化学工学演習 I (笠原担当分)

2021 年 7 月 30 日

目次

第 1 章

常微分方程式入門

1.1 微分方程式とは

皆さんは既に物理学の講義等でニュートンの運動方程式を学んでいることと思う．例えば，バネ定数 k のバネに繋がれた球の位置を $x(t)$ とすると，調和振動子の運動方程式は，

$$m\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -kx\,(t)\,, \tag{1.1.1}$$

と表される．この方程式の解 $x(t)$ を求めれば，球の運動の軌跡を知ることが出来る．未知関数 $x\,(t)$ に関して，その導関数を含む等式のことを微分方程式と呼ぶ．もし，1 変数についての導関数しか含まない場合はその方程式のことを常微分方程式と呼び，複数の変数についての導関数を含む場合は偏微分方程式と呼ぶ．

上記の例に示したように，微分方程式はニュートン力学の根幹に関わっている．また，ニュートン力学に限らず，皆さんがこれから化学工学として学ぶことの多くの現象に微分方程式は登場する[*1]．これは，微分方程式が物理・化学現象を数式として表現する上で極めて便利な道具であるためである．従って，微分方程式に慣れ親しむことは，今後皆さんが様々な学問を学ぶ上で役に立つはずである．そこで本章では，解法が確立している初等的な常微分方程式とその解法について学んでいこう．

1.2 初期条件，特殊解，一般解 –最も簡単な常微分方程式を通して–

まずは，最も簡単な形の常微分方程式を通して，微分方程式の考え方に慣れていこう．ここでは，下記の形の方程式を扱うことにする．

$$\frac{dy}{dx} = g(x), \tag{1.2.1}$$

$g(x)$ の関数形は与えられていて，例えば $g(x) = x$ などをイメージしても良い．ここでは特定の $g(x)$ の形によらない議論を行うために，$g(x)$ については何も設定しない．また，上記の方程式に加えて，$x = x_0$ のときの y の値が分かっていて，$y\,(x_0) = y_0$ であったとする．このように，微分方程式に加

[*1] そう遠くない将来に，皆さんは移動現象論や量子化学でいろいろな形をした微分方程式に出会うことになる．

えて満たすべき要請を初期条件と呼ぶ．微分方程式を解くということは，その与えられた方程式と条件を満たす関数 $y\left(x\right)$ を求める，ということを意味する．

最初なので，丁寧に式変形を示していくことにする．まず，式中の x を x' と置き換えておく．

$$\frac{dy}{dx'} = g\left(x'\right). \tag{1.2.2}$$

両辺を，x' について x_0 から x まで積分する．

$$\int_{x_0}^{x} dx' \, \frac{dy}{dx'} = \int_{x_0}^{x} dx' \, g\left(x'\right). \tag{1.2.3}$$

そうすると，左辺は

$$\int_{y(x_0)}^{y(x)} dy = y\left(x\right) - y_0, \tag{1.2.4}$$

と書き直せる．右辺については，$g(x')$ の形が具体的に与えられないことには積分を実行できないので，そのままにしておく．つまり，

$$y = \int_{x_0}^{x} dx' \, g(x') + y\left(x_0\right), \tag{1.2.5}$$

という形で y の表式が得られる．これが Eq. (1.2.1) の解である．

本テキストでは，定積分 Eq. (1.2.3) を実行することで，微分方程式の解を求めた．教科書の多くでは，不定積分を用いた形で解の形を出しているかもしれない．その場合は，積分定数 C を用いて，

$$y = \int dx \, g\left(x\right) + C, \tag{1.2.6}$$

と表される．C は初期条件によって決まる定数 (任意定数) である[*2]．つまり，この微分方程式において初期条件の違いは全て定数 C の値に反映される．実際，Eq. (1.2.5) と Eq. (1.2.6) を見比べると，$C = y_0$ であることが分かる．Eq. (1.2.6) は，考えうる全ての初期条件に対応できる解の形になっており，そのような解のことを一般解と呼ぶ．そして，無数にある解の一つのことを，一般解と区別して特殊解と呼ぶ．このテキストでも，以後は不定積分を用いた形で一般解を表していくことにする．

言うまでもないことかもしれないが，自身が導き出した解が，本当に微分方程式の解になっているかどうかは簡単に確認できるということはちゃんと認識しておくべきであろう．今回の場合では，Eq. (1.2.6) を Eq. (1.2.1) に代入すると，

$$\frac{d}{dx}\left(\int dx \, g\left(x\right) + C\right) = g\left(x\right), \tag{1.2.7}$$

となり，確かに微分方程式の解になっていることが分かる．このように，解を導出した後に確認する習慣を身につけておけば，思わぬケアレスミスを防ぐことが出来る．

[*2] 本テキストでは，断りなく C と書いたときは，任意定数を表すこととする．

例題 1　微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = -2x^2 \tag{1.2.8}$$

の一般解と初期条件が $y(0) = 1$ のときの解を求めよ．

両辺を x で積分すると，

$$y = -\frac{2}{3}x^3 + C \ (\text{一般解}) \tag{1.2.9}$$

$y(0) = 1$ のとき，上式は $C = 1$ なので，

$$y = -\frac{2}{3}x^3 + 1 \tag{1.2.10}$$

1.3 微分方程式の解を求めるときのアプローチ

本章で扱うレベルの微分方程式の一般解を求めるときのアプローチは，次の 3 つに大別される．

(1) 方程式の形に応じた系統立てた式変形による一般解の導出

(2) 方程式の形から解の形を予測して一般解を構成

(3) (1) と (2) の組み合わせによる一般解の導出

(1) は，四則演算や微分・積分操作によって解を導き出す，というもので求積法と呼ばれる．これは次節以降で学んでいく．(2) では，前節で述べたように，ある関数が今注目している微分方程式の解かどうかは代入することで確認できるわけだから，適当にいくつか解になりそうなものを用意して，本当に解になっているものを引き当てる，というものである．例えば，$3x = 18$ という方程式について，私たちは既に両辺を 3 で割って $x = 6$ と即座に解を出せるわけだが，愚直に $x = 1, 2, 3, \cdots$ と順番に代入していって「$3 \times 6 = 18$ だから $x = 6$ は解だ!」とやっても (数学的には) 良いわけだ．もちろん，これは極端な例で，微分方程式の場合にはちゃんと解の候補を絞りこんでいかないと到底解には行き着かないわけだが，慣れてくると，簡単な方程式の場合には予測できるようになるし，実は解の候補の見つけ方もある程度は体系化されている．そのようにして特殊解を何個か見つけ出せれば，それらに対して適切な場所に任意定数をつけることで一般解を構成できる．(3) のアプローチは，現段階では想像がつかないかもしれないが，後で学ぶ非斉次型の方程式を解く上で極めて有効になる．

ここでは，簡単な微分方程式を例に，(2) のアプローチについて述べることにする．次の形の微分方程式を考えてみよう．

$$\frac{dy}{dx} + ay = 0. \tag{1.3.1}$$

ここでは a を実数とする．式を漫然と眺めているだけでは何も進展しないので，アレコレ手を動かしてみよう．ここでは一度，微分の定義に立ち返って，次のように書き換えてみる．

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} + ay(x) = 0. \tag{1.3.2}$$

今は lim を使っているが，Δx が無限小ではなく有限だが十分に小さいとして，

$$\frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} + ay(x) = 0, \tag{1.3.3}$$

と書く．これを $y(x + \Delta x)$ について解けば，

$$\begin{aligned} y(x + \Delta x) &= (1 - a\Delta x)\, y(x) \\ &= \gamma y(x). \end{aligned} \tag{1.3.4}$$

となる．2 行目では $\gamma = (1 - a\Delta x)$ とおいた．この式は，$x = x$ での y の値 $y(x)$ を知っていれば，そこから Δx だけずれたときの値 $y(x + \Delta x)$ が計算できることを意味している．いま，x 軸を Δx 刻みで考え，$x = n\Delta x$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ と表すと，

$$y((n + 1)\Delta x) = \gamma y(n\Delta x), \tag{1.3.5}$$

となる．このように連続的に変化する変数を有限の幅に区切って考えることを離散化と呼ぶ．離散化は，微分方程式をコンピュータを使って数値的に解くための最初の手続きでもあるので，今後この考え方は身につけておくと色々と役に立つ[*3]．上式は高校数学で学んだ等比数列型の漸化式であり，一般項は

$$y\left(n\Delta x\right) = \gamma^n y\left(0\right), \tag{1.3.6}$$

である．この形をみると，微分方程式の解は指数関数になりそうだと予測が立つ．なので，解の候補として $y = e^{\lambda x}$ を挙げてみて，Eq. (1.3.1) に代入してみる．すると，

$$\frac{d}{dx}\left(e^{\lambda x}\right) + ae^{\lambda x} = \left(\lambda + a\right)e^{\lambda x} = 0, \tag{1.3.7}$$

なので，$\lambda = -a$ つまり，$y = e^{-ax}$ は微分方程式の解の一つ (特殊解) であると分かる．すぐに確認できるが，e^{-ax} を定数倍したものも解であるから，任意定数 C を使って一般解は

$$y = Ce^{-ax}, \tag{1.3.8}$$

と表せることが分かった．

実は，もっと簡単に解の形を推測することも出来る．まず，Eq. (1.3.1) を左辺第 2 項を右辺に移しておく．

$$\frac{dy}{dx} = -ay. \tag{1.3.9}$$

この式を日本語に翻訳すると，「方程式の解は 1 回微分したら，定数 $\times$ 元々の関数」となる．もちろんこのような性質を持つのは指数関数 $e^{\lambda x}$ ならではなので，解は指数関数の形をとっているだろう，と予測することが出来る．高校数学の問題を解く際，何回微分しても元々の関数がずっと残るという性質に，皆さんは助けられたことも苦しめられたこともあるだろう．[*4]．式をただ眺めるだけでは予測は立たないが，一度，言語化することで既に持っている知識や過去の経験と問題が結びついて，解の予測が立つ，ということもあるかもしれない[*5]．何れにせよ，ここで言いたかったのは離散化にせよ，言語化による式の解釈にせよ，アレコレ試行錯誤して解の形を予測してみることが重要，ということである．

1.4 物理・化学でよく現れる常微分方程式

微分方程式の教科書では，初めのうちに常微分方程式をその形に応じて分類していることが多い (例えば線形 or 非線形など)．本テキストでは，まずは初等的な物理・化学でよく現れる常微分方程式の解法について一つ一つ学び，その後にそれらの方程式がどのように分類されるかを学んでいくことにする．

[*3] 微分方程式の数値解法については岡野先生の講義で学ことになる．

[*4] 私は苦しめられた辛い経験の方が多いような気がする．何度部分積分しても指数関数があるせいで簡単になってくれなかったりとか．

[*5] 他にも，2 回微分したら元々の関数が出てきてかつ符号が逆転するもの，といえば，三角関数!というように，色々な関数に対するぼんやりとしたイメージを持っておくことは役に立つ，と個人的には思う．

1.4.1 $\dfrac{dy}{dx} + ay = 0$

次の形の微分方程式を考える.

$$\frac{dy}{dx} + ay = 0. \tag{1.4.1}$$

この方程式の一般解は解の予測によるアプローチに基づいて既に求めているが，ここでは式変形から導出を試みる．$y \neq 0$ のとき，両辺を y で割る．

$$\frac{1}{y}\frac{dy}{dx} = -a. \tag{1.4.2}$$

両辺を積分すると左辺は

$$\int dx \, \frac{1}{y}\frac{dy}{dx} = \int dx \, \frac{d}{dx} \log |y| \,, \tag{1.4.3}$$

だから，

$$\log |y| = -ax + C, \tag{1.4.4}$$

$$|y| = e^C e^{-ax}, \tag{1.4.5}$$

である．$A > 0$ として，$y > 0$ のときは $e^C \to A$, $y < 0$ のときは $e^C \to -A$ と置き換えれば良い．また，$y = 0$ も明らかに解であるが，これは $A = 0$ に対応している．従って，いずれの場合においても，

$$y = Ce^{-ax}, \tag{1.4.6}$$

と表すことが出来る．ただし，これまでの慣習に従って任意定数を A ではなく C で表している．

1.4.2 $\dfrac{dy}{dx} + ay = g(x)$

次の形の常微分方程式を考える．

$$\frac{dy}{dx} + ay = g(x). \tag{1.4.7}$$

Eq. (1.4.1) を式変形して Eq. (1.2.1) の形に書き換えることを考えてみる．まず，Eq. (1.2.1) の両辺に何らかの関数 $f(x)$ をかけてみる．

$$f(x)\frac{dy}{dx} + af(x)\,y = f(x)\,g(x)\,. \tag{1.4.8}$$

もし左辺が

$$f(x)\frac{dy}{dx} + af(x) = \frac{d}{dx}\left(f(x)\,y\right), \tag{1.4.9}$$

の形でまとめられると都合が良い．というのも，$Y = f(x)\,y$ とおくと，Eq. (1.4.7) は

$$\frac{dY}{dx} = f(x)\,g(x)\,, \tag{1.4.10}$$

となり，既に解法を知っている Eq. (1.2.1) の形に帰着するからだ．従って，Eq. (1.4.9) を満たす $f(x)$ を見つければ良い．積の微分法より，

$$\frac{d}{dx}\left(f(x)\,y\right) = f(x)\frac{dy}{dx} + \left(\frac{d}{dx}f(x)\right)y, \tag{1.4.11}$$

であるから，Eq. (1.4.9) の左辺と比較すると，$f(x)$ は

$$\frac{df(x)}{dx} = af(x), \tag{1.4.12}$$

を満たせば良い．この $f(x)$ に対する微分方程式の解 (の一つ) は

$$f(x) = e^{ax}, \tag{1.4.13}$$

である．従って，Eq. (1.4.7) は,

$$\frac{d}{dx}\left(e^{ax}y\right) = e^{ax}g(x). \tag{1.4.14}$$

と書き直すことが出来るので，一般解は

$$e^{ax}y = \int dx\, e^{ax}g(x) + C, \tag{1.4.15}$$

$$y = e^{-ax}\int dx\, e^{ax}g(x) + Ce^{-ax}, \tag{1.4.16}$$

である．

このような形で微分方程式の一般解が求められたワケだが，これを公式のように覚えておくのはおすすめできないし，私自身は覚えていない．もし式を少し覚え間違えてしまっただけで，その式は使い物にならないし，これから登場する微分方程式の一般解を一つ一つ覚えるとなると，相当に大変である．それよりも導出方法を理解した方が圧倒的に楽だし，応用も利く．

この解法のキーポイントは『積の微分法』である．上で書いた導出は長々としているが，要するに微分方程式

$$\frac{dy}{dx} + ay = g(x), \tag{1.4.17}$$

の左辺を，積の微分の形で表せるように，何らかの関数をかけてみよう，というアプローチである．既に上記の解法を見ている皆さんは知っているように，e^{ax} を両辺にかければ,

$$\begin{aligned}
&e^{ax}\frac{dy}{dx} + ae^{ax}y = e^{ax}g(x),\\
&\to e^{ax}\frac{dy}{dx} + \left(\frac{d}{dx}e^{ax}\right)y = e^{ax}g(x),\\
&\to \frac{d}{dx}\left(e^{ax}y\right) = e^{ax}g(x),
\end{aligned}$$

と出来るのだった．後は積分するだけである．「積の微分の形に持っていけば良いのでは $\cdots$」という意識さえあれば，e^{ax} を両辺にかけることを思いつくのはそんなに難しいことではないはずである．

例題 2 微分方程式

$$\frac{dy}{dx} - 4y = 2xe^{4x} \tag{1.4.18}$$

の一般解を求めよ．また，初期条件が $y(0) = 0$ のときの解を求めよ．

両辺に e^{-4x} をかけると，左辺は

$$e^{-4x}\frac{dy}{dx} - 4e^{-4x}y = \frac{d}{dx}\left(e^{-4x}y\right) \tag{1.4.19}$$

なので，与えられた微分方程式は

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-4x}y\right) = 2x \tag{1.4.20}$$

となる．両辺を x で積分して，

$$\begin{aligned} e^{-4x}y &= x^2 + C \\ \to y &= (x^2 + C)e^{4x} \end{aligned} \tag{1.4.21}$$

$y(0) = 0$ より，$C = -1$ なので，

$$y = (x^2 - 1)e^{4x} \tag{1.4.22}$$

1.4.3 $\dfrac{d^2y}{dx^2}+a\dfrac{dy}{dx}+by=0$

微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2}+a\frac{dy}{dx}+by=0, \tag{1.4.23}$$

は，2 階微分を含んでおり，これまで見てきた微分方程式よりも複雑そうに見えるが，実は少し式変形することで，Eq. (1.4.7) の形に直すことが出来る．まず，

$$\frac{d^2y}{dx^2}+a\frac{dy}{dx}+by=\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}-py\right)-q\left(\frac{dy}{dx}-py\right), \tag{1.4.24}$$

と表すことを考える．$Y=dy/dx-py$ とおけば，これは元々の式を

$$\frac{dY}{dx}-qY=0, \tag{1.4.25}$$

の形に書き換えたことになる．従って，Eq. (1.4.24) の式変形が出来る p，q を見つければ良い．Eq. (1.4.24) の右辺を展開してみると，

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}-py\right)-q\left(\frac{dy}{dx}-py\right)=\frac{d^2y}{dx^2}-(p+q)\frac{dy}{dx}+pqy. \tag{1.4.26}$$

元々の方程式と係数を比較すると，p，q は

$$\begin{cases} p+q & =-a \\ pq & =b \end{cases}, \tag{1.4.27}$$

である．つまり，p，q は

$$\begin{aligned}(\lambda-p)(\lambda-q)&=\lambda^2-(p+q)\lambda+pq\\&=\lambda^2+a\lambda+b\\&=0,\end{aligned} \tag{1.4.28}$$

で表される λ に関する 2 次方程式の解である．このようにして得られる 2 次方程式を特性方程式と呼ぶ．Eq. (1.4.25) を解くと，

$$\frac{dy}{dx}-py=C_1e^{qx}, \tag{1.4.29}$$

であり，この形の微分方程式は Eq. (1.4.7) と同じなので，

$$y=C_1e^{px}\int dx\,e^{(q-p)x}+C_2e^{px}, \tag{1.4.30}$$

である．ここからは $p=q$ と $p\neq q$ の場合に分けて式変形を進める．まず，$p=q$ の場合，Eq. (1.4.30) より，

$$\begin{aligned}y&=C_1e^{px}\int dx+C_2e^{px}\\&=C_1xe^{px}+C_2e^{px},\end{aligned} \tag{1.4.31}$$

である．次に，$p \neq q$ の場合では，Eq. (1.4.30) 内の積分を実行して，

$$y = \frac{C_1}{q-p} e^{qx} + C_2 e^{px}, \tag{1.4.32}$$

と書ける．$C_1/(q-p)$ を改めて C_1 とおいて，

$$y = C_1 e^{qx} + C_2 e^{px}, \tag{1.4.33}$$

と書き直しても良い．p, q が虚数の場合，実数 α, β を用いて，

$$p = \alpha + i\beta, \tag{1.4.34}$$
$$q = \alpha - i\beta, \tag{1.4.35}$$

と表すことにすれば，

$$y = e^{\alpha x}\left(C_1 e^{i\beta x} + C_2 e^{-i\beta x}\right), \tag{1.4.36}$$

である．オイラーの公式

$$e^{\pm ia} = \cos a \pm i \sin a, \tag{1.4.37}$$

を用いると，定数 A, B を用いて

$$y = e^{ax}\left(A\cos\beta x + B\sin\beta x\right), \tag{1.4.38}$$

のように表せる (各自でやってみよう[*6])

これまでに出てきた微分方程式とは異なり，今回の微分方程式 Eq. (1.4.23) の一般解には 2 つの任意定数が現れている．これは，これまでの微分方程式が 1 階の導関数だけを含んでいたのに対し，Eq. (1.4.23) では 2 階の導関数が含まれているためである[*7]．このように微分方程式に含まれる階数と任意定数の数は対応している．

最後に，特性方程式について触れておく．この 2 次方程式は Eq. (1.4.23) の導関数を

$$\frac{d^2y}{dx^2} \to \lambda^2, \tag{1.4.39}$$
$$\frac{dy}{dx} \to \lambda, \tag{1.4.40}$$

に置き換えたものになっている．少し別のアプローチから特性方程式を導き出そう．微分方程式 Eq. (1.4.23) の形を見て，$e^{\lambda x}$ が解になりそうだと予想し代入してみる．すると，

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{\lambda x}\right) + a\frac{d}{dx}\left(e^{\lambda x}\right) + be^{\lambda x} &= \left(\lambda^2 + a\lambda + b\right)e^{\lambda x} \\ &= 0,\end{aligned} \tag{1.4.41}$$

つまり

$$\lambda^2 + a\lambda + b = 0, \tag{1.4.42}$$

[*6] やってみればすぐに $A = C_1 + C_2$，$B = i(C_1 - C_2)$ とおいただけと分かるだろう．

[*7] 後に用語としてまとめるが，n 階の導関数を含む常微分方程式のことを n 階常微分方程式と呼ぶ．

が得られるが，これは特性方程式である．従って，特性方程式の解となる λ の値を用いれば，$e^{\lambda x}$ は微分方程式の解となる．ただし，このアプローチだと，特性方程式が 2 つの解 λ_1，λ_2 を持つ場合は，特解 $e^{\lambda_1 x}$，$e^{\lambda_2 x}$ の線形結合で一般解を構成できる特性方程式が重解を持つ場合は，特性方程式からは特殊解が 1 つしか得られないので，一般解を出すためにはもう一つ特殊解を求める必要があるが，後で学ぶ定数変化法を用いると，簡単に求めることができる．

例題 3 次の微分方程式を解け．

(1) $\dfrac{d^2y}{dx^2}+2\dfrac{dy}{dx}-3y=0,\quad y(0)=0,\quad \left.\dfrac{dy}{dx}\right|_{x=0}=0$

(2) $\dfrac{d^2y}{dx^2}+6\dfrac{dy}{dx}+9y=0,\quad y(0)=0,\quad \left.\dfrac{dy}{dx}\right|_{x=0}=0$

