f}(x, p) \quad (12.15)$$

これを, $\tilde{f}(x, p)$ について形式的に解くと,

$$\tilde{f}(x, p) = \frac{1}{p - \mathcal{D}} f(x, 0) \quad (12.16)$$

ここで, 演算子 $\frac{1}{p - \mathcal{D}}$ は, $e^{t\mathcal{D}}$ の場合と同様, 次のような展開系で定義され则认为る.

$$\frac{1}{p - \mathcal{D}} = \sum_{n=0}^{\infty} p^{-1} (p^{-1} \mathcal{D})^n \quad (12.17)$$

式 (12.11) と式 (12.17) を式 (12.16) に代入して整理すると,

$$\tilde{f}(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\xi(x-x_0)}}{p + D\xi^2} d\xi \quad (12.18)$$

これを Laplace 逆変換すると式 (12.14) が得られる. また, 式 (12.16) を形式的に Laplace 逆変換すると式 (12.8) が得られる.

12.2 波動方程式

初期条件が[§]

$$f(x, 0) = f_0(x), \quad \left. \frac{\partial}{\partial t} f(x, t) \right|_{t=0} = g(x) \quad (12.19)$$

で与えられたときの波動方程式 (7.19) の解について考える. 熱方程式のときと同様, 式 (7.19) を, x について Fourier 変換, t について Laplace 変換すると, 次のようになる.

$$p^2 F(\xi, p) - \hat{g}(\xi) - p \hat{f}_0(\xi) = -v^2 \xi^2 F(\xi, p) \quad (12.20)$$

ここで, $F(\xi, p)$ は $f(x, t)$ を x について Fourier 変換, t について Laplace 変換したもの, $\hat{g}(\xi)$ と $\hat{f}_0(\xi)$ はそれぞれ $g(x)$ と $f_0(x)$ の Fourier 像である. 式 (12.20) を $F(\xi, p)$ について解くと,

$$\begin{aligned} F(\xi, p) &= \frac{p \hat{f}_0(\xi) + \hat{g}(\xi)}{p^2 + v^2 \xi^2} \\ &= \frac{\hat{f}_0(\xi)}{2} \left[\frac{1}{p + iv\xi} + \frac{1}{p - iv\xi} \right] - \frac{\hat{g}(\xi)}{2iv\xi} \left[\frac{1}{p + iv\xi} - \frac{1}{p - iv\xi} \right] \end{aligned} \quad (12.21)$$

これを Laplace 逆変換すると,

$$\hat{f}(\xi, t) = \frac{1}{2} (e^{-ivt\xi} + e^{ivt\xi}) \hat{f}_0(\xi) - \frac{1}{2iv\xi} (e^{-ivt\xi} - e^{ivt\xi}) \hat{g}(\xi) \quad (12.22)$$

各項を Fourier 逆変換すると,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} (e^{-ivt\xi} + e^{ivt\xi}) \hat{f}_0(\xi) e^{i\xi x} d\xi = \frac{1}{2} [f_0(x - vt) + f_0(x + vt)] \quad (12.23)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2iv\xi} (e^{-ivt\xi} - e^{ivt\xi}) \hat{g}(\xi) e^{i\xi x} d\xi = \frac{1}{2v} \int_{x+vt}^{x-vt} g(y) dy \quad (12.24)$$

となるので, 解は次のように書ける.

$$f(x, t) = \frac{1}{2} [f_0(x - vt) + f_0(x + vt)] + \frac{1}{2v} \int_{x-vt}^{x+vt} g(y) dy \quad (12.25)$$

$t = 0$ のときに弦が静止している場合 [$g(x) = 0$], 初期波形 $f_0(x)$ の振幅を半分にした波が[§], 波形を保って, 速さ v で正負両方向に伝播していくことが分かる. 式 (12.25) の結果は Stokes の波動公式と呼ばれる.

練習問題

(54) 節 9.3 の Gauss 関数の Fourier 変換を参考にして, 式 (12.7) の最終表記を導け.

(55) 式 (12.18) を導け.

(56) 式 (12.23) を導け.

(57) 式 (12.24) を導け.