(1) 解の形を $y=e^{\lambda x}$ と仮定して与えられた微分方程式に代入すると，

$$e^{\lambda x}\left(\lambda^2+2\lambda-3\right)=0 \tag{1.4.43}$$

なので，λ について解くと，

$$\lambda=1,\ -3 \tag{1.4.44}$$

である．従って，一般解は

$$y=C_1e^x+C_2e^{-3x} \tag{1.4.45}$$

で表される．初期条件より，

$$\begin{cases} C_1+C_2 &=1 \\ C_1-3C_2 &=0 \end{cases} \tag{1.4.46}$$

であるから，これを解くと $C_1=3/4,\ C_2=1/4$ となるので，

$$y=\frac{3}{4}e^x+\frac{1}{4}e^{-3x} \tag{1.4.47}$$

(2) (1) と同様にすると，特性方程式は

$$\lambda^2+6\lambda+9=0 \tag{1.4.48}$$

なので，$\lambda=-3$ となり，特殊解が e^{-3x} の一つしか得られない．そこで，テキストにある特性方程式の導出まで遡って，与えられた微分方程式を

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}+3y\right)+3\left(\frac{dy}{dx}+3y\right)=0 \tag{1.4.49}$$

と書き換える．$Y=dy/dx+3y$ とおくと，

$$\frac{dY}{dx}+3Y=0 \tag{1.4.50}$$

なので，これを解くと $Y=C_1e^{-3x}$ だから，一般解は

$$y=C_1xe^{-3x}+C_2e^{-3x} \tag{1.4.51}$$

となる．初期条件より，$C_1=-3,\ C_2=-1$ なので，

$$y=-\left(3x+1\right)e^{-3x} \tag{1.4.52}$$

1.4.4 $\dfrac{dy^2}{dx^2} \pm \beta^2 y = 0$

β を実数として，

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \beta^2 y = 0, \tag{1.4.53}$$

を考える．特性方程式は，

$$\lambda^2 - \beta^2 = 0, \tag{1.4.54}$$

なので，$\lambda = \pm\beta$ である．従って，

$$y = C_1 e^{-\beta x} + C_2 e^{\beta x}, \tag{1.4.55}$$

である．

次に，

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \beta^2 y = 0, \tag{1.4.56}$$

を考える．特性方程式

$$\lambda^2 + \beta^2 = 0, \tag{1.4.57}$$

より，$\lambda = \pm i\beta$ だから，一般解は

$$y = C_1 e^{-i\beta x} + C_2 e^{i\beta x}, \tag{1.4.58}$$

である．オイラーの公式

$$e^{\pm ia} = \cos a \pm i \sin a, \tag{1.4.59}$$

を用いると，

$$\begin{aligned} y &= C_1 (\cos\beta x - i \sin\beta x) + C_2 (\cos\beta x + i \sin\beta x) \\ &= (C_1 + C_2)\cos\beta x + i(C_2 - C_1)\sin\beta x, \end{aligned} \tag{1.4.60}$$

である．従って，三角関数の係数を改めて C_1，C_2 と置き直して，

$$y = C_1 \cos\beta x + C_2 \sin\beta x, \tag{1.4.61}$$

と表すことが出来る．導出過程を見れば分かるとおり，Eq. (1.4.58) と Eq. (1.4.61) のどちらも正しい一般解である．Eq. (1.4.61) をさらに式変形してみることも出来る．

1 階の導関数の係数の符号で場合分けして解を求めたが，これから皆さんが物理や化学を勉強していて，よく目にするのは $d^2y/dx^2 + \beta^2 y = 0$ ($\beta > 0$) の方である．例えば，調和振動子に関する微分方程式

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx, \quad (m > 0,\ k > 0), \tag{1.4.62}$$

は $\omega = \sqrt{k/m}$ とおいて,

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x, \tag{1.4.63}$$

のように表せる．また，波や振動の振幅 $u(x)$ に関する微分方程式は,

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -k^2 u, \tag{1.4.64}$$

で与えられる[*8]．振幅に関する微分方程式は，境界条件と呼ばれる，初期条件とは異なる問題設定に触れる絶好の機会なのだが，それについては偏微分方程式を学ぶときまで後回しにしておこう．

特性方程式を出発点として一般解を求めてきたが，この形の微分方程式を日本語に解釈すると，「方程式の解は，2 回微分すると，符号が逆になって元々の関数が出てくるもの」である．このような性質を持つ関数は三角関数である．実際，一般解は三角関数で表されるものになっている．つまり，この場合も解を推測することは出来るわけだ[*9]．

[*8] まだ学んでいないかもしれないので，こういう形になる，ということで受け入れてほしい．

[*9] 実際，このような説明で微分方程式の解を持ってくる物理の教科書も少なくないし，そのように説明する気持ちは理解できる．微分方程式の解法ではなく，物理の中身に集中したいということだろう．

例題 4　調和振動子の微分方程式

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x, \quad \omega > 0, \tag{1.4.65}$$

を解け，ただし $x(0) = 1,\ dx/dt|_{t=0} = 0$ とする．

$\cos\omega t$ と $\sin\omega t$ が特殊解であることはすぐ分かるので[*10]，一般解は

$$x(t) = C_1 \cos\omega t + C_2 \sin\omega t, \tag{1.4.66}$$

である．初期条件より，$C_1 = 1,\ C_2 = 0$ なので，

$$x(t) = \cos\omega t. \tag{1.4.67}$$

[*10] もちろん，特性方程式から出発しても良い．

1.5 変数分離

1 階微分方程式のうち，

$$\frac{dy}{dx} = f(y)\, g(x)\,, \tag{1.5.1}$$

の形をしたものを，変数分離形と呼ぶ．$f(x) \neq 0$ のとき，両辺を $f(x)$ で割り，

$$\frac{1}{f(y)} \frac{dy}{dx} = g(x)\,, \tag{1.5.2}$$

とした後，x について積分することで解を得ることが出来る．変数分離形の最もシンプルな例は，Eq. (1.4.1) である．

$$\frac{dy}{dx} + ay = 0. \tag{1.5.3}$$

確認してみると分かるが，この方程式の解を解くときにも，上記の手続きを踏んでいる．

例題 5 次の微分方程式の一般解を求めよ．

(1) $\dfrac{dy}{dx} = 2xy$

(2) $\dfrac{dy}{dx} = -xy^2$

(1) $y \neq 0$ のとき，両辺を y で割ると，

$$\frac{1}{y}\frac{dy}{dx} = 2x. \tag{1.5.4}$$

両辺を x で積分すると，

$$\begin{aligned} &\int dx\,\frac{1}{y}\frac{dy}{dx} = \int dx\,2x, \\ &\to \int dx\frac{d}{dx}\log|y| = x^2 + C, \\ &\to \log|y| = x^2 + C, \\ &\to y = Ce^{x^2}. \end{aligned} \tag{1.5.5}$$

最後の行の C と式変形途中の C は異なることに注意すること．$y = 0$ もこの方程式の解であり，一般解に対して $C = 0$ としたものがこれに対応する．

(2) $y \neq 0$ のとき，両辺を y で割って，

$$\frac{1}{y^2}\frac{dy}{dx} = -x. \tag{1.5.6}$$

両辺を x で積分して，

$$\begin{aligned} &\int dx\,\frac{1}{y^2}\frac{dy}{dx} = -\int dx\,x, \\ &\to -\int dx\,\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{y}\right) = -x^2 + C, \\ &\to \frac{1}{y} = x^2 + C, \\ &\to y = \frac{1}{x^2 + C}. \end{aligned} \tag{1.5.7}$$

一方で，$y = 0$ も方程式の解であるが，C をどのような値にとっても $y = 0$ とすることは出来ない．このような解のことを特異解と呼ぶ．以上より，微分方程式の解は

$$y = \frac{1}{x^2 + C}, \quad y = 0. \tag{1.5.8}$$

例題 6 次の微分方程式を解け.

$$\frac{dy}{dx} = -k\,(a-y)\,(b-y)\,. \tag{1.5.9}$$

ただし，k, a, b は正の定数とし，$y < a < b$ の範囲で考えよ.

両辺を $(a-y)(b-y)$ で割って，

$$\frac{1}{(a-y)(b-y)}\frac{dy}{dx} = -k. \tag{1.5.10}$$

ここで，

$$\frac{1}{(a-y)(b-y)} = \frac{1}{b-a}\left(\frac{1}{a-y} - \frac{1}{b-y}\right), \tag{1.5.11}$$

と式変形できることに注目すると，

$$\begin{aligned}
&\int dx\,\frac{1}{a-y}\frac{dy}{dx} - \int dx\,\frac{1}{b-y}\frac{dy}{dx} = -(b-a)kx + C,\\
&\to \log\frac{|y-b|}{|y-a|} = -\,(b-a)\,kx + C,\\
&\to \frac{y-b}{y-a} = \exp\left[-(b-a)x + C\right],\\
&\to y = \frac{b - a\exp\left[-(b-a)x + C\right]}{1 - \exp\left[-(b-a)x + C\right]}.
\end{aligned} \tag{1.5.12}$$

である.

$\boxed{\text{補足}}$

$a = 0$ として，

$$\begin{aligned}
\frac{dy}{dx} &= kby\left(1 - \frac{y}{b}\right)\\
&= ry\left(1 - \frac{y}{b}\right), \quad (r \equiv kb)
\end{aligned} \tag{1.5.13}$$

の形をした方程式をロジスティック方程式と呼ぶ．この方程式は生物の個体数の変化を表す数理モデルに用いられたりする.

1.5.1 同次形

1 階の微分方程式が

$$\frac{dy}{dx} = f\left(\frac{y}{x}\right), \tag{1.5.14}$$

の形であるとき，この微分方程式のことを同次形と呼ぶ．同次形の場合，変数変換により変数分離形に書き直すことが出来る．まず，$y = u(x)\,x$ とおくと，

$$x\frac{du(x)}{dx} + u(x) = f(u(x)), \tag{1.5.15}$$

だから，$f(u) - u(x) \neq 0$ のとき，

$$\frac{1}{f(u(x)) - u(x)}\frac{du(x)}{dx} = \frac{1}{x}, \tag{1.5.16}$$

と出来るので，確かに変数分離形になっている．

例題 7 次の微分方程式を解け.

(1) $\dfrac{dy}{dx} = 1 + \dfrac{y}{x}$

(2) $3xy\dfrac{dy}{dx} = 4y^2 + 3x^2$

ただし，(2) については解を $y^2 = \cdots$ の形で表しても良い.

(1) $y = ux$ とおくと，

$$\begin{aligned} &\frac{d(ux)}{dx} = 1 + u, \\ &\to x\frac{du}{dx} + u = 1 + u, \\ &\to x\frac{du}{dx} = 1. \end{aligned} \tag{1.5.17}$$

$x \neq 0$ のとき，

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{x}. \tag{1.5.18}$$

両辺を積分して，

$$u = \log|x| + C, \tag{1.5.19}$$

なので，$y = ux$ より，

$$y = x\log|x| + Cx. \tag{1.5.20}$$

(2) 両辺を x^2 で割ると，

$$3\frac{y}{x}\frac{dy}{dx} = 4\left(\frac{y}{x}\right)^2 + 3, \tag{1.5.21}$$

これは同次形であるから，$y = ux$ とおいて，

$$\begin{aligned} &3u\frac{d(ux)}{dx} = 4u^2 + 3, \\ &\to 3ux\frac{du}{dx} + 3u^2 = 4u^2 + 3, \\ &\to 3ux\frac{du}{dx} = u^2 + 3. \end{aligned} \tag{1.5.22}$$

$x \neq 0$ とすれば，

$$\frac{3u}{u^2+3}\frac{du}{dx} = \frac{1}{x}. \tag{1.5.23}$$

両辺を積分すると，

$$\begin{aligned} &\int dx\,\frac{3u}{u^2+3}\frac{du}{dx} = \log|x| + C, \\ &\to \frac{3}{2}\int dx\,\frac{d}{dx}\left(\log\left(u^2+3\right)\right) = \log|x| + C, \\ &\to \frac{3}{2}\log\left(u^2+3\right) = \log|x| + C, \\ &\to u^2 = Cx^{2/3} - 3. \end{aligned} \tag{1.5.24}$$

従って，$y = ux$ より，

$$y^2 = Cx^{8/3} - 3x^2. \tag{1.5.25}$$

$x = 0$ のとき解は $y = 0$ であるが，上式はこの場合を含んでいる．

1.6 常微分方程式の分類

1.6.1 線形と非線形

x を引数とする関数 $y(x)$ に関する常微分方程式を考える．導関数 $\left\{d^i y/dx^i\right\}$ の 1 次式で表された常微分方程式を線形微分方程式と呼ぶ．式の中に含まれる最大階数が n のとき，その常微分方程式を n 階常微分方程式と呼び，一般に次式のように表される．

$$a_n(x)\frac{d^n y}{dx^n}+a_{n-1}(x)\frac{d^{n-1}y}{dy^{n-1}}+\cdots+a_1(x)\frac{dy}{dx}+a_0(x)y=b(x). \tag{1.6.1}$$

このテキストでこれまで扱ってきた常微分方程式は全て線形である．この形で表せない常微分方程式のことを非線形常微分方程式と呼ぶ．例えば,

$$\frac{d^2y}{dx^2}=-a\sin y, \tag{1.6.2}$$

は $y(x)$ が三角関数の引数になっているため非線形微分方程式である．また，変数分離を学んだときに例題として扱った

$$\frac{dy}{dx}=-xy^2, \tag{1.6.3}$$

は y^2 を含んでいるため，1 階の非線形常微分方程式である．このような変数分離形で表せるもの等を除けば，非線形微分方程式を解析的に解くことは極めて難しく[*11]，実際に解ける例は僅からしい．そのため，非線形微分方程式の解の振る舞いを調べる研究は，数学や数理物理における最先端の一つである．従って，このテキストで取り扱うのは主に線形とする．

1.6.2 斉次と非斉次

線形常微分方程式 Eq. (1.6.2) において，$b(x)=$ (定数) のとき，斉次線形常微分方程式と呼び，$b(x)\neq$ (定数) のとき，非斉次線形常微分方程式と呼ぶ．従って，これまで扱った方程式を斉次か非斉次かで分類すると以下のようになる．

$$\text{Eq. (1.2.1)}\quad \frac{dy}{dx}=g(x):\ \text{非斉次} \tag{1.6.4}$$

$$\text{Eq. (1.4.1)}\quad \frac{dy}{dx}+ay=0:\ \text{斉次} \tag{1.6.5}$$

$$\text{Eq. (1.4.7)}\quad \frac{dy}{dx}+ay=g(x):\ \text{非斉次} \tag{1.6.6}$$

$$\text{Eq. (1.4.23)}\quad \frac{d^2y}{dx^2}+a\frac{dy}{dx}+by=0:\ \text{斉次} \tag{1.6.7}$$

容易に想像がつくが，非斉次方程式の解を求める方が斉次の場合よりも一般解を求めるのが難しくなるが，代表的な形の微分方程式については，解法が確立されている．

[*11] 実際，Eq. (1.6.2) は (解析的には) 解けないらしい．

1.7 線形常微分方程式に関する基本的な定理

1.7.1 斉次形：解の線形結合もまた解

斉次形の n 階線形常微分方程式

$$\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y}{dx^i} = 0, \tag{1.7.1}$$

の解を y_1，y_2 とすると，その線形結合

$$y(x) = C_1 y_1 + C_2 y_2, \tag{1.7.2}$$

もまた解である．

ここまでで経験してきた微分方程式の解の導出を考えれば，定理として証明するまでもないかもしれないが，一応証明しておく．Eq. (1.7.1) の左辺に Eq. (1.7.2) を代入すると，

$$\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i}{dx^i} (C_1 y_1 + C_2 y_2) = C_1 \left(\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y_1}{dx^i} \right) + C_2 \left(\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y_2}{dx^i} \right), \tag{1.7.3}$$

y_1，y_2 は微分方程式の階であるから，右辺の括弧内はゼロになるので，確かに Eq. (1.7.2) は微分方程式の解になっていることが分かる．

1.7.1.1 斉次形：n 階微分方程式の一般解の形

斉次の n 階線形常微分方程式の一般解について，証明なしに述べる．これは，Sec. 1.4.3 で述べた事項の一般化に当たる．

斉次の n 階線形常微分方程式

$$\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y}{dx^i} = 0, \tag{1.7.4}$$

の一般解は，n 個の線形独立な特殊解 $\{y_i\}$ の線形結合

$$y = \sum_{i=1}^{n} C_1 y_1, \tag{1.7.5}$$

で表される．

ここで，$\{y_i\}$ が線形独立であるとは，

$$C_1 y_1(x) + C_2 y_2(x) + \cdots + C_n y_n(x) = 0, \tag{1.7.6}$$

を満たす C_1，$C_2, \cdots, C_n$ が

$$C_1 = C_2 = \cdots = C_n = 0, \tag{1.7.7}$$

のみであることをいう．いま，$y^{(n)} = d^n y/dx^n$ という記法を導入すると，Eq. (1.7.6) を x で 0 回，1 回，2 回，$\cdots$, n 回微分したものは次式で表される．

$$C_1 y_1 + C_2 y_2 + \cdots + C_n y_n = 0, \tag{1.7.8}$$
$$C_1 y_1^{(1)} + C_2 y_2^{(1)} + \cdots + C_n y_n^{(1)} = 0, \tag{1.7.9}$$
$$C_1 y_1^{(2)} + C_2 y_2^{(2)} + \cdots + C_n y_n^{(2)} = 0, \tag{1.7.10}$$
$$\cdots \tag{1.7.11}$$
$$C_1 y_1^{(n)} + C_2 y_2^{(n)} + \cdots + C_n y_n^{(n)} = 0. \tag{1.7.12}$$

これを行列の形に表すと，

$$\underbrace{\begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \\ y_1^{(1)} & y_2^{(1)} & \cdots & y_n^{(1)} \\ y_1^{(2)} & y_2^{(2)} & \cdots & y_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_1^{(n)} & y_2^{(n)} & \cdots & y_n^{(n)} \end{pmatrix}}_{\equiv \hat{A}} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1.7.13}$$

従って，$C_1 = C_2 = \cdots = C_n = 0$ のみがこの方程式の解であるためには，$\hat{A}$ の逆行列 $\hat{A}^{-1}$ が存在すること，つまり $\hat{A}$ の行列式を $W(y_1, y_2, \cdots, y_n)$ とおくと，

$$W(y_1, y_2, \cdots, y_n) = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \\ y_1^{(1)} & y_2^{(1)} & \cdots & y_n^{(1)} \\ y_1^{(2)} & y_2^{(2)} & \cdots & y_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_1^{(n)} & y_2^{(n)} & \cdots & y_n^{(n)} \end{vmatrix} \neq 0, \tag{1.7.14}$$

である．$W(y_1, y_2, \cdots, y_n)$ のことをロンスキー行列式 (ロンスキアン) と呼ぶ．

例えば，2 階の斉次の線形常微分方程式の線形独立な解を y_1，y_2 とすると，ロンスキアンは，

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2^{(1)} - y_2 y_1^{(1)}, \tag{1.7.15}$$

で表される[*12]．

[*12] 本講義で扱うのは一部をのぞいて 2 階程度なので，一般の場合はほとんど必要にならない．

1.7.1.2 非斉次形：非斉次形の一般解は，斉次形の一般解と非斉次形の特殊解の和

非斉次の n 階線形常微分方程式

$$\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y}{dx^i} = b(x), \quad b(x) \neq \text{Const.} \tag{1.7.16}$$

の特殊解を y_s, 対応する斉次形

$$\sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y}{dx^i} = 0, \tag{1.7.17}$$

の一般解を y_h とすると，Eq. (1.7.16) の一般解は

$$y = y_h + y_s, \tag{1.7.18}$$

で表される．

Eq. (1.7.16) に，Eq. (1.7.18) を代入すると，

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{n} \frac{d^i}{dx^i}(y_h + y_s) &= \sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y_h}{dx^i} + \sum_{i=0}^{n} a_i(x) \frac{d^i y_s}{dx^i} \\ &= 0 + b(x) \\ &= b(x),\end{aligned} \tag{1.7.19}$$

となるので，確かに Eq. (1.7.18) は非斉次形の解になっている．これが一般解であるかどうかを確認する必要があるが，これは本テキストの範疇を超えるので，省略することにする．

この定理は非斉次の線形常微分方程式を解く上で有用な定理である．というのも，比較的簡単に解ける斉次方程式の一般解と，どんな方法でも良いので非斉次方程式の特殊解を一つでも見つけさえすれば，その 2 つから非斉次方程式の一般解を求められたことになるからだ．そこで，この後は斉次方程式の一般解を求める方法をいくつか学んだ後，非斉次方程式の特殊解を探し出す方法について述べる．

1.8 非斉次方程式の解法

1.8.1 未定係数法

非斉次の 2 階線形常微分方程式

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + a\frac{dy}{dx} + by = g(x), \tag{1.8.1}$$

を考える．ただし，a, b は定数とする．対応する斉次方程式の一般解については Sec. 1.4.3 で既に述べた．従って，非斉次方程式の特殊解を求められれば，一般解が求まったことになる．そこで，ここでは非斉次項 $g(x)$ の形に応じて，特殊解 y_p の形を予測するというアプローチをとることにする．例

えば，微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 2\frac{dy}{dx} + y = e^{3x}, \tag{1.8.2}$$

については，特殊解が e^{3x} を含んでいるだろうと予測がつく．実際，A を未定係数として $y_p = Ae^{3x}$ の形を仮定して微分方程式に代入してみると，

$$9Ae^{3x} + 6Ae^{3x} + Ae^{3x} = e^{3x}, \tag{1.8.3}$$

となり，$A = 1/16$ であれば確かに特殊解になっていることが分かる．このように，特殊解の形を予測して未定係数を決定することで特殊解を求める方法を未定係数法と呼ぶ．未定係数法を利用するに当たって，次の 2 つのコツがある．

- 非斉次項の形に応じた特殊解の候補は下記．

非斉次項 $g(x)$	特殊解 y_p の候補
e^{ax}	Ae^{ax}
$\sin ax$, $\cos ax$	$A\sin ax + B\cos ax$
n 次多項式	n 次多項式

- 上記のように予測した候補を用いたときに，未定係数がうまく決められないときは，その候補に x や x^2 をかけたものを検討してみる．

この方法は非斉次項の関数形が単純である場合に有効であり，より高階の微分方程式に対しても適用できる．複雑な非斉次項については，次節以降で述べる定数変化法を用いる必要がある．

例題 8 次の微分方程式の一般解を求めよ.

(1) $\dfrac{d^2y}{dx^2} - 4y = \sin 2x$

(2) $\dfrac{d^2y}{dx^2} - \dfrac{dy}{dx} - 2y = \sin 4x$

(3) $\dfrac{d^2y}{dx^2} - 5\dfrac{dy}{dx} + 6y = e^{2x}$

(1) まず，斉次方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 4y = 0, \tag{1.8.4}$$

を考える．解として $e^{\lambda x}$ の形を予測して代入すると，特性方程式

$$\lambda^2 - 4 = 0, \tag{1.8.5}$$

を得る．これを解くと，$\lambda = \pm 2$ なので，斉次方程式の一般解は,

$$y = C_1 e^{2x} + C_2 e^{-2x}, \tag{1.8.6}$$

である．

次に，非斉次方程式の特殊解を求める．解の形として，$A\sin 2x$ を予測して代入すると，

$$\begin{aligned}
&-4A\sin 2x - 4A\sin 2x = \sin 2x, \\
&\to -8A = 1, \\
&\to A = -\frac{1}{8}.
\end{aligned} \tag{1.8.7}$$

従って，与えられた微分方程式の一般解は

$$y = C_1 e^{2x} + C_2 e^{-2x} - \frac{1}{8}\sin 2x. \tag{1.8.8}$$

(2) 斉次方程式の一般解については結果だけを示すと，$y = C_1 e^{-x} + C_2 e^{2x}$ である．非斉次方程式の特殊解として，$y = A\cos 4x + B\sin 4x$ の形を仮定して与えられた微分方程式に代入すると，

$$\begin{aligned}
&-16(A\cos 4x + B\sin 4x) - 4(-A\sin 4x + B\cos 4x) - 2(A\cos 4x + B\sin 4x) = \sin 4x, \\
&\to (-18A + 4B)\cos 4x + (-18B - 4A)\sin 4x = \sin 4x,
\end{aligned} \tag{1.8.9}$$

なので，両辺を係数比較すると，

$$\begin{cases} -18A - 4B = 0 \\ -18B + 4A = 1 \end{cases}, \tag{1.8.10}$$

を得る．これを解くと, $A = 1/85$, $B = -9/170$ なので, 特殊解は $y = (1/85)\cos 4x - (9/170)\sin 4x$ である．従って，一般解は

$$y = C_1 e^{-x} + C_2 e^{2x} + \frac{1}{85}\cos 4x - \frac{9}{170}\sin 4x. \tag{1.8.11}$$

補足

非斉次項が三角関数の場合は $e^{i\theta}$ の形に書き換えた微分方程式を考え，その微分方程式の解の実部か虚部をとることで，元々の微分方程式の解を求めることが出来る．実部と虚部のどちらをとれば良いのかは非斉次項が sin であるか cos であるかによる．このような解の求め方は物理ではよく登場する．そのような方法が何故許されるのか簡単に解説する．

非斉次項 $\sin 4x$ を e^{4ix} に書き換えた微分方程式は

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} - 2y = e^{4ix}, \tag{1.8.12}$$

である．この微分方程式の解が $y = f(x) + ig(x)$ ($f(x)$, $g(x)$ は実関数) の形で得られたとする．これを代入して，実部と虚部に分けて書くと，

$$\left(\frac{d^2f}{dx^2} - \frac{df}{dx} - 2f\right) + i\left(\frac{d^2g}{dx^2} - \frac{dg}{dx} - 2g\right) = \cos 4x + i\sin 4x, \tag{1.8.13}$$

となる．両辺で実部と虚部を比較すると，f は次の微分方程式の解になっていることが分かる．

$$\frac{d^2f}{dx^2} - \frac{df}{dx} - 2f = \cos 4x. \tag{1.8.14}$$

同様に，g は

$$\frac{d^2g}{dx^2} - \frac{dg}{dx} - 2g = \sin 4x, \tag{1.8.15}$$

の解になっているが，これは元々の解くべき方程式そのものである．従って，非斉次項の三角関数を $e^{i\theta}$ の形に書き換えた方程式を解いて，その解の虚部をとってくれば，それが元々の方程式の解になっている．

今回の問題について，この方法を使って特殊解を出してみよう．書き換えた方程式の特殊解は Ae^{4ix} の形をしていると予測して代入してみると，

$$\begin{aligned}
&-16Ae^{4ix} - 4iAe^{4ix} - 2Ae^{4ix} = e^{4ix}, \\
&\to A\left(-18 - 4i\right)e^{4ix} = e^{4ix}, \\
&\to A = -\frac{1}{18+4i} = -\frac{9-2i}{170},
\end{aligned} \tag{1.8.16}$$

となるので，特殊解は

$$\begin{aligned}
y &= -\frac{9-2i}{170}e^{4ix} \\
&= -\frac{9}{170}\cos 4x - \frac{1}{85}\sin 4x + i\left(\frac{1}{85}\cos 4x - \frac{9}{170}\sin 4x\right).
\end{aligned} \tag{1.8.17}$$

虚部をとってくると，確かに書き換える前の微分方程式の特殊解になっている．

非斉次項を複素数に拡張することで，元々の場合よりも計算が楽になっていることが分かる．今後物理や化学の勉強を進めていくと，上記のような手続きで微分方程式を解いている文献にしばしば遭遇することになると思うので，そのときに面食らわないようにしてもらえれば幸いである．

(3) まず，斉次方程式の一般解を求めると，

$$y = C_1 e^{2x} + C_2 e^{3x}. \tag{1.8.18}$$

次に，非斉次方程式の特殊解を求める．解の候補として，$y = Ae^{2x}$ を予測したくなるが，これはうまくない．何故なら，これは既に斉次方程式の一般解の中に含まれているからだ．実際左辺に代入してみると，

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{2x}\right) - 5\frac{d}{dx}\left(Ae^{2x}\right) + 6Ae^{2x} \\
&= 4Ae^{2x} - 10Ae^{2x} + 6Ae^{2x} \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{1.8.19}$$

となり，A が消えてしまうので，特殊解が定まらない (考えてみたら当たり前)．そこで，コツのところで書いたように，特殊解として $y = Axe^{2x}$ を候補として挙げてみる．これを代入してみると，

$$\begin{aligned}
&A\left\{\frac{d^2}{dx^2}xe^{2x} - 5\frac{d}{dx}xe^{2x} - 6xe^{2x}\right\} = e^{2x}, \\
&\to -Ae^{2x} = e^{2x}, \\
&\to A = -1,
\end{aligned} \tag{1.8.20}$$

なので，特殊解は $y = -xe^{2x}$ である．従って，一般解は

$$y = C_1 e^{2x} + C_2 e^{3x} - xe^{2x}. \tag{1.8.21}$$

1.8.2 定数変化法その 1 –簡単な非斉次方程式への応用–

次の形の非斉次の微分方程式を考える．

$$\frac{dy}{dx}+a(x)\,y=g(x)\,, \tag{1.8.22}$$

Eq. (1.4.7) に似ているが，違うところは y の項の係数も x の関数になっているところである．Sec. 1.7.1.2 で述べた通り，非斉次方程式の解を求める際には，まず対応する斉次方程式の一般解を求めることを考えると良い．つまり，

$$\frac{dy}{dx}+a(x)\,y=0, \tag{1.8.23}$$

の一般解を求めることから始める．この方程式は変数分離形なので，$y\neq 0$ のとき，

$$\frac{1}{y}\frac{dy}{dx}=-a(x)\,, \tag{1.8.24}$$

であるから，

$$\log|y|=\int dx\,a(x)\,, \tag{1.8.25}$$

である．Sec. 1.4.1 のときと全く同じ議論から，

$$y=C\exp\left[-\int dx\,a(x)\right], \tag{1.8.26}$$

とできる．これは $y=0$ のときも対応できる形になっており (つまり $C=0$)，一般解である．これで，非斉次方程式の一般解を求めるに当たっての最初の関門は突破したことになる．次は非斉次方程式の特殊解を求めよう．ここで次のように考える．非斉次であろうが，斉次方程式と解の形は似ていると推測する．ただし確認してみれば分かるが，一般に Eq. (1.8.26) は Eq. (1.8.22) の解にはならない．そこで，非斉次の場合に対応するために，任意定数 C を x の関数 $C(x)$ にしてみる，つまり

$$y=C(x)\exp\left[-\int dx\,a(x)\right], \tag{1.8.27}$$

を非斉次方程式の解の候補として考える．$A(x)=-\int dx\,a(x)$ とおいた上で Eq. (1.8.22) に代入してみると，左辺は

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dx}\left[C(x)\,e^{A(x)}\right]+a(x)\,C(x)\,e^{A(x)}\\
&=\frac{dC(x)}{dx}e^{A(x)}+C(x)\,\frac{d}{dx}e^{A(x)}-a(x)\,C(x)\,e^{A(x)}\\
&=\frac{dC(x)}{dx}e^{A(x)}+C(x)\,a(x)\,e^{A(x)}-a(x)\,C(x)\,e^{A(x)}\\
&=\frac{dC(x)}{dx}e^{A(x)},
\end{aligned} \tag{1.8.28}$$

なので，元々の微分方程式から次式が得られる．

$$\frac{dC(x)}{dx}e^{A(x)}=g(x)\,. \tag{1.8.29}$$

この方程式の解の 1 つは

$$C\left(x\right)=\int dx\,e^{-A(x)}g\left(x\right), \tag{1.8.30}$$

なので，斉次方程式の一般解と組み合わせることで，非斉次方程式の一般解は

$$\begin{aligned} y &= Ce^{A(x)}+e^{A(x)}\int dx\,g\left(x\right)e^{-A(x)}, \\ &= e^{A(x)}\left[\int dx\,e^{-A(x)}g\left(x\right)+C\right]. \end{aligned} \tag{1.8.31}$$

となることが分かった．このように，斉次方程式の一般解の任意定数を関数とみなして，非斉次方程式の特殊解を求める方法を定数変化法と呼ぶ．この方法はより高階の方程式に対しても使える．

実は，この非斉次方程式について，Eq. (1.4.7) のときと同じで，積の微分法から解を求めることが出来る．その解法も紹介しておこう．Eq. (1.8.22) の両辺に，何らかの関数 $f\left(x\right)$ をかける．

$$f\left(x\right)\frac{dy}{dx}+a\left(x\right)f\left(x\right)y=f(x)g\left(x\right). \tag{1.8.32}$$

左辺を

$$f\left(x\right)\frac{dy}{dx}+a\left(x\right)y=\frac{d}{dx}\left[f\left(x\right)y\right], \tag{1.8.33}$$

と書き直せるような関数 $f\left(x\right)$ を求めれば，この方程式は解けたことになる．つまり，

$$\frac{df\left(x\right)}{dx}=a\left(x\right)f\left(x\right), \tag{1.8.34}$$

を $f\left(x\right)$ が満たせば良い．既に知っているようにこの方程式の解の一つは，

$$\begin{aligned} f\left(x\right) &= \exp\left[\int dx\,a\left(x\right)\right] \\ &= e^{-A(x)} \end{aligned} \tag{1.8.35}$$

である．従って，Eq. (1.8.32) は，

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-A(x)}y\right)=e^{-A(x)}g\left(x\right), \tag{1.8.36}$$

である．くどくなってしまうので途中は省略するが，丁寧に式変形すれば，

$$y=\exp\left(A\left(x\right)\right)\left[\int dx\,\exp\left(-A\left(x\right)\right)g\left(x\right)+C\right], \tag{1.8.37}$$

を得る．

例題 9 微分方程式

$$\frac{dy}{dx} + 4xy = 2x, \tag{1.8.38}$$

の一般解を求めよ．

斉次方程式

$$\frac{dy}{dx} + 4xy = 0, \tag{1.8.39}$$

をまず考える．両辺に e^{2x^2} をかけて，

$$\begin{aligned} & e^{2x^2}\frac{dy}{dx} + 4xe^{2x^2}y = 0, \\ & \to \frac{d}{dx}\left(e^{2x^2}y\right) = 0, \end{aligned} \tag{1.8.40}$$

なので，

$$y = Ce^{-2x^2}. \tag{1.8.41}$$

非斉次方程式の特殊解の形として，

$$y = C(x)e^{-2x^2}, \tag{1.8.42}$$

を考える．これを代入すると，

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dx}\left(Ce^{-2x^2}\right) + 4xCe^{-2x^2} = 2x, \\ & \to e^{-2x^2}\frac{dC}{dx} - 4xe^{-2x^2}C + 4xCe^{-2x^2} = 2x, \\ & \to \frac{dC}{dx} = 2xe^{2x^2}, \end{aligned} \tag{1.8.43}$$

が得られる．この微分方程式の特殊解は，

$$C(x) = \frac{1}{2}e^{2x^2} \tag{1.8.44}$$

である．従って，非斉次方程式の一般解は，

$$y = Ce^{-2x^2} + \frac{1}{2}. \tag{1.8.45}$$

1.8.3 定数変化法その 2–斉次方程式への応用–

定数変化法は斉次の線形微分方程式の解を求めるのにも使える．ここでは，2 階の微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 2a\frac{dy}{dx} + a^2y = 0, \tag{1.8.46}$$

を考える．解として $y = e^{\lambda x}$ の形を仮定して上式に代入すると，

$$\begin{aligned}&\lambda^2 - 2a\lambda + a^2 = 0,\\ &\to \lambda = a,\end{aligned}$$

なので，このアプローチからは特殊解が

$$y = e^{ax}, \tag{1.8.47}$$

の一つしか求まらないため，一般解を導くためにはもう一つ特殊解を求める必要がある．もちろん，Eq. (1.4.31) で示したように，既に我々はもう一つの特殊解の形を知っているが，一度忘れてしまったことにして，定数変化法から求めることを考えてみる．もう一つの特殊解の候補として，

$$y = f(x)e^{ax}, \tag{1.8.48}$$

を考えて，与えられた微分方程式に代入すると，

$$\begin{aligned}&\frac{d^2}{dx^2}\left(fe^{ax}\right) - 2a\frac{d}{dx}\left(fe^{ax}\right) + a^2fe^{ax} = 0,\\ &\to \frac{d^2f}{dx^2} = 0,\end{aligned} \tag{1.8.49}$$

この方程式を満たす f の一つは $f = x$ なので，与えられた微分方程式について，e^{ax} 以外の特殊解は xe^{ax} である．従って，一般解は

$$y = C_1e^{ax} + C_2xe^{ax}, \tag{1.8.50}$$

であり，これは以前求めた一般解 (Eq. (1.4.31)) と一致する．

定数変化法に基づく特殊解の導出は，より高階の微分方程式に対しても有効である．そのことを次の例題を通して見ていこう．

例題 10 微分方程式

$$\frac{d^3y}{dx^3} - 4\frac{d^2y}{dx^2} + 5\frac{dy}{dx} - 2y = 0, \tag{1.8.51}$$

の一般解を求めよ．

解の形として $y = e^{\lambda x}$ を仮定して微分方程式に代入すると，

$$\begin{aligned} &\lambda^3 - 4\lambda^2 + 5\lambda - 2 = 0, \\ &\to (\lambda - 1)^2(\lambda - 2) = 0, \\ &\to \lambda = 1\ (\text{重解}),\ 2, \end{aligned} \tag{1.8.52}$$

を得る．従って，e^x，e^{2x} は特殊解であるが，今回の微分方程式は 3 階なので，あと 1 つ特殊解を求める必要がある．そこで，特殊解として

$$y = f(x)e^x, \tag{1.8.53}$$

の形を仮定して，微分方程式に代入すると，

$$\begin{aligned} &\frac{d^3}{dx^3}(fe^x) - 4\frac{d^2}{dx^2}(fe^x) + 5\frac{d}{dx}(fe^x) - 2fe^x = 0, \\ &\to \frac{d^3f}{dx^3} - \frac{d^2f}{dx^2} = 0. \end{aligned} \tag{1.8.54}$$

ここで，$F = d^2f/dx^2$ とおくと，

$$\frac{dF}{dx} - F = 0, \tag{1.8.55}$$

なので，F は

$$F = \frac{d^2f}{dx^2} = Ae^x, \tag{1.8.56}$$

であり，f について解くと，

$$f = Ae^x + Bx + C, \tag{1.8.57}$$

である．従って，$y = fe^x$ より，

$$y = Ae^{2x} + Bxe^x + Ce^x, \tag{1.8.58}$$

である．e^x，e^{2x} は既に求めた特殊解と同じであるから，新たに得られた特殊解は xe^x である．従って，与えられた微分方程式の一般解は

$$y = C_1e^x + C_2xe^x + C_3e^{2x}, \tag{1.8.59}$$

である．

1.8.4 定数変化法その 3 –2 階の非斉次線形方程式–

2 階の非斉次線形方程式として最も一般的な形である次式

$$\frac{d^2y}{dx^2} + a(x)\frac{dy}{dx} + b(x)y = g(x), \tag{1.8.60}$$

を考え，既に斉次方程式の (線形独立な) 解が $y_1(x)$，$y_2(x)$ のように求まっている場合，一般解は

$$y = C_1 y_1(x) + C_2 y_2(x), \tag{1.8.61}$$

で表される．非斉次方程式の特殊解の候補として次式を考える．

$$y = f_1(x)y_1(x) + f_2(x)y_2(x). \tag{1.8.62}$$

これを Eq. (1.8.60) に代入すると，

$$\begin{aligned} &(f_1''y_1 + 2f_1'y_1' + f_!y_1'' + f_2''y_2 + 2f_2'y_2' + f_2y_2'') \\ &+ a\,(x)\,(f_1'y_1 + f_1y_1' + f_2'y_2 + f_2y_2') \\ &+ b\,(x)\,(f_1y_1 + f_2y_2) = g(x). \end{aligned} \tag{1.8.63}$$

ただし，$y_i' = dy_i/dx$，$y_i'' = d^2y_i/dx^2$ $(i = 1, 2)$ と定義した．この式だけでは f_1，f_2 は定まらないので，次の条件を追加で課すことにする．

$$f_1'y_1 + f_2'y_2 = 0. \tag{1.8.64}$$

さらに，この式を x で 1 回微分して，

$$f_1''y_1 + f_1'y_1' + f_2''y_2 + f_2'y_2' = 0, \tag{1.8.65}$$

を得ておく．Eq. (1.8.64), (1.8.65) を Eq. (1.8.63) に代入すると，

$$\begin{aligned} &f_1'y_1' + f_1y_1'' + f_2'y_2' + f_2y_2'' + a(x)\,(f_1y_1' + f_2y_2') + b(x)(f_1y_1 + f_2y_2) = g(x), \\ &\to f_1\underbrace{(y_1'' + a(x)y_1' + b(x)y_1)}_{=0} + f_2\underbrace{(y_2'' + a(x)y_2' + b(x)y_2)}_{=0} + f_1'y_1' + f_2'y_2' = g(x), \\ &\to f_1'y_1' + f_2'y_2' = g(x), \end{aligned} \tag{1.8.66}$$

を得る．Eq. (1.8.64) と Eq. (1.8.66) を連立させることで，

$$f_1' = -\frac{y_2 g(x)}{W(y_1, y_2)}, \tag{1.8.67}$$

$$f_2' = \frac{y_1 g(x)}{W(y_1, y_2)}, \tag{1.8.68}$$

を得る．ただし，$W(y_1, y_2)$ はロンスキー行列式であり，次式で定義される．

$$W(y_1, y_2) = y_1y_2' - y_2y_1'. \tag{1.8.69}$$

従って，特殊解は

$$y = -y_1 \int dx\, \frac{y_2 g(x)}{W(y_1, y_2)} + y_2 \int dx\, \frac{y_1 g(x)}{W(y_1, y_2)}, \tag{1.8.70}$$

なので，Eq. (1.8.60) の一般解は,

$$y = C_1 y_1 + C_2 y_2 - y_1 \int dx\, \frac{y_2 g(x)}{W(y_1, y_2)} + y_2 \int dx\, \frac{y_1 g(x)}{W(y_1, y_2)}, \tag{1.8.71}$$

である．この式は導関数の係数が定数でない場合にも適用できるが，そもそも定数係数でない場合の斉次方程式を求めることが難しいので，実際にこの解法を使うのは，主に定数係数の微分方程式の場合である．係数が関数の場合は，(本テキストでは扱わないが) べき級数解法などを用いて，斉次方程式の一般解を求めていく必要がある．

第 2 章

フーリエ解析入門

波動や振動現象など，何らかの系の状態を表す関数が周期的に振る舞うものは私たちの身の周りに溢れている．例えば，私たちに近い分野でみると，種々の分光学的測定で得られる時系列データ (信号) は周期関数 (とみなせるもの) である．それらは一見するとグチャグチャしていて，ただ漠然と眺めているだけでは新しい知見は得られない．そうではなく，例えば，その信号の中にはどういった振動数の波がどの程度含まれているか，などを取り出すことが出来れば，その現象の理解を深めることができる．その要求に答える数学的手法がフーリエ (Fourier) 解析である．この例に限らず，フーリエ解析は極めて広い分野で使われる強力な手法であり，前章で学んだ微分方程式を解く際にも有効である．そこで，この章ではフーリエ解析について学んでいくことにする．ただし，「フーリエ解析」という名前で 1 期分の講義があるくらいで，フーリエ解析に関する諸事項を幅広くかつ厳格に述べるには圧倒的に時間が足りないので，かなり初歩的な事項を紹介するに留めざるを得ないが，それでも応用範囲は広い．

2.1　フーリエ級数

皆さんにとって馴染みのあるテイラー展開について考えてみよう．テイラー展開とは，次式のように関数 $f(x)$ をべき級数として展開する，というものであった．

$$f\left(x\right)=f\left(a\right)+f'\left(a\right)\left(x-a\right)+\frac{f''\left(a\right)}{2!}\left(x-a\right)^{2}+\cdots. \tag{2.1.1}$$