A 多変数関数の偏微分と全微分

簡単のため、実2変数関数を例に選ぶ。本質的なことは、2変数関数で尽きており、熱力学を含む物理化学に現れる多くの関係式も2変数で十分である。また、2変数関数は3次元空間内の曲面として直観的な幾何学イメージを得ることができるが、3変数以上の幾何学的イメージとなると常人の能力を超えている。

2個の互いに独立な実変数 x, y の1価関数 $f(x, y)$ の偏導関数 $\frac{\partial}{\partial x}f(x, y), \frac{\partial}{\partial y}f(x, y)$ をそれぞれ次のように定義する。

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}f(x, y) &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x} \\ \frac{\partial}{\partial y}f(x, y) &= \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y}\end{aligned}$$

この二つの偏導関数が存在する時、 x, y の無限小増分 dx, dy によって生じる f の無限小増分 df は

$$df = \left[\frac{\partial}{\partial x}f(x, y) \right] dx + \left[\frac{\partial}{\partial y}f(x, y) \right] dy \quad (\text{A.1})$$

と書け、これを f の全微分と呼ぶ。3次元直角座標系 (x, y, z) 内の曲面 $z = f(x, y)$ 上の点 (x_0, y_0, z_0) [$z_0 = f(x_0, y_0)$] における接平面の方程式が

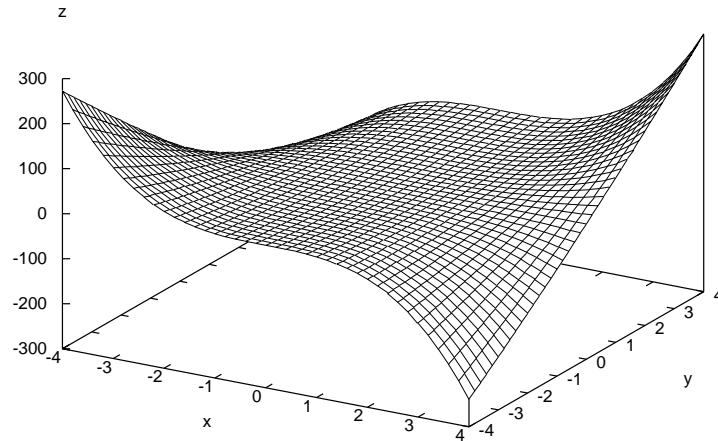
$$z - z_0 = \left[\frac{\partial}{\partial x}f(x, y) \right] (x - x_0) + \left[\frac{\partial}{\partial y}f(x, y) \right] (y - y_0) \quad (\text{A.2})$$

であることを思い出せば、式 (A.1) の全微分の意味は自明である。

例として

$$f(x, y) = x^3y + y^2$$

を考えると、曲面 $z = f(x, y)$ は次のようになる。



曲面上の網目は、平面 $x = \text{const.}$, $y = \text{const.}$ と曲面の交線を表す。 $\frac{\partial}{\partial x}f(x, y)$ は平面 $y = \text{const.}$ との交線の接線の傾きを、 $\frac{\partial}{\partial y}f(x, y)$ は平面 $x = \text{const.}$ との交線の接線の傾きを表す。また、接平面 (A.2) は点 (x_0, y_0) における2本の接線を含む平面である。定義からも明らかなように、二つの偏導関数は y あるいは x を定数と見なして1変数関数の導関数を計算すればよいから、今の場合

$$\frac{\partial}{\partial x}f(x, y) = 3x^2y, \quad \frac{\partial}{\partial y}f(x, y) = x^3 + 2y$$

B Dirac の δ 関数

δ 関数は次の性質を持つ無限回微分可能関数として定義される.

$$\delta(x) = 0 \quad \text{if } x \neq 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (\text{B.2})$$

この δ 関数は Dirac によって導入されたものであり, 確率分布などの分布が原点に集中した状態を表す関数として, 物理的には受け入れ易いが, その数学的基礎が確立されたのは Schwartz によって超関数 (distribution) が導入されてからであり, かなり後のことである.

ややこしい話はやめて, とりあえず, 規格化されたガウス分布 $(1/\epsilon\sqrt{\pi})e^{-x^2/\epsilon^2}$ の $\epsilon \rightarrow 0$ の極限関数:

$$\delta(x) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-x^2/\epsilon^2}}{\epsilon\sqrt{\pi}} \quad (\text{B.3})$$

と考えて実用上問題はない.