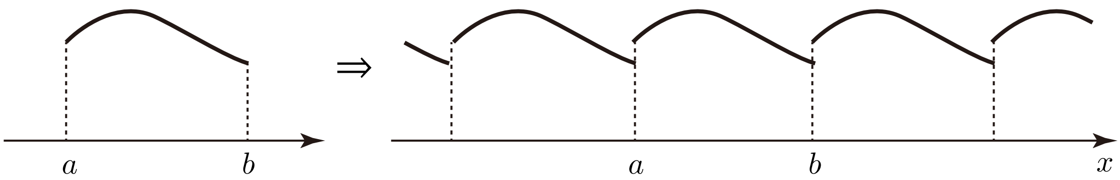
上述のように，テイラー展開ではべき級数となるが，x^0，x^1，x^2，$x^3, \cdots$ 以外にも，何らかの関数のセットで展開出来るのではないかと考えることは，一般性を重んじる (ことが多い) 数学の立場からすると自然なことである．実際，そのような関数のセットを系統立てた考えの元に用意することは可能で[*1]，関数のセットの一つとして，三角関数 (sin, cos) が挙げられる．周期関数を展開する際に，三角関数を用いるのはもっともらしいように思える．実は周期関数を三角関数を用いて展開して得られるものをフーリエ級数と呼び，これから学んでいくことになる．

[*1] このあたりの話はとても面白いのだが，時間の都合上省略する．興味が出た人は直交関数やグラム-シュミットの直交化法といったキーワードで調べてみると良い．決して難しくはない．

まずは，周期関数について整理しておく．周期 $L\ (>0)$ の関数 $f(x)$ とは，

$$f\left(x+L\right)=f\left(x\right), \tag{2.1.2}$$

を満たす関数のことを指す．また，もし $a\leq x\leq b$ の範囲で定義されている関数の場合は，それを周期 $b-a$ の周期関数と一部とみなして，全区間に拡張することができる．



2.1.1 三角関数に関する諸公式

フーリエ解析で現れる式変形では，割と高い頻度で高校数学で学んだタイプの三角関数の定理や積分が現れる．それをその都度証明していくのは大変なので，ここで公式としてまとめておく．

$$\sin\left(\alpha\pm\beta\right)=\sin\alpha\cos\beta\pm\cos\alpha\sin\beta, \tag{2.1.3}$$
$$\cos\left(\alpha\pm\beta\right)=\cos\alpha\cos\beta\mp\sin\alpha\sin\beta, \tag{2.1.4}$$
$$\sin^2\alpha=\frac{1-\cos2\alpha}{2}, \tag{2.1.5}$$
$$\cos^2\alpha=\frac{1+\cos2\alpha}{2}, \tag{2.1.6}$$
$$\sin\alpha\cos\beta=\frac{1}{2}\left(\sin(\alpha+\beta)+\sin\left(\alpha-\beta\right)\right), \tag{2.1.7}$$
$$\sin\alpha\sin\beta=\frac{1}{2}\left(\cos(\alpha-\beta)-\cos(\alpha+\beta)\right). \tag{2.1.8}$$

また，m，n を自然数として次式が成り立つ．

$$\int_0^{2\pi}dx\ \cos nx=0, \tag{2.1.9}$$
$$\int_0^{2\pi}dx\ \sin nx=0, \tag{2.1.10}$$
$$\int_0^{2\pi}dx\ \cos mx\cos nx=0\quad(m\neq n) \tag{2.1.11}$$
$$\int_0^{2\pi}dx\ \cos^2 nx=\pi, \tag{2.1.12}$$
$$\int_0^{2\pi}dx\ \cos mx\sin nx=0, \tag{2.1.13}$$
$$\int_0^{2\pi}dx\ \sin mx\sin nx=0,\quad(m\neq n) \tag{2.1.14}$$
$$\int_0^{2\pi}dx\ \sin^2 nx=\pi. \tag{2.1.15}$$

ここでは積分区間を $0 \leq x \leq 2\pi$ にしているが，これを定数分だけずらした区間 $a \leq x \leq a + 2\pi$ であっても上式は成り立つ．

2.1.2 複素フーリエ級数

それでは実際に周期関数をフーリエ級数の形で表すことを考えてみよう．まず大事なことは，周期 L の関数 $f(x)$ を展開するために用いる三角関数も周期 L の関数でなければならない，ということである．$\sin x$, $\cos x$ は周期 2π の関数であるから，これらを周期 L にするためには引数をいじって，

$$\sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right), \quad \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.16}$$

とすれば良い．ただし，n は整数である．ここでは，オイラーの公式を用いて，sin 関数と cos 関数をまとめて，

$$\exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.17}$$

にしておいて，$f(x)$ を次式のように展開してみる．

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right). \tag{2.1.18}$$

これを複素フーリエ級数と呼ぶ．級数展開では，その展開係数 c_m を求めることが重要となるが，実は前節でまとめた公式を使うとすぐ求められる．両辺に $\exp(-i\frac{2\pi m}{L}x)$ をかけて，区間 $-L/2 \leq x \leq L/2$ で積分すると[*2]，左辺は

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx\, f(x) \exp\left(-i\frac{2\pi m}{L}x\right), \tag{2.1.19}$$

である (特に式変形はしていない)．左辺は,

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_{-L/2}^{L/2} dx\ \exp\left(-\frac{2\pi}{L}(n-m)x\right) \\
&= \sum_{n=\infty}^{\infty} c_n \int_{-L/2}^{L/2} dx \left\{\cos\left(\frac{2\pi}{L}(n-m)x\right) + i\sin\left(\frac{2\pi}{L}(n-m)x\right)\right\},
\end{aligned} \tag{2.1.20}$$

である．ここで，$(2\pi/L)x = X$ と変数変換すると，$dx = (L/2\pi)dX$, また積分区間は $-\pi \leq X \leq \pi$ となるので,

$$\frac{L}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_{-\pi}^{\pi} dX\ \{\cos((n-m)X) + i\sin((n-m)X)\}, \tag{2.1.21}$$

である．$n = m$ のときは,

$$\frac{L}{2\pi}c_m \int_{-\pi}^{\pi} dX\ \{\cos((n-m)X) + i\sin((n-m)X)\} = \frac{L}{2\pi}c_m \int_{-\pi}^{\pi} dX = Lc_m, \tag{2.1.22}$$

[*2] 周期関数の場合は周期 1 つ分を含んでいれば良い．今回は対称性を意識して $-L/2 \leq x \leq L/2$ としている．

となり，$n \neq m$ のときは Eq. (2.1.9) と Eq. (2.1.10) から，

$$\frac{L}{2\pi} c_n \int_{-\pi}^{\pi} dX \ \left\{\cos\left(\left(n-m\right)X\right) + i\sin\left(\left(n-m\right)X\right)\right\} = 0, \tag{2.1.23}$$

となる．つまり，結局生き残るのは $n = m$ の項だけとなり，

$$c_m = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, f\left(x\right) \exp\left(-i\frac{2\pi m}{L}x\right), \tag{2.1.24}$$

を得る．これが複素フーリエ級数の展開係数の表式である．この展開係数のことをフーリエ係数と呼ぶ．今後の便宜のため，式を以下にまとめておく．

$$f\left(x\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.25}$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, f\left(x\right) \exp\left(-i\frac{2\pi n}{L}x\right). \tag{2.1.26}$$

2.1.3 実フーリエ級数

複素フーリエ級数は，$\exp(i\frac{2\pi n}{L}x)$ を展開に用いているが，これを $\sin(\frac{2\pi n}{L}x)$ と $\cos(\frac{2\pi n}{L}x)$ で表してみよう．Eq. (2.1.25) の和を $n = 0$, $n = -\infty \sim -1$, $n = 1 \sim \infty$ に分けてみると，

$$\begin{aligned}
f\left(x\right) &= c_0 + \sum_{n=-\infty}^{-1} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) \\
&= c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_{-n} \exp\left(-i\frac{2\pi n}{L}x\right) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) \\
&= c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{\left(c_n + c_{-n}\right)\cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) + i\left(c_n - c_{-n}\right)\sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)\right\}
\end{aligned} \tag{2.1.27}$$

ここで，

$$a_n = c_n + c_{-n}, \tag{2.1.28}$$

$$b_n = i\left(c_n - c_{-n}\right), \tag{2.1.29}$$

を定義すると，

$$f\left(x\right) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{a_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)\right\}, \tag{2.1.30}$$

となる．上式を実フーリエ級数と呼ぶ．a_n と b_n の表式は，Eq. (2.1.26) から式変形することで出せる．a_n については，

$$\begin{aligned}
a_n &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, f\left(x\right) \left\{\exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi n}{L}x\right)\right\} \\
&= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, f\left(x\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right),
\end{aligned} \tag{2.1.31}$$

となる．b_n も同様にして求めることができて，

$$b_n = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx\, f(x) \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.32}$$

である．実フーリエ級数の式を以下にまとめておく．

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\left\{a_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)\right\}, \tag{2.1.33}$$

$$a_n = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx\, f(x) \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.34}$$

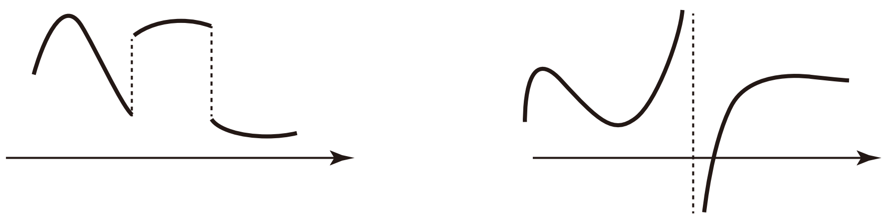
$$b_n = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx\, f(x) \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right). \tag{2.1.35}$$

式変形を追えば分かる通り，複素フーリエ級数と実フーリエ級数は等価である．

2.1.4 フーリエ級数の展開可能性

さて，ここまでは展開される $f(x)$ の性質として周期性しか要請していなかったが，実際にはなんでも良いわけではなく，特定の条件を満たしている必要がある．もし，その条件を満たさない場合は，級数が元々の関数 $f(x)$ に収束しなくなってしまう．とはいえ，テイラー展開では，$f(x)$ が何回でも微分可能であることが必要であったのに対し，フーリエ級数では係数が積分の形で表されているので，テイラー展開の場合よりも条件は厳しくない．たとえ，不連続点や微分不可能な点があっても，そこで積分区間を分割して考えれば良いからだ．

フーリエ級数展開可能な周期関数 $f(x)$ は，その区間において「区分的になめらか」な関数であることが証明されている．「区分的になめらか」とは，有限個の不連続点を除いて $f(x)$ と $f'(x)$ が連続であり，不連続点においても左側，右側極限が有限値をとることを指す．例えば，下図左側の関数は不連続点が存在するが，区分的になめらかであるのに対し，右側の関数は不連続点で発散しているので，区分的になめらかとは言えない．



例題 11　次の関数 $f(x)$ をフーリエ級数展開せよ．

$$f(x)=\begin{cases}-1 & -1\le x<0\\ 1 & 0\le x<1\end{cases}. \tag{2.1.36}$$

複素フーリエ級数，実フーリエ級数どちらから出発しても良いが，ここでは実フーリエ級数から式変形を進めることにする．この関数の周期は $L=2$ なので，

$$f(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{a_n\cos(n\pi x)+b_n\sin(n\pi x)\right\}. \tag{2.1.37}$$

まず，a_n は

$$\begin{aligned}a_n&=\int_{-1}^{1}dx\,f(x)\cos(n\pi x)=-\int_{-1}^{0}dx\,\cos(n\pi x)+\int_{0}^{1}dx\,\cos(n\pi x)\\&=0,\end{aligned} \tag{2.1.38}$$

である．次に，b_n は

$$\begin{aligned}b_n&=-\int_{-1}^{0}dx\,\sin(n\pi x)+\int_{0}^{1}dx\,\sin(n\pi x)\\&=\frac{2}{\pi n}(1-\cos(\pi n))\\&=\begin{cases}0 & n:\text{偶数}\\ \dfrac{4}{\pi n} & n:\text{奇数}\end{cases},\end{aligned} \tag{2.1.39}$$

となる．従って，

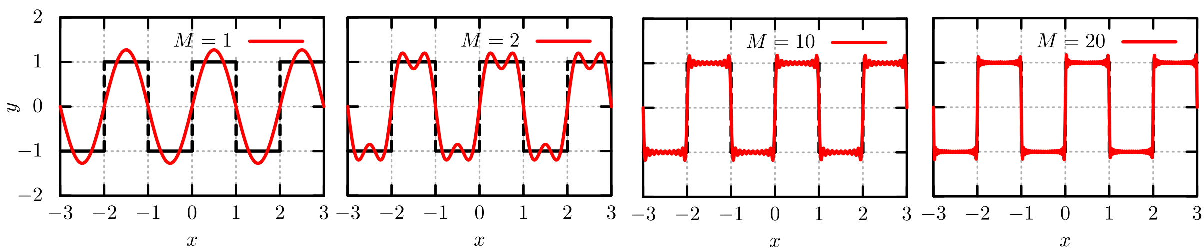
$$f(x)=\frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n-1}\sin((2n-1)\pi x), \tag{2.1.40}$$

が得られる．

補足　部分和で定義される関数

$$f_M(x)=\frac{4}{\pi}\sum_{n=1}^{M}\frac{1}{2n-1}\sin((2n-1)\pi x), \tag{2.1.41}$$

を M を変えてプロットしてみると，次のようになる．



2.1.5 フーリエ余弦級数，正弦級数

時間 t の $f(t)$ を考える．通常，時間の原点は測定開始時刻や何らかの化学現象が起きる (起こす) 時刻にとることが多い．つまり，$t > 0$ である．$f(t)$ を全区間に拡張するとき，奇関数として拡張するか，もしくは偶関数として拡張するかの 2 通りが考えられる．どちらを採用するのが良いかは注目している現象による．区間 $0 \leq t \leq T$ で定義された関数 $f(t)$ について，それぞれの場合で考えてみよう．

i) 偶関数に拡張した場合

フーリエ級数も偶関数になるはずである．その場合は cos 関数だけで展開出来，フーリエ係数は，

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{T}\int_{-T}^{T} dt\, f(t)\cos\left(\frac{\pi n}{T}t\right) \\ &= \frac{2}{T}\int_{0}^{T} dt\, f(t)\cos\left(\frac{\pi n}{T}t\right), \end{aligned} \tag{2.1.42}$$

$$b_n = 0, \tag{2.1.43}$$

となる．偶関数に拡張したときのフーリエ級数をフーリエ余弦級数と呼ぶ.

ii) 奇関数に拡張した場合

フーリエ級数も奇関数になるはずである．その場合は sin 関数だけで展開出来，フーリエ係数は,

$$\begin{aligned} a_n &= 0, \\ b_n &= \frac{2}{T}\int_{0}^{T} dt\, f(t)\sin\left(\frac{\pi n}{T}t\right), \end{aligned} \tag{2.1.44}$$

となる．奇関数に拡張したときのフーリエ級数をフーリエ正弦級数と呼ぶ.

2.1.6 フーリエ積分

これまでは周期関数を扱ってきたが，その適用範囲を $-\infty \sim \infty$ の区間で定義された非周期関数 $f(x)$ に拡張することを考えてみる．この取り組みが，後で学ぶフーリエ変換につながっていく．

$f(x)$ として，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)| = M < +\infty, \tag{2.1.45}$$

つまり，この積分が有限値になることを要請する．これを絶対可積分と呼ぶ.

まずは，$f(x)$ の定義区間を $-L/2 \leq x \leq L/2$ としておいて，色々と式変形した後に $L \to \infty$ に飛ばして，周期性をなくす，という戦略をとることにする．このとき，$f(x)$ の複素フーリエ級数は,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.46}$$

$$c_n = \frac{1}{L}\int_{-L}^{L} dx\, f(x)\exp\left(-i\frac{2\pi n}{L}x\right), \tag{2.1.47}$$

である．ここで，

$$\Delta u = \frac{2\pi}{L}, \tag{2.1.48}$$

を定義すると，

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dt\, f(t) \exp\left(-i\frac{2\pi n}{L}t\right)\right\} \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{\frac{\Delta u}{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2} dt f(t) \exp(-in\Delta u t)\right\} \exp(in\Delta u x), \end{aligned} \tag{2.1.49}$$

と表せる．$L \to \infty$ のとき，$\Delta u \to 0$ であり，区分求積

$$\lim_{\Delta u \to 0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta u F(n\Delta u) = \int_{-\infty}^{\infty} du\, F(u), \tag{2.1.50}$$

を用いると，

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} du\, \left(\int_{-\infty}^{\infty} dt\, f(t) \exp(-iut)\right) \exp(iux), \tag{2.1.51}$$

を得る．これをフーリエ積分と呼ぶ．

例題 12　以下の問いに答えよ.

(1)　関数

$$f\left(x\right)=\begin{cases}1 & -1\leq x<1\\ 0 & \text{それ以外}\end{cases}, \tag{2.1.52}$$

のフーリエ積分を求めよ．フーリエ積分は積分表示のままで良い.

(2)　次の積分を求めよ.

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{x}dx. \tag{2.1.53}$$

---

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{-iut} = \frac{2\sin u}{u}, \tag{2.1.54}$$

であるから，フーリエ積分は,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{\sin u}{\pi u} e^{iux}. \tag{2.1.55}$$

(2)　(1) で求めたフーリエ積分に対し，$x=0$ を代入すると,

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} du\, \frac{\sin u}{\pi u}, \\ \rightarrow & \int_{-\infty}^{\infty} du\, \frac{\sin u}{u} = \pi. \end{aligned} \tag{2.1.56}$$

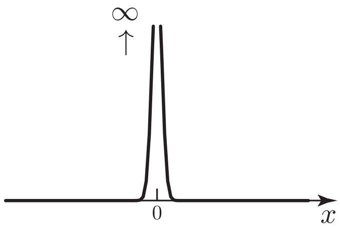
$\sin u/u$ は偶関数であるから,

$$\int_0^\infty du\, \frac{\sin u}{u} = \frac{\pi}{2}, \tag{2.1.57}$$

を得る.

2.2 ディラックのデルタ関数

フーリエ変換を学ぶ前に，ディラックのデルタ関数 ($\delta(x)$) と呼ばれる，奇妙な関数 (超関数と呼ばれる) について解説しておく．デルタ関数は，例えば電荷が 1 点に集中した点電荷などを表現するために用いられる．デルタ関数のイメージとして，下図のようなものを思い浮かべれば良い．



つまり，$x=0$ から少しでも離れたところではゼロで，$x=0$ では無限大の高さの鋭いピークが立っているようなものである．とは言っても，無限大の高さだけでは漠然としているので，全空間積分が 1，という制約を設けておくことにする．これを数式に直すと，

$$\delta\left(x\right)=0,\quad (x\neq 0), \tag{2.2.1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\delta\left(x\right)=\int_{-\epsilon}^{\epsilon}dx\,\delta\left(x\right)=1, \tag{2.2.2}$$

である．ここで，ϵ は微小な正の実数であり，2 つめの式の真ん中は，$x=0$ のごく近傍しか積分値には効いてこないことを表している．また，$\delta(x)$ は偶関数であるとする．

$$\delta(-x)=\delta(x). \tag{2.2.3}$$

Eq. (2.2.2) と Eq. (2.2.2) を合わせて考えると，

$$\int_{0}^{\infty}dx\,\delta(x)=\int_{0}^{\epsilon}dx\,\delta(x)=\frac{1}{2}, \tag{2.2.4}$$

である．$\delta(x)$ は引数がゼロのところで鋭いピークが立つような関数だから，$\delta(x-a)$ のように定数がついている場合には，$x=a$ で鋭いピークが立つようになる，つまり，

$$\delta\left(x-a\right)=0,\quad (x\neq a), \tag{2.2.5}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\delta\left(x-a\right)=\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}dx\,\delta\left(x\right)=1, \tag{2.2.6}$$

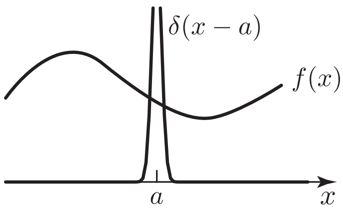
である．

2.2.1 デルタ関数が持つ性質

デルタ関数に何らかの関数 $f(x)$ をかけたもの

$$f\left(x\right)\delta\left(x-a\right), \tag{2.2.7}$$

を考えてみよう．この状況をイメージするために次の図を見て欲しい．



$f(x)$ がどんな形をしていようが，$x \neq a$ では，デルタ関数の値はゼロなので，そのような x での積の値はゼロであり，$x = a$ のときの $f(x)$ の値 $f(a)$ のみが生き残る．つまり，$\delta(x-a)f(x)$ を積分したものは

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\,\delta(x-a) = f(a)\,, \tag{2.2.8}$$

のようになる．このように，デルタ関数はそれにかかっている関数の特定の値を引っ張り出してくる働きをする．実は，Eq. (2.2.8) の方こそ，Eq. (2.2.2) よりも基本的なデルタ関数の定義である．実際，$f(x) = 1$ とすると，Eq. (2.2.6) が得られる．にも関わらず，Eq. (2.2.2) の方を定義として最初に導入したのは，デルタ関数が特定の位置で鋭いピークが立つ関数，というイメージを持って欲しかったからである．

次に，

$$\delta(\alpha x), \tag{2.2.9}$$

のように，変数 x が定数倍されているものを考える．この場合は $X = \alpha x$ のように変数変換すれば $dx = dX/\alpha$ だから，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} dX\, f(X) = \frac{1}{\alpha}, \tag{2.2.10}$$

となる．つまり，

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\delta(x), \tag{2.2.11}$$

である．

2.2.2 デルタ関数の導関数

デルタ関数の導関数 $\delta'(x)$ もよく登場するので紹介しておこう．以下の積分を考える．

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta'(x-\alpha)\, f(x)\,. \tag{2.2.12}$$

これを部分積分すると，

$$I = \Big[\delta(x-\alpha)\, f(x)\Big]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x-\alpha) f'(x) \tag{2.2.13}$$

$x=-\infty,\ \infty$ でデルタ関数の値はゼロなので当然，1 項目はゼロだから，2 項目だけが残り，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta'(x-\alpha) f(x) = -f'(x-\alpha), \tag{2.2.14}$$

が得られる．つまりデルタ関数の導関数は，それにかかっている関数の特定の x での導関数を取り出す働きをする．同じ手続きで，デルタ関数の n 階導関数 $\delta^{(n)}(x)$ も考えることが出来るので，各自でやってみよう．結果だけを書いておくと，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta^{(n)}(x-a) f(x) = (-1)^n f^{(n)}(a), \tag{2.2.15}$$

である．

2.2.3 デルタ関数の具体的な形

私たちが既に知っている関数に対して，特定の極限を考えることでデルタ関数になるものがいくつか知られている．例えば，課題であったように

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{\infty}^{\infty} dk\, e^{-ikx}, \tag{2.2.16}$$

もデルタ関数の一つの表現である．これについてはフーリエ変換のところで再び触れる．ここでは，他の例について紹介する．もちろん，ここで紹介するもの以外にもデルタ関数の具体的な形を与えるものは色々あるので，興味があれば調べてみると良い．

2.2.3.1 矩形関数

矩形関数を次式で定義する．

$$\delta_\epsilon(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\epsilon} & |x| \le \dfrac{\epsilon}{2} \\ 0 & |x| > \dfrac{\epsilon}{2} \end{cases}, \tag{2.2.17}$$

矩形関数を用いると，デルタ関数は

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0} \delta_\epsilon(x), \tag{2.2.18}$$

で表される．

2.2.3.2 ガウス関数

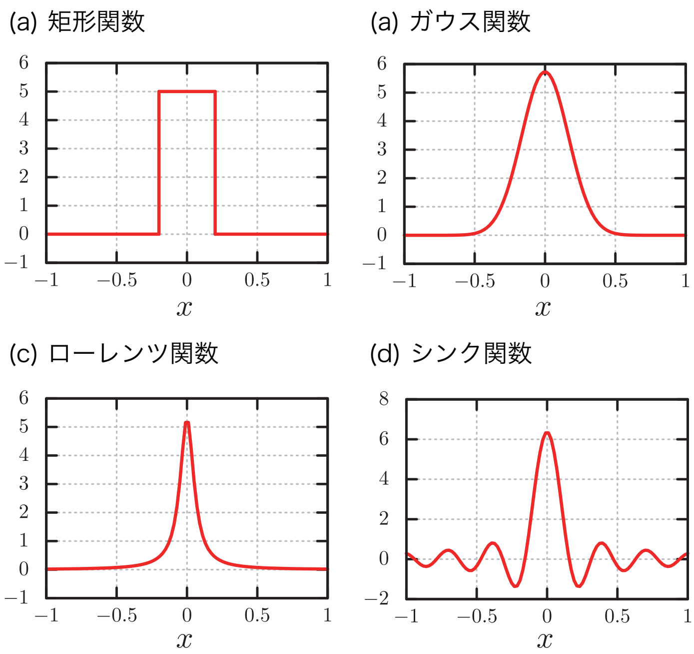
$$\delta(x) = \lim_{a\to\infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp\left(-ax^2\right). \tag{2.2.19}$$

2.2.3.3 ローレンツ関数

$$\delta(x) = \lim_{a\to 0} \frac{1}{\pi}\frac{a}{x^2+a^2}. \tag{2.2.20}$$

2.2.3.4 シンク関数

$$\delta(x) = \lim_{a\to\infty} \frac{\sin ax}{\pi x} \tag{2.2.21}$$



2.2.4 3 次元空間のデルタ関数

3 次元空間 $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ (T は転置を表す) に対するデルタ関数 $\delta(\mathbf{r})$ は,

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)\,, \tag{2.2.22}$$

で定義される.

2.3 フーリエ変換

再度，フーリエ積分の式 Eq. (2.1.51) を示しておく (ただし，変数 u を k に変えている).

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk \underline{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx'\, f(x')\, e^{-ikx'}\right)} e^{ikx}. \tag{2.3.1}$$

下線部は，フーリエ級数における展開係数 c_n に対応するものであり，これは関数 $f(x)$ に含まれる成分 k[*3]の波の量を表している．そこで，$f(x)$ から成分 k の波の量を抽出する操作 $\mathcal{F}[f(x)]$ をフーリ

[*3] ここでは単に成分 k と読んでいるが，k の呼び方は x が持つ次元によって名前が異なる．例えば，x が長さの次元を持つ場合，k を角波数とよび，x が時間の次元を持つときには角周波数 (角振動数) と呼ぶ．多くの物理の教科書では，角波数と角周波数を k と ω で使い分けている．

エ変換と呼び，変換後の関数を $F(k)$ と表すことにすると，

$$F(k) = \mathcal{F}[f(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx}, \tag{2.3.2}$$

である．また，変換して得られた関数 $F(k)$ のこと自体をフーリエ変換と呼ぶことがほとんどなので，混乱しないように．$F(k)$ から元々の関数 $f(x)$ に戻す操作のことをフーリエ逆変換 $\mathcal{F}^{-1}[F(k)]$ と呼び，Eq. (2.3.1) から，

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}[F(k)] = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, F(k)\, e^{ikx}, \tag{2.3.3}$$

である．

このテキストでの x 座標のことを実空間，k 座標のことをフーリエ空間と呼ぶことがしばしばある．このテキストでも，その名前をこれから使っていくことにする．

2.3.1 3 次元空間でのフーリエ変換

3 次元空間 $\mathbf{r}$ の関数 $f(\mathbf{r})$ のフーリエ変換 $F(\mathbf{k})$ は次式のように表される．

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} e^{-ik_z z} f(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}). \end{aligned} \tag{2.3.4}$$

逆変換は次式である．

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} F(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{k}). \end{aligned} \tag{2.3.5}$$

2.3.2 デルタ関数のフーリエ変換

デルタ関数 $\delta(x)$ は，次のような性質をもつものであった．

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x-a)\, f(x) = f(a). \tag{2.3.6}$$

デルタ関数をフーリエ変換すると，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \delta(x-a) = e^{-ika}, \tag{2.3.7}$$

となる．$a = 0$ の場合は，

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \delta(x) = 1, \tag{2.3.8}$$

である[*4]．なので，1 のフーリエ逆変換を考えると，

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}, \tag{2.3.9}$$

が得られる．

2.3.3 フーリエ変換が持つ性質

フーリエ変換が持つ重要な性質について，以下でまとめておく．無条件で成り立つわけではない関係式もあるので，それは導出過程で述べていくことにする[*5]．以下では，$F(k) = \mathcal{F}[f(x)]$, $G(k) = \mathcal{F}[g(x)]$，また a，b は定数とする．

- 線形性

$$\mathcal{F}[af(x) + bg(x)] = aF(k) + bG(k) \tag{2.3.10}$$

- 移動性

$$\mathcal{F}\left[e^{iax} f(x)\right] = F(k-a) \tag{2.3.11}$$

$$\mathcal{F}[f(x-a)] = e^{-iak} F(k) \tag{2.3.12}$$

- 拡大性

$$\mathcal{F}[f(ax)] = \frac{1}{|a|} F\left(\frac{k}{a}\right). \tag{2.3.13}$$

- 導関数のフーリエ変換

$$\mathcal{F}\left[\frac{d^n}{dx^n} f(x)\right] = (ik)^n F(k) \tag{2.3.14}$$

- 積分のフーリエ変換

$$\mathcal{F}\left[\int_{-\infty}^{x} dt\, f(t)\right] = \frac{1}{ik} F(k). \tag{2.3.15}$$

- 畳み込み積分のフーリエ変換

$$\mathcal{F}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, g(x-y)\right] = F(k)\, G(k), \tag{2.3.16}$$

[*4] 余談だが，知り合いの先生の御子息 (小学生) は，「デルタ関数のフーリエ変換は何だ？言ってみろ」と父親から聞かれて，「イチ！」と答えたらしい．そのお子さんにはいつか「$\delta(x-a)$ のフーリエ変換は？」と聞いてみたいところだ．

[*5] ただし，ここでの導出は数学的に粗い部分がある．例えば，途中で現れる式のフーリエ変換可能性などについての議論はいくつかすっ飛ばしている．気になる人はフーリエ解析や応用数学の教科書を参照すると良い．大体のものに載っているはずである．

2.3.3.1 線形性

フーリエ変換では次の関係が成り立つ.

$$\mathcal{F}\left[af\left(x\right)+bg\left(x\right)\right]=aF\left(k\right)+bG\left(k\right). \tag{2.3.17}$$

これが成り立つのは，積分に線形性があるからである．つまり，

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left[af(x)+bg(x)\right]&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \left(af(x)+bg(x)\right)e^{-ikx}\\&=a\int_{-\infty}^{\infty}dx\,f(x)e^{-ikx}+b\int_{-\infty}^{\infty}dx\,g(x)e^{-ikx}\\&=aF(k)+bG(k).\end{aligned} \tag{2.3.18}$$

2.3.3.2 移動性

a を定数として，次式が成り立つ.

$$\mathcal{F}\left[e^{iax}f\left(x\right)\right]=F\left(k-a\right), \tag{2.3.19}$$

$$\mathcal{F}\left[f\left(x-a\right)\right]=e^{-iak}F\left(k\right). \tag{2.3.20}$$

1 つ目は次のようにして示せる.

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left[e^{iax}f\left(x\right)\right]&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{iax}f\left(x\right)e^{-ikx}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\,f\left(x\right)e^{-i(k-a)x}\\&=F\left(k-a\right).\end{aligned} \tag{2.3.21}$$

2 つ目は $X=x-a$ と変数変換することで示せる.

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left[f\left(x-a\right)\right]&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\,f\left(x-a\right)e^{-ikx}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}dX\,f\left(X\right)e^{-ikx-ika}\\&=e^{-ika}F\left(k\right).\end{aligned} \tag{2.3.22}$$

2.3.3.3 拡大性

a を定数として，次に示す関係式が成り立つ.

$$\mathcal{F}\left[f\left(ax\right)\right]=\frac{1}{|a|}F\left(\frac{k}{a}\right). \tag{2.3.23}$$

$X=ax$ と変数変換を行うと，$a>0$ のとき，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-ikx}f\left(ax\right)&=\frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,f\left(X\right)e^{-i(k/a)X}\\&=\frac{1}{a}F\left(\frac{k}{a}\right),\end{aligned} \tag{2.3.24}$$

であり，$a<0$ のとき

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} f(ax) &= \frac{1}{a}\int_{\infty}^{-\infty} dx\, f(X)\, e^{-i(k/a)X} \\
&= -\frac{1}{a} F\left(\frac{k}{a}\right),
\end{aligned}
\tag{2.3.25}
$$

従って，両方の場合を考慮すると，目的の式を得る．

2.3.3.4 導関数のフーリエ変換

$f(x)$ の導関数のフーリエ変換は次式のように表すことができる．

$$
\mathcal{F}\left[\frac{d^n}{dx^n} f(x)\right] = (ik)^n F(k). \tag{2.3.26}
$$

無条件で成り立つわけではないが，それは導出の過程で述べることにする．ここでは，1 階の導関数の場合

$$
\mathcal{F}\left[\frac{d}{dx} f(x)\right] = ikF(k), \tag{2.3.27}
$$

の関係式を示しておくことにする．積の微分法より，

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}\left[\frac{d}{dx} f(x)\right] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{d}{dx} f(x)\, e^{-ikx} \\
&= \Big[f(x)\, e^{-ikx}\Big]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, \frac{d}{dx} e^{-ikx} \\
&= \Big[f(x)\, e^{-ikx}\Big]_{-\infty}^{\infty} + ik\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx} \\
&= \Big[f(x)\, e^{-ikx}\Big]_{-\infty}^{\infty} + ikF(k),
\end{aligned}
\tag{2.3.28}
$$

となる．ここで，$\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = 0$ という条件を課して，第 1 項をゼロにすると，目的の式が得られる．[*6]．n 階の導関数の場合も全く同じ手続きで導出できる．

導関数が，フーリエ空間上では $F(k)$ に ik をかけたものに変わるという性質は，微分方程式を解く上で極めて有効である．

2.3.3.5 フーリエ変換の微分

フーリエ変換 $F(k)$ の微分について，次式が成り立つ．

$$
\mathcal{F}\left[(-ix)^n f(x)\right] = \frac{d^n}{dk^n} F(k). \tag{2.3.29}
$$

[*6] 正確に言うと，$f'(x)$ がフーリエ変換可能の場合 ($f'(x)$ が区分的になめらかで絶対可積分)，$\lim_{x\to\pm} f(x) = 0$ が成り立つので，目的の式が得られる．

$n=1$ の場合を示しておく．

$$\begin{aligned}\frac{d}{dk}F(k) &= \frac{d}{dk}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (-ix)\, f(x)\, e^{-ikx} \\ &= \mathcal{F}\left[-ixf(x)\right]. \end{aligned} \tag{2.3.30}$$

$n=2$ 以降も同様にして示すことが出来る．

2.3.3.6 積分のフーリエ変換

$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) = 0$ を満たす関数 $f(x)$ について，次式が成り立つ．

$$\mathcal{F}\left[\int_{-\infty}^{x} dt\, f(t)\right] = \frac{1}{ik}F(k). \tag{2.3.31}$$

先ほどと同様，積の微分法から導くことが出来る．

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left[\int_{-\infty}^{x} dt\, f(t)\right] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\int_{-\infty}^{\infty} dt\, f(t)\right) e^{-ikx} \\ &= \left[\left(\int_{-\infty}^{x} dt\, f(t)\right)\frac{e^{-ikx}}{-ik}\right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{ik}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)\, e^{-ikx} \\ &= \frac{1}{ik}F(k). \end{aligned} \tag{2.3.32}$$

2 行目の 1 項目が消えるのは，$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) = 0$ を仮定しているためである．

2.3.3.7 畳み込み積分のフーリエ変換

次式のような形で表される積分を畳み込み積分または合成積と呼ぶ．

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, g(x-y). \tag{2.3.33}$$

また，上式は

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(x-y)\, g(y), \tag{2.3.34}$$

と等価である (変数変換を試してみればすぐ分かる)．理学・工学問わず現れる重要な形の積分である．[*7]畳み込み積分をフーリエ変換すると，

$$\mathcal{F}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, g(x-y)\right] = F(k)\, G(k), \tag{2.3.35}$$

のように表される．この式は，畳み込み積分を計算したかったら，$f(x)$ と $g(x)$ をそれぞれフーリエ変換して，それらの積をとれば良い，ということを主張するものであり，理論的な式変形だけでなく数値解析上も極めて有用なものである．一方で，その導出はシンプルである．まず，

$$e^{-ikx} = e^{-ik(x-y)}e^{-iky}, \tag{2.3.36}$$

[*7] 例えば，私が専門とする液体論では，$h(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) + \rho\int d\mathbf{r}'\, c(\mathbf{r}')\, h(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ という形の方程式が，液体の微視的状態を記述する上で重要となる．この式にも畳み込み積分が含まれている．

と書き換えることを考える．つまり，

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[I(x)] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, g(x-y) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left(f(y)\, e^{-iky} \underline{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, g(x-y)\, e^{-ik(x-y)}} \right), \end{aligned} \tag{2.3.37}$$

のようにする．下線部は $G(k)$ なので，

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[I(x)] &= \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)\, e^{-iky} G(k) \\ &= F(k)\, G(k), \end{aligned} \tag{2.3.38}$$

とできて，目的の式を得る．

2.3.3.8 積のフーリエ変換

今度は積 $f(x)g(x)$ のフーリエ変換を考えてみよう．実は，実空間での関数の積はフーリエ空間上では畳み込み積分になる．

$$\mathcal{F}[f(x)\, g(x)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, F(k')\, G(k-k'). \tag{2.3.39}$$

つまり，フーリエ変換することで式変形が厄介になる．

この式を導出するには，まず $f(x)$ と $g(x)$ のどちらかをフーリエ逆変換の形で表しておく．

$$\mathcal{F}[f(x)\, g(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, e^{ik'x} F(k) \right) g(x). \tag{2.3.40}$$

次に，$e^{-ikx} e^{ik'x} = e^{-i(k-k')x}$ のように，ひとまとめにすることで，

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[f(x)\, g(x)] &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \left(F(k') \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i(k-k')x} g(x) \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, F(k')\, G(k-k'), \end{aligned} \tag{2.3.41}$$

を得る．

例題 13　ガウス関数

$$f(x) = e^{-ax^2}, \quad (a > 0) \tag{2.3.42}$$

のフーリエ変換を求めよ．

$f(x)$ のフーリエ変換を $F(k)$ とおくと，

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} e^{-ax^2}, \tag{2.3.43}$$

である．まず，指数部分は，

$$-ikx - ax^2 = -a\left(x + \frac{ik}{2a}\right)^2 - \frac{k^2}{4a}, \tag{2.3.44}$$

のように平方完成出来るので，

$$\begin{aligned} F(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \exp\left[-a\left(x + \frac{ik}{2a}\right)^2 - \frac{k^2}{4a}\right] \\ &= \exp\left(-\frac{k^2}{4a}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \exp\left[-a\left(x + \frac{ik}{2a}\right)^2\right], \end{aligned} \tag{2.3.45}$$

となる．ガウス積分[*8]

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \tag{2.3.46}$$

を用いることで，

$$F(k) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{k^2}{4a}\right), \tag{2.3.47}$$

を得る[*9]．

[*8] ガウス積分について未習の場合は，公式として受け入れてほしい．心配しなくても，必ず量子力学の講義で学ぶことになる．

[*9] 実はこの解法には少しごまかしが入っているが，その点を理解するためには複素関数論の知識が必要となるので，今回はこれで良しとする．もちろん，結果は正しい．

例題 14　次の $f(x)$ に関する方程式を解け.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy\, f(y)f(x-y) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} e^{-ax^2} \quad (a > 0) \tag{2.3.48}$$

両辺をフーリエ変換すると,

$$\left(F\left(k\right)\right)^2 = e^{-k^2/4a}. \tag{2.3.49}$$

よって,

$$F\left(k\right) = \pm e^{-k^2/8a}, \tag{2.3.50}$$

なので, 逆変換すると,

$$\begin{aligned} f\left(x\right) &= \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} e^{-k^2/8a} \\ &= \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \exp(-2ax^2). \end{aligned} \tag{2.3.51}$$

第 3 章

ラプラス解析入門

前章でフーリエ変換を学んだ．簡単に振り返っておくと，周期関数 $f(x)$ を三角関数のセットで表現するのがフーリエ級数展開，そして周期無限大の極限をとったものがフーリエ変換なのだった．フーリエ変換には，実空間 (x) 上での畳み込み積分がフーリエ空間 (k) 上では単純な 2 つの関数の積になるなど，理論展開や数値解析を行う上で有用な性質を持つ．一方で，物理や化学で現れる時刻 t の関数 $f(t)$ の多くは $t > 0$ で定義されるものであり，区間 $-\infty \sim \infty$ の積分で表されるフーリエ変換ではこれらを扱うのは不便である．本章で学ぶラプラス (Laplace) 変換は，フーリエ変換と似たような性質を持ちつつ $t = 0 \sim \infty$ の区間で定義された関数を扱うのに長けた応用数学的な手法である．これを数学的に厳格な立場から学んでいこうとすると，(化学系としては) いささか高度な数学知識が要求されるが，化学工学を始めとする様々な工学分野で広く使われるようになった結果，現在ではラプラス変換の道具としての使い方がかなり整備されており，理論の詳細にこだわらなければ，極めて簡単に様々な微分方程式を初等的な式変形によって解くことができる．本章では，その道具としてのラプラス変換の使い方に重きをおいて解説していくことにする．

3.1　ラプラス変換・逆変換

3.1.1　ラプラス変換

天下り的ではあるが，まずラプラス変換の定義について述べておく．$t > 0$ で区分的に連続な関数 $f(t)$ と**複素数** s に対し，

$$F(s) = \mathcal{L}\left[f\left(t\right)\right] = \int_0^\infty dt\, f\left(t\right) e^{-st}, \tag{3.1.1}$$

で定義される $f(t)$ から $F(s)$ への変換 $\mathcal{L}$ のことをラプラス変換と呼ぶ．加えて，変換された後の関数 $F(s)$ のこともラプラス変換と呼ぶのが一般的である．複素数 s がとりうる値には制限があるのだが，それは例題を通して言及していくことにする．

例題 15 関数

$$f(t) = 1, \tag{3.1.2}$$

のラプラス変換を求めよ．

ラプラス変換の定義に則ると，

$$\begin{aligned} F\left(s\right) &= \int_0^\infty dt\, e^{-st} = \left[-\frac{1}{s}e^{-st}\right]_0^\infty \\ &= -\frac{1}{s}\lim_{t\to\infty} e^{-st} + \frac{1}{s}, \end{aligned} \tag{3.1.3}$$

である．s は複素数なので実数 α, β を用いて，

$$s = \alpha + i\beta, \tag{3.1.4}$$

と表せる．今後しばしば $\mathrm{Re}(s)$, $\mathrm{Im}(s)$ なる記号を用いるが，これらはそれぞれ複素数 s の実部，虚部を表す．つまり今回の場合では，

$$\mathrm{Re}(s) = \alpha, \tag{3.1.5}$$

$$\mathrm{Im}(s) = \beta, \tag{3.1.6}$$

である．Eq. (3.1.3) の第 1 項は，

$$\frac{1}{s}\lim_{t\to\infty} e^{-st} = \frac{1}{s}\lim_{t\to\infty} e^{-\alpha t}e^{-i\beta t}, \tag{3.1.7}$$

と表せるので，極限が特定の値に収束するためには，

$$\mathrm{Re}(s) = \alpha > 0, \tag{3.1.8}$$

とする必要がある．この条件を満たす場合，極限は 0 に収束するので，ラプラス変換は

$$F(s) = \frac{1}{s}, \quad (\mathrm{Re}(s) > 0) \tag{3.1.9}$$

である．

この例題で見たように，任意の s について，ラプラス変換が存在するわけではなく，とりうる s の範囲は $f(t)$ に依存する．

ラプラス変換の存在について議論するために，まず指数位数 (exponential order) なるものを導入する．$f(t)$ が指数 α 位の関数であるとは，定数 M, α に対して $f(t)$ が

$$|f(t)| \leq Me^{\alpha t}, \quad (0 < t < \infty) \tag{3.1.10}$$

を満たすことをいう．そして，$f(t)$ が区分的に連続で指数 α 位の関数であるならば，$\mathrm{Re}(s) > \alpha$ を満たす任意の s に対し，ラプラス変換が存在する．これは，次の不等式を考えることで示せる．

$$\begin{aligned}
\left| \int_0^\infty dt, f(t)e^{-st} \right| &\leq \int_0^\infty dt \, \left| e^{-st} \right| |f(t)| \\
&= \int_0^\infty dt \, e^{-\mathrm{Re}(s)t} \, |f(t)| \\
&\leq \int_0^\infty dt \, e^{-\mathrm{Re}(s)t} Me^{\alpha t} \\
&= \left[-\frac{M}{\mathrm{Re}(s) - \alpha} e^{-(\mathrm{Re}(s)-\alpha)t} \right]_0^\infty .
\end{aligned} \tag{3.1.11}$$

$\mathrm{Re}(s) - \alpha > 0$ であるから，最後の行は有限の値に収束する．従って，

$$\int_0^\infty dt \, f(t)e^{-st}, \tag{3.1.12}$$

も収束する．つまり，確かにラプラス変換が存在する．

ラプラス変換には，$\mathrm{Re}(s) > \alpha$ ではラプラス変換が存在するが，$\mathrm{Re}(s) < \alpha$ では存在しないような定数 α が存在する．この α のことを収束座標と呼び，複素平面上の $\mathrm{Re}(s) > \alpha$ の領域を収束半平面と呼ぶ．

例題 16 次の関数 $f(t)$ のラプラス変換 $F(s)$ を求めよ.