以上の定義からも予想されるように, δ 関数は普通の関数とは異なり, 他の関数との積の積分を考える場合に意味を持つ. 例えば, 上の定義から明らかのように,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a) \quad (\text{B.4})$$

また, その導関数 $\delta'(x)$ も

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x) dx = [f(x) \delta(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x) \delta(x) dx = -f'(0) \quad (\text{B.5})$$

のように超関数の意味での導関数である.

これも余り普通ではない unit step (Heaviside) 関数 $h(x)$:

$$\begin{aligned} h(x) &= 1 & \text{for } x > 0 \\ &= 0 & \text{for } x < 0 \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

とは次の関係で結びつけられる.

$$h(x) = \int_{-\infty}^x \delta(x) dx \quad \text{or} \quad h'(x) = \delta(x) \quad (\text{B.7})$$

C Wiener–Khinchin の定理

時間 t ($0 \leq t \leq T$) の経過に伴い、ランダムに変動する複素数値関数 $\psi(t)$ の強度スペクトルを以下のよう
に定義する。 $\psi(t)$ の Fourier 展開を次のように書く。

$$\psi(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{i\omega_n t} \quad (\text{C.1})$$

角振動数 ω_n 、振幅 a_n はそれぞれ次のように定義される。

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{T} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (\text{C.2})$$

$$a_n = \frac{1}{T} \int_0^T \psi(t) e^{-i\omega_n t} dt \quad (\text{C.3})$$

角振動数 ω における単位角振動数当りの強度—強度スペクトル（スペクトル密度） $I(\omega)$ を次のように定義
する。

$$I(\omega) \Delta\omega = \sum_{\substack{n \\ 0 \leq \omega_n - \omega < \Delta\omega}} \langle |a_n|^2 \rangle$$

$\omega \leq \omega_n < \omega + \Delta\omega$ の領域に含まれる振動成分の数は $T\Delta\omega/2\pi$ であり、 $T \rightarrow \infty$ かつ $\Delta\omega \rightarrow 0$ の極限を考え
ると、 $\langle |a_n|^2 \rangle$ は ω ($n = T\omega/2\pi$) の連続関数と見なせる。 すなわち、

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi} \langle |a_n|^2 \rangle \quad (n = T\omega/2\pi) \quad (\text{C.4})$$

式 (C.3) より、 $\langle |a_n|^2 \rangle$ は次のように書かれる。

$$\langle |a_n|^2 \rangle = \frac{1}{T^2} \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 e^{-i\omega_n(t_1 - t_2)} \langle \psi(t_1) \overline{\psi(t_2)} \rangle \quad (\text{C.5})$$

$\langle \psi(t_1) \overline{\psi(t_2)} \rangle$ が $t_2 - t_1$ のみの関数となる定常確率過程の場合、

$$\langle \psi(t_1) \overline{\psi(t_2)} \rangle = \langle \psi(0) \overline{\psi(t_2 - t_1)} \rangle \equiv C(t_2 - t_1) \quad (\text{C.6})$$

で定義される $\psi(t)$ の時間相関関数 $C(t)$ を用いて $\langle |a_n|^2 \rangle$ は次のように書ける¹⁵。

$$\langle |a_n|^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_{-T}^T C(t) e^{i\omega_n t} dt - \frac{1}{T^2} \int_0^T \text{Re}[C(t) e^{i\omega_n t}] dt \quad (\text{C.7})$$

$T \rightarrow \infty$ の極限において二つの積分が有限な値に収束するならば、式 (C.7) を式 (C.4) に代入して、次の
結果を得る。

$$I(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C(t) e^{i\omega t} dt \quad (\text{C.8})$$

¹⁵

$$\begin{aligned} \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 f(t_2 - t_1) &= \int_0^T dt_1 \left(\int_0^{t_1} dt_2 + \int_{t_1}^T dt_2 \right) f(t_2 - t_1) \\ &= \int_0^T dt_1 \left(\int_{-t_1}^0 dt + \int_0^{T-t_1} dt \right) f(t) = \int_0^T (T-t) [f(-t) + f(t)] dt \\ &= T \int_{-T}^T f(t) dt - \int_0^T t [f(t) + f(-t)] dt \end{aligned}$$