(1) $f(t) = a$

(2) $f(t) = t^n$

(3) $f(t) = e^{at}$

(4) $f(t) = \sin(at)$

(5) $f(t) = \cos(at)$

(1)

$$F(s) = \int_0^\infty dt\, ae^{-st} = a\int_0^\infty dt\, e^{-st} = \frac{a}{s} \tag{3.1.13}$$

(2)

$$F(s) = \int_0^\infty dt\, t^n e^{-st} \tag{3.1.14}$$

上式で $st = u$ とおくと,

$$\begin{aligned} F(s) &= \frac{1}{s}\int_0^\infty du\left(\frac{u}{s}\right)^n e^{-u} = \frac{1}{s^{n+1}}\int_0^\infty du\, u^n e^{-u} \\ &= \frac{\Gamma(n+1)}{s^{n+1}} \end{aligned} \tag{3.1.15}$$

ただし,$\Gamma(n)$ はガンマ関数と呼ばれ,

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty du\, u^{n-1}e^{-u} \tag{3.1.16}$$

で定義される.n が整数のとき,

$$\Gamma(n) = (n-1)! \tag{3.1.17}$$

であることから,階乗を一般化したものと言える.

(3)

$$\begin{aligned} F(s) &= \int_0^\infty dt\, e^{at}e^{-st} = \left[-\frac{e^{-(s-a)t}}{s-a}\right]_0^\infty \\ &= \frac{1}{s-a} \end{aligned} \tag{3.1.18}$$

(4)

$$\begin{aligned} F(s) &= \int_0^\infty dt\, \sin(at)e^{-st} = \int_0^\infty dt\, \frac{e^{iat}-e^{-iat}}{2i}e^{-st} \\ &= \frac{1}{2i}\int_0^\infty dt\, \left(e^{-(s-ia)t} - e^{-(s+ia)t}\right) \\ &= \frac{a}{s^2+a^2} \end{aligned} \tag{3.1.19}$$

(5) (4) とほとんど同じなので,答えだけ記す.

$$F(s) = \frac{s}{s^2+a^2} \tag{3.1.20}$$

3.1.2 ラプラス変換が持つ性質

冒頭で述べたように，ラプラス変換はフーリエ変換とよく似た性質を持つ．ここではそれを紹介する．ただし，以下では関数 $f(t)$ (指数 α 位, $t<0$ でゼロ) のラプラス変換をそれぞれ $F(s)$ とする．また，$\mathrm{Re}(s)>\alpha$ とする．

- 線形性

$$\mathcal{L}\left[af(t)+bg(t)\right]=aF(s)+bG(s). \tag{3.1.21}$$

- 移動性

$$\mathcal{L}\left[f(t-a)\Theta(t-a)\right]=e^{-as}F(s), \tag{3.1.22}$$

$$\mathcal{L}\left[e^{at}f(t)\right]=F(s-a), \tag{3.1.23}$$

ただし，$a>0$ である．$\Theta(t)$ はヘヴィサイドの階段 (step) 関数と呼ばれるものであり，次式で定義される．

$$\Theta(t)=\begin{cases}0 & t<0\\ 1 & t>0\end{cases}. \tag{3.1.24}$$

- 拡大性

$$\mathcal{L}\left[\frac{1}{a}f\left(\frac{t}{a}\right)\right]=F(as), \quad a>0. \tag{3.1.25}$$

- 導関数のラプラス変換

$$\mathcal{L}\left[\frac{d}{dt}f(t)\right]=sF(s)-f(0). \tag{3.1.26}$$

n 階導関数 $f^{(n)}(t)$ のラプラス変換は

$$\mathcal{L}\left[f^{(n)}(t)\right]=s^nF(s)-s^{n-1}f(0)-s^{n-2}f'(0)-\cdots-sf^{(n-2)}(0)-f^{(n-1)}(0), \tag{3.1.27}$$

である．ラプラス変換をすることで微分演算子が消えるので，微分方程式を解くのに有効な公式である．

- 積分のラプラス変換

$$\mathcal{L}\left[\int_0^t d\tau\, f(\tau)\right]=\frac{1}{s}F(s). \tag{3.1.28}$$

ラプラス変換をすることで積分が消えるので，積分方程式 (方程式の中に積分が含まれる) を解くのに有効な公式である．

- 畳み込み積分のラプラス変換

$$\mathcal{L}\left[\int_0^t d\tau\, f(\tau)g(t-\tau)\right]=F(s)G(s). \tag{3.1.29}$$

積分のラプラス変換と同様，積分方程式を解くのに有効である．畳み込み積分の定義がフーリエ変換の場合と少し異なることに注意すること．

3.1.2.1 線形性

ラプラス変換では次の関係性が成り立つ.

$$\mathcal{L}\left[af(t)+bg(t)\right]=aF(s)+bG(s). \tag{3.1.30}$$

これが成り立つのは積分の線形性があるからである．フーリエ変換の場合と同じなので，証明は省略する.

3.1.2.2 移動性

定数 $a>0$ に対し，次式が成り立つ.

$$\mathcal{L}\left[f(t-a)\Theta(t-a)\right]=e^{-as}F(s), \tag{3.1.31}$$

$$\mathcal{L}\left[e^{at}f(t)\right]=F(s-a). \tag{3.1.32}$$

第 1 式の左辺は,

$$\mathcal{L}\left[f(t-a)\Theta(t-a)\right]=\int_a^\infty dt\, f(t-a)e^{-st}, \tag{3.1.33}$$

であり，$\tau=t-a$ と変数変換することで,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[f(t-a)\Theta(t-a)\right]&=\int_0^\infty d\tau\, f(\tau)e^{-s(\tau+a)}\\&=e^{-sa}F(s),\end{aligned} \tag{3.1.34}$$

となるので，右辺と一致する．第 2 式の左辺は,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[e^{at}f(t)\right]&=\int_0^\infty dt\, e^{at}f(t)e^{-st}\\&=\int_0^\infty dt\, f(t)e^{-(s-a)t}\\&=F(s-a),\end{aligned} \tag{3.1.35}$$

となり，右辺と一致する.

3.1.2.3 拡大性

定数 $a>0$ に対し，次の関係性が成り立つ.

$$\mathcal{L}\left[\frac{1}{a}f\left(\frac{t}{a}\right)\right]=F(as). \tag{3.1.36}$$

左辺に対し $\tau=t/a$ と変数変換することで,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\frac{1}{a}f\left(\frac{t}{a}\right)\right]&=\frac{1}{a}\int_0^\infty dt\, f\left(\frac{t}{a}\right)e^{-st}\\&=\int_0^\infty d\tau\, f(\tau)e^{-sa\tau}\\&=F(sa),\end{aligned} \tag{3.1.37}$$

を得る.

3.1.2.4 導関数のラプラス変換

$f(t)$ の導関数のラプラス変換は次式のように表される．

$$\mathcal{L}\left[\frac{d}{dt}f(t)\right] = sF(s) - f(0). \tag{3.1.38}$$

左辺は部分積分により，

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\frac{d}{dt}f(t)\right] &= \int_0^\infty dt\,\left(\frac{d}{dt}f(t)\right)e^{-st} \\ &= \left[f(t)e^{-st}\right]_0^\infty + s\int_0^\infty dt\,f(t)e^{-st} \\ &= \lim_{t\to\infty} f(t)e^{-st} - f(0) + sF(s),\end{aligned} \tag{3.1.39}$$

となる．$f(t)$ の指数位数 α は，

$$\mathrm{Re}(s) > \alpha, \tag{3.1.40}$$

とすると

$$\begin{aligned}\left|f(t)e^{-st}\right| &\le e^{-\mathrm{Re}(s)t}Me^{\alpha t} \\ &= Me^{-(\mathrm{Re}(s)-\alpha)t} \\ &\xrightarrow{t\to\infty} 0,\end{aligned} \tag{3.1.41}$$

なので，第 1 項はゼロとなり，目的の式を得る．

この証明は n 階微分 $f^{(n)}(t)$ のラプラス変換の場合に容易に拡張することが出来る．ここではその結果のみを記すことにする (各自でやってみると良い)．

$$\mathcal{L}\left[f^{(n)}(t)\right] = s^nF(s) - s^{n-1}f(0) - s^{n-2}f'(0) - \cdots sf^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0). \tag{3.1.42}$$

3.1.2.5 積分のラプラス変換

積分のラプラス変換は

$$\mathcal{L}\left[\int_0^t d\tau\,f(\tau)\right] = \frac{1}{s}F(s), \tag{3.1.43}$$

のように表すことができる．左辺を書き直すと，

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\int_0^t d\tau\,f(\tau)\right] &= \int_0^\infty dt\,\left(\int_0^\infty d\tau\,f(\tau)\right)e^{-st} \\ &= \left[-\frac{1}{s}e^{-st}\int_0^t d\tau\,f(\tau)\right]_0^\infty + \frac{1}{s}\int_0^\infty dt\,f(t)e^{-st} \\ &= -\frac{1}{s}\lim_{t\to\infty} e^{-st}\int_0^t d\tau\,f(\tau) + \frac{1}{s}F(s),\end{aligned} \tag{3.1.44}$$

となる．ここで，$f(t)$ の指数位数 α に対し，$\mathrm{Re}(s) > \alpha$ なので，

$$\begin{aligned}\left| e^{-st} \int_0^t d\tau\, f(\tau) \right| &\le e^{-\mathrm{Re}(s)t} \int_0^t d\tau\, M e^{\alpha t} \\ &= e^{-\mathrm{Re}(s)t} \frac{M}{\alpha} \left(e^{-\alpha t} - 1 \right) \\ &= \frac{M}{\alpha} \left(e^{-(\mathrm{Re}(s)-\alpha)t} - e^{-\mathrm{Re}(s)t} \right) \\ &\xrightarrow{t\to\infty} 0, \end{aligned} \tag{3.1.45}$$

となる．従って，第 1 項の極限はゼロとなり，目的の式を得る．

3.1.2.6 畳み込み積分のラプラス変換

次式で定義される畳み込み積分 (フーリエ変換の場合と少し違うので注意)

$$\int_0^t d\tau\, f(\tau) g(t-\tau), \tag{3.1.46}$$

のラプラス変換は

$$\mathcal{L}\left[\int_0^t d\tau\, f(\tau) g(t-\tau) \right] = F(s)G(s), \tag{3.1.47}$$

のように，$f(s)$，$g(s)$ それぞれのラプラス変換の積で表される．ただし，$g(t)$ は $t < 0$ でゼロで，$g(t)$ のラプラス変換を $G(s)$ とする．右辺は

$$\begin{aligned} F(s)G(s) &= \int_0^\infty ds\, e^{-sx} \int_0^\infty dy\, e^{-sy} f(x) g(y) \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty dx dy\, e^{-s(x+y)} f(x) g(y), \end{aligned} \tag{3.1.48}$$

であるが，ここで $t = x + y$, $\tau = x$ と変数変換すると $dxdy = dtd\tau$ であるから，

$$F(s)G(s) = \int_0^\infty dt \int_0^\infty d\tau\, f(\tau) g(t-\tau), \tag{3.1.49}$$

である．さらに，$g(t)$ は $t < 0$ でゼロだから，

$$F(s)G(s) = \int_0^\infty dt \int_0^t d\tau\, e^{-st} f(\tau) g(t-\tau), \tag{3.1.50}$$

となり，目的の式を得る．

3.1.3 ラプラス逆変換

フーリエ変換の場合と同様，ラプラス変換にも逆変換が存在する．ラプラス変換が $f(t)$ から $F(s)$ への変換であったのに対し，逆変換は $F(s)$ から $f(t)$ への変換

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\left[F(s) \right], \tag{3.1.51}$$

を指す．例えば，例題 1 で見たように，

$$f(t) = 1 \underset{\text{ラプラス逆変換}}{\overset{\text{ラプラス変換}}{\rightleftharpoons}} F(s) = \frac{1}{s}, \tag{3.1.52}$$

である．なので，関数 $f_1(t)$，$f_2(t), \cdots$，$f_N(t)$ のラプラス変換 $F_1(s)$，$F_2(s), \cdots, F_N(s)$ が既知であった場合，ラプラス変換

$$F(s) = a_1 F_1(s) + a_2 F_2(s) + \cdots + a_N F_N(s), \tag{3.1.53}$$

の逆変換 $f(t)$ は，ラプラス変換の線形性 Eq. (3.1.21) より

$$f(t) = a_1 f_1(t) + a_2 f_2(t) + \cdots a_N f_N(t), \tag{3.1.54}$$

のように求めることができる．

ラプラス逆変換が積分表示でどのような形になるかを結果だけ示しておく．まず，絶対収束座標なるものを新たに導入する．積分

$$\int_0^\infty dt \left| e^{-st} f(t) \right|, \tag{3.1.55}$$

が，$\mathrm{Re}(s) > \beta$ で収束し，$\mathrm{Re}(s) < \beta$ で収束しないとする．このような β のことを絶対収束座標と呼ぶ．ラプラス逆変換は任意の $a > \beta$ に対して，

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} dt\, F(s) e^{st}, \tag{3.1.56}$$

で表される．この積分はブロムウィッチ (Bromwich) 積分と呼ばれている．ブロムウィッチ積分を用いて逆変換を求めるには，複素関数論の知識が要求される．しかし，代表的な関数のラプラス変換・逆変換はラプラス解析の教科書に表 (ラプラス変換表) としてまとめられているので，それと紹介した公式を駆使することで，逆変換を計算できることが多い．[*1]．このテキストでも簡易版ではあるが，変換表を掲載しておく．

[*1] と言いつつ，私の専門に関わるある理論 (Smoluchowski-Collins-Kimball) に登場する関数は，そのラプラス変換がとても複雑な形をしていて，未だに逆変換を自分の手で導出することをサボっている．もしかしたら，変換表と諸定理を使って導出出来るのかもしれないが，その気力が起きないくらいにゴチャゴチャしているので，試す気も起きなかった．ちなみに，導出自体はかなり昔に報告されているので，頑張れば出来るはずではある．

$f(t)$	$F(s)$
1	$\dfrac{1}{s}$
$\dfrac{t^{n-1}}{(n-1)!}$	$\dfrac{1}{s^n}$
$\cos\omega t$	$\dfrac{s}{s^2+\omega^2}$
$\sin\omega t$	$\dfrac{\omega}{s^2+\omega^2}$
$\cosh\omega t$	$\dfrac{s}{s^2-\omega^2}$
$\sinh\omega t$	$\dfrac{\omega}{s^2-\omega^2}$
$e^{bt}\sin at$	$\dfrac{a}{(s-b)^2+a^2}$
$e^{bt}\cos at$	$\dfrac{a}{(s-b)^2+a^2}$
$\dfrac{t^{n-1}}{(n-1)!}e^{at}$	$\dfrac{1}{(s-a)^n}$
$t\cos at$	$\dfrac{s^2-a^2}{(s^2+a^2)^2}$
$t\sin at$	$\dfrac{2sa}{(s^2+a^2)^2}$
$\delta(t)$	1

例題 17　ラプラス逆変換

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^n}\right] = \frac{t^{n-1}}{(n-1)!}, \tag{3.1.57}$$

を示せ.

まず,

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^n}\right] = \mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s}\frac{1}{s^{n-1}}\right], \tag{3.1.58}$$

のように書き直してみる．すると，積分のラプラス変換 Eq. (3.1.28) が使えることに気づく.

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^n}\right] = \int_0^t d\tau_n\,\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^{n-1}}\right]. \tag{3.1.59}$$

これをもう一度繰り返すと,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^n}\right] &= \int_0^t d\tau_n\,\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s}\frac{1}{s^{n-2}}\right]\\ &= \int_0^t d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1}\,\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^{n-2}}\right],\end{aligned} \tag{3.1.60}$$

となる．この操作を何度も繰り返すことで次式を得る.

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^n}\right] = \int_0^t d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1}\cdots\int_0^{\tau_3} d\tau_2\,\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s}\right]. \tag{3.1.61}$$

ここで，例題 1 や変換表が示すように,

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s}\right] = 1, \tag{3.1.62}$$

なので，結局,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^n}\right] &= \int_0^t d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1}\cdots\int_0^{\tau_3} d\tau_2\\ &= \frac{t^{n-1}}{(n-1)!},\end{aligned} \tag{3.1.63}$$

となる.

3.1.4 ラプラス逆変換の性質

- 微分のラプラス逆変換

  ラプラス変換の 1 階微分について次式が成り立つ．

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{d}{ds}F(s)\right]=-tf(t). \tag{3.1.64}$$

n 階導関数 $F^{(n)}(s)$ については,

$$\mathcal{L}^{-1}\left[F^{(n)}(s)\right]=(-t)^n f(t), \tag{3.1.65}$$

が成り立つ．

この公式によると，$F(s)$ をラプラス逆変換が既知の関数 $F_0(s)$ (ラプラス逆変換は $f_0(t)$) を用いて,

$$F(s)=\frac{d}{ds}F_0(s), \tag{3.1.66}$$

と書き直すことで，逆変換を $f(t)=-tf_0(t)$ と求めることが出来る．

もちろん，これらの公式をラプラス変換の形で,

$$\mathcal{L}\left[-tf(t)\right]=\frac{d}{ds}F(s), \tag{3.1.67}$$

$$\mathcal{L}\left[(-t)^n f(t)\right]=F^{(n)}(s), \tag{3.1.68}$$

と書いても良い．

- 積分のラプラス逆変換

  積分のラプラス逆変換は,

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\int_s^\infty du\, F(u)\right]=\frac{f(t)}{t}, \tag{3.1.69}$$

と表すことが出来る．先ほどと同様,

$$\mathcal{L}\left[\frac{f(t)}{t}\right]=\int_s^\infty du\, F(u), \tag{3.1.70}$$

と表しても良い．

3.1.4.1 微分のラプラス逆変換

ここでは，ラプラス変換

$$\mathcal{L}\left[-tf(t)\right]=\frac{d}{ds}F(s), \tag{3.1.71}$$

を示す．右辺は,

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{ds}F(s) &= \frac{d}{ds}\int_0^\infty dt\, f(t)e^{-st} \\
&= \int_0^\infty dt\, \frac{d}{ds}\left(f(t)e^{-st}\right) \\
&= \int_0^\infty dt\, (-t)f(t)e^{-st} \\
&= \mathcal{L}\left[(-t)f(t)\right],
\end{aligned}
\tag{3.1.72}
$$

となるので[*2]，1 階微分に関するラプラス変換の公式が示せた．n 階微分についても全く同じ手続きで導出出来る．

3.1.4.2 積分のラプラス逆変換

ラプラス変換

$$
\mathcal{L}\left[\frac{f(t)}{t}\right] = \int_s^\infty du\, F(u), \tag{3.1.73}
$$

を示す．右辺は,

$$
\begin{aligned}
\int_s^\infty du\, F(u) &= \int_s^\infty du \int_0^\infty dt\, e^{-ut}f(t) \\
&= \int_0^\infty dt \int_s^\infty du\, e^{-ut}f(t) \\
&= \int_0^\infty dt\, f(t)\left[-\frac{e^{-ut}}{t}\right]_{u=s}^{u=\infty} \\
&= \int_0^\infty dt\, \frac{f(t)}{t}e^{-st} \\
&= \mathcal{L}\left[\frac{f(t)}{t}\right],
\end{aligned}
\tag{3.1.74}
$$

と書き直せるので，目的の式が得られた．

[*2] ホントは微分と積分の順序を入れ替えれるかどうか示さなければならないのだが，細かいことは気にしないことにする．

例題 18 ラプラス逆変換

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{s}{(s^2+a^2)^2}\right], \tag{3.1.75}$$

を求めよ.

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{s}{(s^2+a^2)^2}\right] = -\frac{1}{2a}\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{d}{ds}\left(\frac{a}{s^2+a^2}\right)\right]. \tag{3.1.76}$$

ラプラス変換表を見ると,

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{a}{s^2+a^2}\right] = \sin(at), \tag{3.1.77}$$

なので，微分のラプラス変換より,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{s}{(s^2+a^2)^2}\right] &= -\frac{1}{2a}(-t)\sin(at)\\ &= \frac{t}{2a}\sin(at).\end{aligned} \tag{3.1.78}$$

例題 19　関数

$$f(t) = \frac{\sin(at)}{t}, \tag{3.1.79}$$

のラプラス変換を求めよ.

積分のラプラス逆変換 Eq. (3.1.70) を用いることで,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\frac{\sin(at)}{t}\right] &= \int_s^\infty du\,\mathcal{L}\left[\sin(at)\right]\\ &= \int_s^\infty du\,\frac{a}{u^2+a^2}\\ &= \left[\tan^{-1}\frac{u}{a}\right]_s^\infty = \frac{\pi}{2} - \tan^{-1}\frac{s}{a}.\end{aligned} \tag{3.1.80}$$

3.1.5　ラプラス変換を学ぶ動機：線形常微分方程式への応用

ここまで，ラプラス変換・逆変換の性質や計算方法について述べてきたが，肝心の「何に使えるのか？」については，あんまり触れていなかったので，ここで明らかにしておこう．このテキストでは，ラプラス変換を微分方程式の解法に応用することを目標にしている．まだ，技巧的なことについて解説すべきことがあるが，まずは簡単な線形常微分方程式を例にラプラス変換の有効性について見ていこう．

次の微分方程式を考えよう．

$$\frac{d^2f}{dt^2} + 4f = 0, \quad f(0) = f_0, \quad \left.\frac{df}{dt}\right|_{t=0} = f_0'. \tag{3.1.81}$$

1 章で私たちはこの方程式の解き方を知っていて，実際に解いてみると，

$$f(t) = f_0\cos(2t) + \frac{f_0'}{2}\sin(2t), \tag{3.1.82}$$

となる．これをラプラス変換を用いて解いてみよう．まず，両辺をラプラス変換する．導関数のラプラス変換 Eq. (3.1.27) を用いると，

$$\begin{aligned}&\mathcal{L}\left[\frac{d^2f}{dt^2}\right] + 4\mathcal{L}\left[f\right] = 0,\\ &\to \left(s^2F(s) - sf_0 - f_0'\right) + 4F(s) = 0,\\ &\to (s^2+4)F(s) = sf_0 + f_0',\\ &\to F(s) = f_0\frac{s}{s^2+4} + f_0'\frac{1}{s^2+4}.\end{aligned} \tag{3.1.83}$$

このように，微分方程式にラプラス変換を施すと，初等的な代数方程式に変化する．これを解のラプラス変換 $F(s)$ について解くことは上で見たように簡単で，あとは逆変換するだけである．

$$f(t) = f_0\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{s}{s^2+4}\right] + f_0'\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s^2+4}\right]. \tag{3.1.84}$$

微分方程式が簡単な代数方程式になった分，皺寄せが逆変換にきているのだが，私たちはラプラス変換表を持っている．表を眺めて，式中に現れている逆変換がないか調べてみる，もしくは式変形によって表に載っている形に直せないかを検討する．今回は既に表に載っているので当てはめると，

$$f(t) = f_0 \cos(2t) + \frac{f_0'}{2} \sin(2t), \tag{3.1.85}$$

となり，確かに微分方程式の解になっている．

この例を見て分かるように，ラプラス変換を使った解法は最後の逆変換が実行出来るかどうかにかかっている．次節からは，ラプラス変換を変換表に載っている形に書き直す技巧について解説する．

3.2 部分分数展開によるラプラス逆変換

3.2.1 一般論

前節で，ラプラス変換を学ぶモチベーションを説明するために，ラプラス変換を用いた微分方程式の解法を紹介した．微分方程式の解のラプラス変換 $F(s)$ の多くは,

$$F\left(s\right)=\frac{B\left(s\right)}{A\left(s\right)}=\frac{b_ns^n+b_{n-1}s^{n-1}+\cdots+b_0}{s^n+a_{n-1}s^{n-1}+a_{n-2}s^{n-2}+\cdots+a_0}, \tag{3.2.1}$$

の形をとっている．ここで，$A(s)$，$B(s)$ はそれぞれ分母，分子の多項式を表す．上式のような形で表される関数のことを有理関数と呼ぶ．ラプラス変換が有理関数の場合には，式変形により $F(s)$ をラプラス変換表に載っているシンプルな式の組み合わせで表せる．そのことを以下で見ていこう．

$A(s)$ は n 次なので n 個の根を持つ．値の異なる根を p_1，$p_2,\cdots,$ p_r，そしてそれらの多重度を m_1，$m_2,\cdots,$ m_r とすると[*3],

$$\begin{aligned}A\left(s\right)&=\left(s+p_1\right)^{m_1}\left(s+p_2\right)^{m_2}\cdots\left(s+p_r\right)^{m_r}\\&=\prod_{i=1}^{r}\left(s+p_i\right)^{m_i},\end{aligned} \tag{3.2.2}$$

と書き表せる．$A(s)$ をこのような形で表しておけば，$F(s)$ を部分分数に展開できる．

$$F\left(s\right)=\frac{B\left(s\right)}{A\left(s\right)}=b_n+\sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{m_i}\frac{c_{ik}}{\left(s+p_i\right)^k}. \tag{3.2.3}$$

この形に直すと，何がありがたいかと言うと，ラプラス変換の移動性 Eq. (3.1.22) と変換表にある

$$\mathcal{L}\left[\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}\right]=\frac{1}{s^n}, \tag{3.2.4}$$

$$\mathcal{L}\left[\delta(t)\right]=1, \tag{3.2.5}$$

から，ラプラス逆変換が次のように実行できてしまうのである．

$$\begin{aligned}f\left(t\right)&=b_n\delta\left(t\right)+\sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{m_i}\frac{c_{ik}}{(k-1)!}t^{k-1}e^{-p_it}\\&=b_n\delta\left(t\right)+\sum_{i=1}^{r}e^{-p_it}\left(\sum_{k=1}^{m_i}\frac{c_{ik}}{(k-1)!}t^{k-1}\right).\end{aligned} \tag{3.2.6}$$

従って，$F(s)$ が有理関数の場合には，ラプラス逆変換を求める問題は部分分数展開 Eq. (3.2.3) における係数 c_{ik} を求める問題に帰着する．部分分数分解は高校数学でも学ぶものではあるが，係数を求める方法をいくつか紹介する．

[*3] n と r の関係は $n=\sum_{i=1}^{r}m_i$.

3.2.2 未定係数法

次に示すラプラス変換 $F(s)$ を例に考える．

$$F(s) = \frac{4}{(s+1)^2(s+3)}. \tag{3.2.7}$$

次式のように部分分数展開することを考える．

$$F(s) = \frac{c_1}{(s+1)^2} + \frac{c_2}{s+1} + \frac{c_3}{s+3}. \tag{3.2.8}$$

これは

$$\begin{aligned} F(s) &= \frac{c_1(s+3) + c_2(s+1)(s+3) + c_3(s+1)^2}{(s+1)^2(s+3)} \\ &= \frac{(c_1+c_2)s^2 + (c_1+4c_2+2c_3)s + (3c_1+3c_2+c_3)}{(s+1)^2(s+3)}, \end{aligned} \tag{3.2.9}$$

と書き直せるので，元々の式と比較することで，次の連立方程式を得る．

$$c_1 + c_2 = 0, \tag{3.2.10}$$

$$c_1 + 4c_2 + 2c_3 = 0, \tag{3.2.11}$$

$$3c_1 + 3c_2 + c_3 = 4, \tag{3.2.12}$$

これを解くことにより，$c_1 = 1$，$c_2 = -1$，$c_3 = 1$ を得るので，

$$F(s) = \frac{1}{(s+1)^2} - \frac{1}{s+1} + \frac{3}{s+3}, \tag{3.2.13}$$

である．従って，ラプラス逆変換 $f(t)$ は

$$f(t) = e^{-t}(2t-1) + e^{-3t}, \tag{3.2.14}$$

である．

3.2.3 ヘヴィサイドの方法

未定係数法と同じ $F(s)$ を例に考える．この場合でも，

$$F(s) = \frac{c_1}{(s+1)^2} + \frac{c_2}{s+1} + \frac{c_3}{s+3}, \tag{3.2.15}$$

と展開することを考える．まず，両辺に $(s+3)$ をかけると，

$$\begin{aligned} (s+3)F(s) &= (s+3)\left(\frac{c_1}{(s+1)^2} + \frac{c_2}{s+1}\right) + c_3, \\ \to \frac{4}{(s+1)^2} &= (s+3)\left(\frac{c_1}{(s+1)^2} + \frac{c_2}{s+1}\right) + c_3, \end{aligned} \tag{3.2.16}$$

となる．$s = -3$ を代入することで，$c_3 = 1$ を得る．次に，Eq. (3.2.15) の両辺に $(s+1)^2$ をかける．

$$\frac{4}{s+3} = c_1 + (s+1)c_2 + \frac{(s+1)^2}{s+3}. \tag{3.2.17}$$

$s=-1$ を代入することで，$c_1=2$ を得る．さらに，上式を s で微分すると，

$$-\frac{4}{(s+3)^2}=c_2+(s+1)X(s)+(s+1)^2Y(s), \tag{3.2.18}$$

の形になる．$(s+1)X(s)$ と $(s+1)^2Y(s)$ は $(s+1)^2/(s+3)$ の微分により生ずる項であるが，具体的に求める必要はない．上式に $s=-1$ を代入することで，$c_2=-1$ を得るので，未定係数法と同じ結果が得られた．ヘヴィサイドの方法では，係数を求めるのに連立方程式を解くことを必要としない一方で，微分演算が (場合によっては) 必要となる．

3.2.4 混合法

未定係数法とヘヴィサイドの方法を混合した方法を紹介する．ここでも，未定係数法やヘヴィサイドの方法と同じ $F(s)$ を例にし，同様の部分分数分解を行うことを考える．

$$\begin{aligned}\frac{4}{(s+1)^2(s+3)}&=\frac{c_1}{(s+1)^2}+\frac{c_2}{s+1}+\frac{c_3}{s+3}\\&=\frac{c_1(s+3)+c_2(s+1)(s+3)+c_3(s+1)^2(s+3)}{(s+1)^2(s+3)}.\end{aligned} \tag{3.2.19}$$

両辺の分子を比較することで，

$$4=c_1(s+3)+c_2(s+1)(s+3)+c_3(s+1)^2. \tag{3.2.20}$$

$s=-3$ を代入することで $c_3=1$，そして $s=-1$ を代入することで $c_1=2$ を得る．両辺を s で微分することで，

$$0=c_1+c_2(s+3)+(s+1)X(s). \tag{3.2.21}$$

これに $s=-1$ を代入することで $c_2=-1$ を得る．この方法では，通分する手間さえかければ，単純な微分演算から係数を決定できる[*4]．

[*4] 研究室の学生さんにヒアリングしてみたところ，混合法が一番計算がラクに感じるようだ．

3.3 線形定数係数常微分方程式

$y(t)$ に関する定数係数の常微分方程式

$$\sum_{k=0}^{n} a_i \frac{d^k}{dt^k} y(t) = \sum_{k=0}^{n} b_k \frac{d^k}{dt^k} u(t), \quad a_n = 1, \tag{3.3.1}$$

を考える．これをラプラス変換を用いて整理してみよう．$y(t)$ と $u(t)$ のラプラス変換をそれぞれ $Y(s)$, $U(s)$ とする．両辺をラプラス変換すると，微分のラプラス変換の公式より，

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=0}^{n} a_k \left(s^k Y(s) - \sum_{l=1}^{k} s^{k-l} y^{(l-1)}(0) \right) = \sum_{k=0}^{n} b_k \left(s^k U(s) - \sum_{l=1}^{k} s^{k-l} u^{(l-1)}(0) \right), \\
&\to \underbrace{\left(\sum_{k=0}^{n} a_k s^k \right)}_{\equiv A(s)} Y(s) - \sum_{k=0}^{n} \sum_{l=1}^{k} a_k s^{k-l} y^{(l-1)}(0) = \underbrace{\left(\sum_{k=0}^{n} b_k s^k \right)}_{\equiv B(s)} U(s) - \sum_{k=0}^{n} \sum_{l=1}^{k} b_k s^{k-l} u^{(l-1)}(0), \\
&\to A(s)Y(s) = B(s)U(s) + \underbrace{\sum_{k=0}^{n} \sum_{l=1}^{k} a_k s^{k-l} y^{(l-1)}(0) - \sum_{k=0}^{n} \sum_{l=1}^{k} b_k s^{k-l} b^{(l-1)}(0)}_{\equiv C(s)}, \\
&\to Y(s) = \frac{B(s)}{A(s)} U(s) + \frac{C(s)}{A(s)}.
\end{aligned} \tag{3.3.2}$$

これをラプラス逆変換することで，解 $y(t)$ に関する表式を得る．

$$y(t) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{B(s)U(s) + C(s)}{A(s)} \right]. \tag{3.3.3}$$

$A(s)$, $B(s)$ は微分方程式の係数から決まる関数，$C(s)$ は係数と初期値から決まる関数である．従って，$u(t)$ のラプラス変換 $U(s)$ を計算できれば，上式から $y(t)$ を求めることが出来る．この式そのものが微分方程式を解くのに便利に使える，というわけでは必ずしもないが，定数係数の線形常微分方程式が (逆変換さえ実行できれば) ラプラス変換により解ける，ということを示すものである．ここで，

$$G(s) = \frac{B(s)}{A(s)}, \quad g(t) = \mathcal{L}^{-1} \left[G(s) \right], \tag{3.3.4}$$

を定義すると，畳み込み積分のラプラス変換の公式より，

$$y(t) = \int_0^t d\tau \, g(t-\tau) u(\tau) + \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{C(s)}{A(s)} \right], \tag{3.3.5}$$

と表せる．$g(t)$ のことを伝達関数と呼ぶ[*5]．

[*5] 正確には，$G(s)$ のことを伝達関数と呼ぶ．

例題 20　次の微分方程式を解け．ただし，$y(0) = 1$ とする．

$$\frac{d}{dt}y(t) + 3y(t) + \int_0^t d\tau\, e^{-(t-\tau)}y(\tau) = -e^{-t} \tag{3.3.6}$$

まず，両辺をラプラス変換する．その際，微分のラプラス変換の公式

$$\mathcal{L}\left[\frac{d}{dt}f(t)\right] = sF(s) - f(0), \tag{3.3.7}$$

畳み込み積分のラプラス変換の公式

$$\mathcal{L}\left[\int_0^\infty d\tau\, f\left(t-\tau\right) g\left(\tau\right)\right] = F\left(s\right) G\left(s\right), \tag{3.3.8}$$

を用いることで，

$$\begin{aligned} &(sY\left(s\right) - y\left(0\right)) + 3Y\left(s\right) + \frac{1}{s+1}Y\left(s\right) = -\frac{1}{s+1}, \\ &\to \left(s+3+\frac{1}{s+1}\right)Y\left(s\right) = \frac{s}{s+1}, \\ &\to Y\left(s\right) = \frac{s}{\left(s+2\right)^2}, \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

を得る．さらに，次のように部分分数分解することを考える．

$$Y(s) = \frac{a}{(s+2)^2} + \frac{b}{s+2}. \tag{3.3.10}$$

a，b はどんな方法を使って求めても良いが，ここでは (かなりくどいが) ヘヴィサイドの方法を使う．まず，両辺に $(s+2)^2$ をかけて，

$$s = a + b(s+2), \tag{3.3.11}$$

となるので，$s = -2$ を代入して，$a = -2$ を得る．次に，上式を s で微分して，

$$b = 1, \tag{3.3.12}$$

を得る．従って，

$$Y(s) = -\frac{2}{(s+2)^2} + \frac{1}{s+1}, \tag{3.3.13}$$

である．これをラプラス逆変換する．第 2 項のラプラス変換は既に知っているように，

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s+2}\right] = e^{-2t}, \tag{3.3.14}$$

である．第 2 項のラプラス変換は，

$$\mathcal{L}^{-1}\left[-\frac{2}{(s+2)^2}\right] = 2\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{d}{ds}\left(\frac{1}{s+2}\right)\right], \tag{3.3.15}$$

と書き直せるので，微分のラプラス逆変換の公式

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{d}{ds}F(s)\right] = -tf(t), \tag{3.3.16}$$

を用いて，

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left[-\frac{2}{(s+2)^2}\right] &= 2(-t)\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s+2}\right] \\ &= -2te^{-2t}, \end{aligned} \tag{3.3.17}$$

である．以上より，

$$y(t) = (1-2t)e^{-2t}, \tag{3.3.18}$$

である．

例題 21　次の微分方程式を解け．

$$\frac{d}{dt}y(t) + ay(t) = (1+a^2)\sin t, \quad y(0) = 0 \tag{3.3.19}$$

両辺をラプラス変換すると，

$$\begin{aligned} &sY(s) - y(0) + aY(s) = (1+a^2)\frac{1}{s^2+1}, \\ &\to Y(s) = (1+a^2)\frac{1}{s+a}\frac{1}{s^2+1} \\ &\to Y(s) = \frac{1}{s+a} + \frac{a}{s^2+1} - \frac{s}{s^2+1}, \end{aligned} \tag{3.3.20}$$

となる．従って，ラプラス逆変換することにより，

$$y(t) = e^{-at} + a\sin t - \cos t, \tag{3.3.21}$$

を得る．

比較のために，第 1 章で学んだ常微分方程式の解法を使って解いてみよう．まず，与えられた微分方程式の両辺に e^{at} をかけて，

$$\frac{d}{dt}\left(e^{at}y(t)\right) = (1+a^2)e^{at}\sin t. \tag{3.3.22}$$

両辺を $t = 0 \sim t$ で積分して，

$$\begin{aligned} e^{at}y(t) - y(0) &= (1+a^2)\int_0^t d\tau\, e^{at}\sin t \\ &= (1+a^2)\frac{e^{at}(a\sin t - \cos t) + 1}{1+a^2} \\ &= e^{at}(a\sin t - \cos t) + 1. \end{aligned} \tag{3.3.23}$$

両辺に e^{-at} をかけることで，

$$y(t) = e^{at} + a\sin t - \cos t, \tag{3.3.24}$$

となり，ラプラス変換を使って求めたものと同じ解を得る．両解法で異なるのは，解を求める過程で積分を実行する必要があるか否かである．大体の場合，代数的な計算の方が楽なので，ラプラス逆変換を知っている場合はラプラス変換を用いて解く方が計算が楽になる．

3.4 ラプラス逆変換しなくても分かること

これまで，方程式の解のラプラス変換の表式をまず求め，その後に逆変換を実行することで解を得る，という手続きをとってきた．しかし，今求めたいものが解 $y(t)$ そのものではなく，例えば初期値 $y(0)$ や $t \to \infty$ での値 (最終値, $y(\infty)$) だった場合，ラプラス逆変換を実行しなくてもこれらの情報を得ることが出来る．

3.4.1 初期値の定理

関数 $f(t)$ のラプラス変換を $F(s)$ とすると，初期値 $f(0)$ とラプラス変換 $F(s)$ の間には次の関係式が成り立つ．

$$f(0) = \lim_{s \to \infty} sF(s). \tag{3.4.1}$$

これを初期値の定理と呼ぶ．

これは微分のラプラス変換の公式より，

$$\begin{aligned} \lim_{s \to \infty} (sF(s) - f(0)) &= \lim_{s \to \infty} \left(\int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} f(t) \right) e^{-st} \right) \\ &= \int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} f(t) \right) \left(\lim_{s \to \infty} e^{-st} \right) \\ &= \int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} f(t) \right) \times 0 \\ &= 0, \end{aligned} \tag{3.4.2}$$

と出来ることから導かれる．

3.4.2 最終値の定理

関数 $f(t)$ のラプラス変換を $F(s)$ とすると，最終値 $f(\infty)$ とラプラス変換 $F(s)$ の間には次の関係式が成り立つ．

$$f(\infty) = \lim_{s \to 0} sF(s). \tag{3.4.3}$$

これを最終値の定理と呼ぶ．初期値の定理と同様，微分のラプラス変換の公式から，

$$\begin{aligned} \lim_{s \to 0} (sF(s) - f(0)) &= \lim_{s \to 0} \left(\int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} f(t) \right) e^{-st} \right) \\ &= \int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} f(t) \right) \left(\lim_{s \to 0} e^{-st} \right) \\ &= \int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} f(t) \right) \times 1 \\ &= f(\infty) - f(0), \end{aligned} \tag{3.4.4}$$

と出来ることから導かれる．例えば，ある関数 $\rho(r,t)$ の t に関するラプラス変換 $\hat{\rho}(r,s)$ が次式のように与えられていたとする．

$$\hat{\rho}(r,s) = \frac{1}{s}\left[1 - \frac{R}{r}\exp\left\{\left(\frac{s}{D}\right)^{1/2}(R-r)\right\}\right]. \tag{3.4.5}$$

D，R は正の定数である．具体的には述べないが，この関数は実際にある化学反応モデルに登場するものである．この関数のラプラス逆変換を実行すれば，$\rho(r,t)$ が当然得られるわけだが，応用上最もよく使われるのはこの関数の $t \to \infty$ での振る舞いである．最終値の定理を用いれば，ラプラス逆変換しなくても，

$$\begin{aligned} \rho(r,\infty) &= \lim_{s\to 0} s\hat{\rho}(r,s) \\ &= 1 - \frac{R}{r}, \end{aligned} \tag{3.4.6}$$

と $\rho(r,\infty)$ が簡単に求められる．

第 4 章

偏微分方程式入門

第 1 章で常微分方程式を学んだが，これは未知関数に関する 1 変数の導関数しか含まない方程式のことを指す．それに対し，偏微分方程式はその名前の通り，偏導関数 (つまり，未知関数は多変数関数) を含む方程式のことを指す．

自然現象を数式で表現しようとしたとき，偏微分方程式に帰着することはよくある．例えば，ある粒子が時刻 t で 3 次元的な位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ に存在する確率を ψ と表すことにすると，それは $\psi\,(x, y, z, t)$ のように 4 変数に依存しうるので，その時間変化を表す方程式も偏微分方程式になる，というのは想像に難くない．皆さんはこれから物質移動や熱の移動 (熱伝導) について，化学工学の講義で学んでいくことになる．これらの現象は全て偏微分方程式によって表現されるので，これから化学工学を本格的に学んでいく上で，偏微分方程式は外せない重要なトピックである．実践的には，一般解を求めるよりも，問題設定に応じた初期条件や境界条件を満たす特殊解を求めることが重要となる．そこで，この章では，偏微分方程式で表現される物理現象のいくつかを通して，特殊解を求める方法について学んでいくことにしよう．時間の都合上，代表的な偏微分方程式の中でも数を絞って紹介せざるを得なかったが，興味を持てた人は是非引き続き調べてみてほしい．

4.1 偏微分方程式での問題設定

ここでは，2 階の線形偏微分方程式を例にとって考えよう．x, t の 2 変数に依存する未知関数 $\psi(x, t)$ に対する線形偏微分方程式は，一般に次のように表せる．

$$A\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial t} + C\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} + D\frac{\partial\psi}{\partial x} + E\frac{\partial\psi}{\partial t} + Fu = G. \tag{4.1.1}$$

係数の大小関係に応じて，偏微分方程式を分類することが出来るが[*1]，あまり気にしないでおくことにしよう．以下の解説では，x は物質などの位置，t は時刻を表す変数と考えて読んで欲しい．

[*1] 放物型，双曲型，楕円型など．これらの名前の由来は，微分方程式の形と二次曲線の形の対比から来ている．

4.1.1 初期条件

常微分方程式の場合での初期条件というのは，1 変数の未知関数 $\psi(t)$ の時刻 $t=0$ での値や，導関数の $t=0$ での値のことを指すのだった．これに対し，偏微分方程式では時刻 $t=0$ での未知関数がとる関数が初期条件として与えられる．つまり，初期条件は

$$\psi\left(x, t=0\right)=f(x), \tag{4.1.2}$$

のような形で与えられる．

4.1.2 境界条件

注目している系が，領域 $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$ で定義されるものであったとする．つまり，この系には端点が存在する．偏微分方程式に対して，解やその導関数が端点でとるべき値などが指定されている場合，その条件のことを境界条件と呼ぶ．以下で代表的な境界条件についてまとめておく．

- ディリクレ境界条件
  境界条件として，解が端点でとるべき値が指定されているとき，その条件のことをディリクレ境界条件と呼ぶ．ディリクレ境界条件は,

$$\psi(x_{\min}, t)=a_0, \tag{4.1.3}$$
$$\psi(x_{\max}, t)=a_1, \tag{4.1.4}$$

  のような形で与えられる．
- ノイマン境界条件
  解の導関数がとるべき値が指定されているとき，その条件のことをノイマン境界条件と呼ぶ．ノイマン境界条件は,

$$\left.\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right|_{x=x_{\min}}=a_0, \tag{4.1.5}$$
$$\left.\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right|_{x=x_{\max}}=a_1, \tag{4.1.6}$$

  などのような形で境界条件が与えられる．

4.2 変数分離法

ここでは，例を通して変数分離法について学んでいくことにする．偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right)=4\frac{\partial}{\partial x}\psi\left(x,t\right), \tag{4.2.1}$$

を考える．ただし，初期条件は

$$\psi\left(x, t=0\right)=3e^{2x}+2e^{4x}, \tag{4.2.2}$$

で与えられるとする．変数分離法では，方程式を満たす解 $\phi(x,t)$ がそれぞれの変数のみに依存する関数 $X(x)$, $T(t)$ の積で表せることを仮定する．つまり

$$\psi(x,t) = X(x)\,T(t)\,, \tag{4.2.3}$$

の形を仮定して，初期条件や (後で触れる) 境界条件を満たす特殊解を求めることになる．これを実際に与えられた方程式に代入してみると，

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left[X(x)\,T(t)\right] = 4\frac{\partial}{\partial x}\left[X(x)\,T(t)\right],\\
&\to X(x)\,\frac{d}{dt}T(t) = 4T(t)\,\frac{d}{dx}X(x)\,,\\
&\to \frac{1}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t) = \frac{4}{X(x)}\frac{d}{dx}X(x)\,,
\end{aligned} \tag{4.2.4}$$

となる．最後の式をみると，左辺は t のみに依存する項，右辺は x のみに依存する項からなっている．上式が恒等的に成り立つためには，左辺，右辺ともに定数でなければならない．その定数を λ とおくと，

$$\begin{cases}
\dfrac{1}{T(t)}\dfrac{d}{dt}T(t) = \lambda,\\[2ex]
\dfrac{4}{X(x)}\dfrac{d}{dx}X(x) = \lambda,
\end{cases} \tag{4.2.5}$$

が得られる．それぞれの方程式は常微分方程式なので，第 1 章で学んだことが活きてくる．これらの特殊解は，

$$\begin{cases}
T(t) = Ae^{\lambda t},\\
X(x) = Be^{\frac{\lambda}{4}x},
\end{cases} \tag{4.2.6}$$

である．従って，

$$\psi(x,t) = Ce^{\frac{\lambda}{4}x+\lambda t}, \tag{4.2.7}$$

が解として考えられるが，この形では初期条件をどうやっても満たせない．今回の微分方程式を見ると，線形方程式であるから，解の 1 次結合も方程式の解となる．そこで，

$$\psi(x,t) = C_1e^{\frac{\lambda_1}{4}x+\lambda_1 t} + C_2e^{\frac{\lambda_2}{4}x+\lambda_2 t}, \tag{4.2.8}$$

の形を考えてみる．すると，

$$\psi(x,t=0) = C_1e^{\frac{\lambda_1}{4}x} + C_2e^{\frac{\lambda_2}{4}x}, \tag{4.2.9}$$

であるから，

$$\lambda_1 = 8,\ \lambda_2 = 16,\ C_1 = 3,\ C_2 = 2 \tag{4.2.10}$$

とすれば，与えられた初期条件を満たす解が求められたことになる．

4.3 拡散方程式

x 方向の 1 次元での物質密度の変化を考える．時刻 t，位置 x での物質の密度を $\psi(x,t)$ で表すことにする．$\psi(x,t)$ の時間変化を表す式として，次に示す拡散方程式がよく知られている．

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right)=D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\left(x,t\right),\quad D>0. \tag{4.3.1}$$

D は拡散係数と呼ばれ，物質が拡散する能力の度合いを表す．

4.3.1 有限区間での拡散現象

ここでは，物質が拡散する領域を区切った上で，この方程式の解を求めてみよう．具体的には次のような境界条件を考える．

$$\psi\left(x=0,t\right)=\psi\left(x=L,t\right)=0. \tag{4.3.2}$$

この条件は，端点に到達した物質は，注目している区間から全て抜け出してしまう (つまり，区間内の物質量はその分だけ減少する)，ということを反映している．このあたりの解釈は物理的なものであって偏微分方程式の解法には関係しないので，もし難しければ今の段階ではスキップしても良い．次に，初期条件として次式を考える．

$$\psi\left(x,t=0\right)=f\left(x\right). \tag{4.3.3}$$

ここまで問題を設定しておけば，あとは数学の問題だ．まず，$\psi(x,t)$ として変数分離型の関数形を仮定する．

$$\psi\left(x,t\right)=X\left(x\right)T\left(t\right). \tag{4.3.4}$$

これを Eq. (4.3.1) に代入すると，

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left[X\left(x\right)T\left(t\right)\right]=D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[X\left(x\right)T\left(t\right)\right],\\
&\rightarrow X\left(x\right)\frac{d}{dt}T\left(t\right)=DT\left(t\right)\frac{d^2}{dx^2}X\left(x\right),\\
&\rightarrow \frac{1}{D}\frac{1}{T\left(t\right)}\frac{d}{dt}T\left(t\right)=\frac{1}{X\left(x\right)}\frac{d^2}{dx^2}X\left(x\right).
\end{aligned} \tag{4.3.5}$$

左辺は t のみの関数，右辺は x のみの関数なので，両辺が恒等的に等しくなるためには定数である必要がある．その定数を α とおくと，

$$\begin{cases}
\dfrac{1}{T\left(t\right)}\dfrac{d}{dt}T\left(t\right)=\alpha D,\\[2ex]
\dfrac{1}{X\left(x\right)}\dfrac{d^2}{dx^2}X\left(x\right)=\alpha,
\end{cases} \tag{4.3.6}$$

である．第 1 式の解は，

$$T\left(t\right)=Ae^{\alpha Dt}, \tag{4.3.7}$$

である．$\alpha>0$ の場合，$u\left(x,t\right)$ は $t\to\infty$ で無限大，つまり，粒子密度が無限大になるので，これは物理現象を表す解として不適切である．従って，$\alpha<0$ である．ここでは，$\alpha=-\lambda^2$ と表すことにする．すると，

$$T\left(t\right)=A\exp\left(-\lambda^2Dt\right), \tag{4.3.8}$$

$$X\left(x\right)=B\cos\left(\lambda x\right)+C\sin\left(\lambda x\right), \tag{4.3.9}$$

なので，

$$\psi\left(x,t\right)=AB\exp\left(-\lambda^2Dt\right)\cos\left(\lambda x\right)+AC\exp\left(-\lambda^2Dt\right)\sin\left(\lambda x\right). \tag{4.3.10}$$

境界条件について考えよう．$x=0$ での境界条件より，

$$\psi\left(0,t\right)=AB\exp\left(-\lambda^2Dt\right)=0 \tag{4.3.11}$$

$A=0$ の場合は $\psi=0$ になってしまうので，$B=0$ である．従って，

$$\psi\left(x,t\right)=AC\exp\left(-\lambda^2Dt\right)\sin\left(\lambda x\right), \tag{4.3.12}$$

である．次に，$x=L$ での境界条件より，

$$\psi\left(L,t\right)=AC\exp\left(-\lambda^2Dt\right)\sin\left(\lambda L\right)=0 \tag{4.3.13}$$

$C=0$ では，$\psi=0$ になってしまうので，この条件からは

$$\sin\left(\lambda L\right)=0, \tag{4.3.14}$$

$$\to\lambda_n=\frac{\pi n}{L},\quad n=1,2,\cdots \tag{4.3.15}$$

が得られるので，解の形として

$$\psi\left(x,t\right)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\exp\left(-\lambda_n^2Dt\right)\sin\left(\lambda_nx\right), \tag{4.3.16}$$

が得られる．初期条件から，

$$\psi\left(x,t=0\right)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\sin\left(\lambda_nx\right)=f\left(x\right), \tag{4.3.17}$$

である．これは $f\left(x\right)$ をフーリエ正弦級数展開していることに他ならない．つまり，初期条件で与えられた関数 $f\left(x\right)$ をフーリエ正弦級数展開して，各 λ_n $(=\pi n/L)$ ごとの展開係数 C_n を決定すれば，初期条件を満たす偏微分方程式の解が得られたことになる．

4.3.2 無限区間での拡散現象 (1 次元)

一つ前の例では，有限区間での拡散方程式の解を求めた．その際，初期条件をフーリエ級数展開することで，条件を満たす方程式の解が求められる，というのがミソだった．この方法は注目している系が有限区間で，初期条件で与えられる関数を周期関数に拡張することが出来たのであって，無限区間 $(-\infty < x < \infty)$ では同じ方法は使えない．このような場合は非周期関数を扱えるフーリエ変換を用いると良い．

まず，問題設定をしておこう．拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\left(x,t\right), \tag{4.3.18}$$

に対して，初期条件

$$\psi\left(x,t=0\right) = \psi_0(x), \tag{4.3.19}$$

を課しておく．$\psi(x,t)$ の x に対するフーリエ変換を次式で定義する．

$$\hat{\psi}(k,t) = \int_0^\infty dx\, e^{-ikx}\psi(x,t). \tag{4.3.20}$$

$\psi_0(x)$ についても，同様にしてフーリエ変換 $\hat{\psi}_0(k)$ を定義しておく．次に，拡散方程式のフーリエ変換を行うが，微分のフーリエ変換の公式 (Eq. (2.3.26))

$$\mathcal{F}\left[\frac{d^2}{dx^2}\psi(x,t)\right] = -k^2\hat{\psi}(k,t), \tag{4.3.21}$$

を用いると良い．変換後の拡散方程式は,

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(k,t) = -k^2 D\hat{\psi}(k,t), \tag{4.3.22}$$

であり，t に関する常微分方程式である．これを解くのは簡単であり，解は

$$\hat{\psi}(k,t) = \exp\left[-k^2Dt\right]\hat{\psi}_0(k), \tag{4.3.23}$$

で与えられる．フーリエ逆変換を実行できれば，偏微分方程式の解が得られたことになる．

$$\begin{aligned}
\psi\left(x,t\right) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}\exp\left[-k^2Dt\right]\hat{\psi}_0\left(k\right) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}\exp\left[-k^2Dt\right]\int_{-\infty}^{\infty} dx'\, e^{-ikx'}\psi_0\left(x'\right) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\psi_0\left(x'\right)\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp\left[ik\left(x-x'\right)-k^2Dt\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\psi_0\left(x'\right)\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\exp\left[-Dt\left(k-\frac{i}{2Dt}\left(x-x'\right)\right)^2-\frac{\left(x-x'\right)^2}{4Dt}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\psi_0\left(x'\right)\sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\exp\left[-\frac{\left(x-x'\right)^2}{4Dt}\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,\psi_0\left(x'\right)\exp\left[-\frac{\left(x-x'\right)^2}{4Dt}\right]
\end{aligned} \tag{4.3.24}$$

4.3.3 無限区間での拡散現象 (3 次元)

せっかくなので，3 次元空間 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ での拡散について考えてみよう．1 次元とほぼ全く同じ手続きで解を求められる．

3 次元の場合の拡散方程式は次式である．

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) &= D\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) \\ &= D\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(\mathbf{r}, t)\right). \end{aligned} \tag{4.3.25}$$

ちなみに，1 行目の ∇^2 はラプラシアンと呼ばれる演算子で，

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{4.3.26}$$

で定義される．

3 次元空間でのフーリエ変換 $(\mathbf{r} \to \mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\mathbf{k}, t) &= \int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdydz\, \exp\left[-ik_x x - ik_y y - ik_z z\right]\psi(x, y, z, t), \end{aligned} \tag{4.3.27}$$

である．拡散方程式のフーリエ変換を計算してみよう．1 次元の場合よりも難しそうに思うかもしれないが，ベクトル表示 $\mathbf{r}$, $\mathbf{k}$ を成分表示に直してみると，実は 1 次元の場合と同じである．とは言え，いきなりそんなこと言われても困るかもしれないので，くどいくらい途中の式変形を示すことにする[*2]．まず，フーリエ変換の定義から，次式のように式変形する．

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\mathbf{k}, t) &= D\int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) \\ &= D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdydz\, \exp\left[-ik_x x - ik_y y - ik_z z\right] \\ &\quad\times\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, y, z, t) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(x, y, z, t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(x, y, z, t)\right) \\ &= D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dydz\, \exp\left[-ik_y y - ik_z z\right]\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \exp\left[-ik_x x\right]\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, y, z, t) \\ &\quad+ D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdz\, \exp\left[-ik_x x - ik_z z\right]\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \exp\left[-ik_y y\right]\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(x, y, z, t) \\ &\quad+ D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\, \exp\left[-ik_x x - ik_y y\right]\int_{-\infty}^{\infty} dz\, \exp\left[-ik_z z\right]\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(x, y, z, t). \end{aligned} \tag{4.3.28}$$

[*2] 3 次元拡散方程式の解を導くのに，こんなに長ったらしく式変形を書いている書籍は見たことがないので，もしかすると，余計なお節介なレベルなのかもしれないが，その場合は適宜読み飛ばして欲しい．

$\psi(\mathbf{r},t)$ の α 成分 $(\alpha = x, y, z)$ のみをフーリエ変換したものを $\hat{\psi}_\alpha$ と表すことにすると，上式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\mathbf{k},t) = D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dydz\, \exp\left[-ik_y y - ik_z z\right]\left(-k_x^2\hat{\psi}_x(k_x,y,z,t)\right)\\ + D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdz\, \exp\left[-ik_x x - ik_z z\right]\left(-k_y^2\hat{\psi}_y(x,k_y,z,t)\right)\\ + D\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dxdy\, \exp\left[-ik_x x - ik_y y\right]\left(-k_z^2\hat{\psi}_z(x,y,k_z,t)\right).\end{aligned} \tag{4.3.29}$$

残りの積分も実行することで，

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\mathbf{k},t) &= -k_x^2 D\hat{\psi}(\mathbf{k},t) - k_y^2 D\hat{\psi}(\mathbf{k},t) - k_z^2 D\hat{\psi}(\mathbf{k},t)\\ &= -k^2 D\hat{\psi}(\mathbf{k},t),\end{aligned} \tag{4.3.30}$$

を得る．この t に関する常微分方程式の解は

$$\hat{\psi}(\mathbf{k},t) = \exp\left[-k^2 Dt\right]\hat{\psi}_0(\mathbf{k}), \tag{4.3.31}$$

である．逆変換すれば，実空間でちゃんと目的の解が得られたことになる．逆変換の場合も，成分表示で書いて考えてみると良い．

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{(2\pi^3)}\int d\mathbf{k}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\exp\left[-k^2 Dt\right]\hat{\psi}_0(\mathbf{k})\\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} dk_x\int_{-\infty}^{\infty} dk_y\int_{-\infty}^{\infty} dk_z\, \exp\left[ik_x x + ik_y y + ik_z z\right]\exp\left[-\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)Dt\right]\\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty} dx\int_{-\infty}^{\infty} dy\int_{-\infty}^{\infty} dz\, \exp\left[-ik_x x' - ik_y y' - ik_z z'\right]\psi_0(x',y',z')\\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} dx\int_{-\infty}^{\infty} dy\int_{-\infty}^{\infty} dz\,\psi(x',y',z')\\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty} dk_x\, \exp\left[-Dt\left(k_x - \frac{i}{2Dt}(x-x')\right)^2\right]\exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right]\\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty} dk_y\, \exp\left[-Dt\left(k_y - \frac{i}{2Dt}(y-y')\right)^2\right]\exp\left[-\frac{(y-y')^2}{4Dt}\right]\\ &\quad\times\int_{-\infty}^{\infty} dk_z\, \exp\left[-Dt\left(k_z - \frac{i}{2Dt}(z-z')\right)^2\right]\exp\left[-\frac{(z-z')^2}{4Dt}\right]\\ &= \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}}\int d\mathbf{r}'\,\psi_0(\mathbf{r}')\exp\left[-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}{4Dt}\right].\end{aligned} \tag{4.3.32}$$

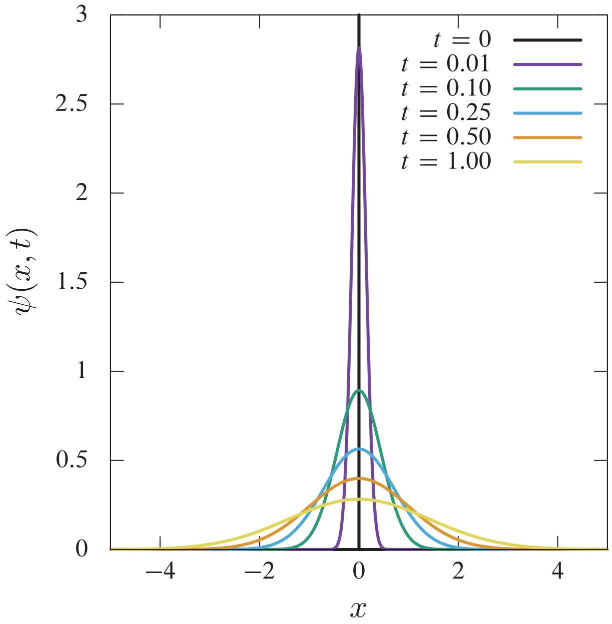
教科書などにはよく，初期条件が

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}), \tag{4.3.33}$$

の場合の結果が紹介されているが，これを求めた解に代入すると，

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}}\exp\left[-\frac{1}{4Dt}|\mathbf{r}|^2\right], \tag{4.3.34}$$

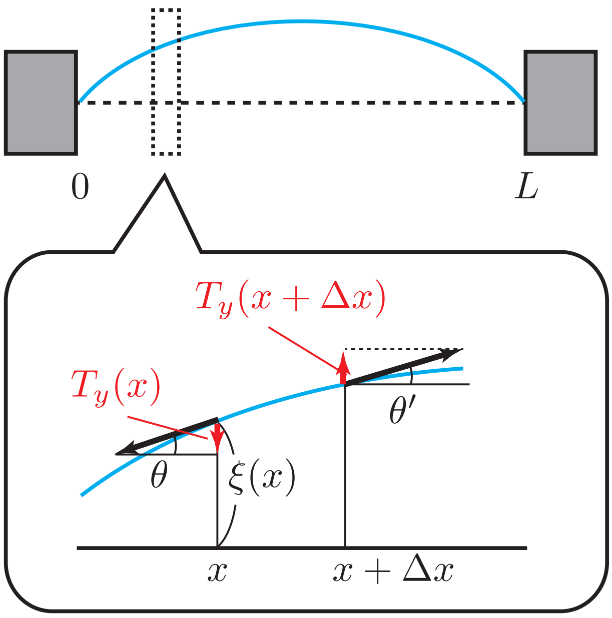
となる．時刻 $t=0$ で特定の位置 $(\mathbf{r}=\mathbf{0})$ に局在していた物質が，Gauss 関数の形で空間的に広がっていくのが，解の形を見れば分かる．1 次元の場合の拡散方程式の解を次図に示しておく．



4.4　波動方程式

媒質を伝播する波の時間変化は，波動方程式と呼ばれる偏微分方程式によって記述される．ここでは，まず簡単な例を通して波動方程式を示した後，無限に広がる媒質の中での波の時間変化について見てみよう．

4.4.1　波動方程式の導出



弦楽器のように，両端を固定された弦の振動について考えてみよう．上図のように両端を固定された長さ L の弦を考える．また，弦の単位長さあたりの質量密度を ρ，弦に働く張力を T とする．弦

の微小部分 $(x \sim x + \Delta x)$ に注目すると，その部分の質量 m は,

$$m = \rho \Delta x, \tag{4.4.1}$$

である．そして，位置 x での弦の変位を $\xi(x)$ とすると，微小部分の変位に関する運動方程式は，Newton の運動方程式から

$$\begin{aligned} F_y &= m \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial t^2} \\ &= \rho \Delta x \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial t^2}, \end{aligned} \tag{4.4.2}$$

と表せる．ここで，F_y は弦の微小部位にかかる力の変位方向 (y) の成分である．張力は弦の接線方向に働くので，x 軸の方向と弦のなす角によって，張力の y 成分 T_y が決まる．図の幾何的考察から,

$$T_y(x) = -T \sin\theta, \tag{4.4.3}$$

$$T_y(x + \Delta x) = T \sin\theta', \tag{4.4.4}$$

と表せることが分かる．従って,

$$\begin{aligned} F_y &= T_y(x + \Delta x) + T_y(x) \\ &= T\left(\sin\theta' - \sin\theta\right), \end{aligned} \tag{4.4.5}$$

である．変位が小さい場合は，θ, θ' も小さいので,

$$\sin\theta = \theta - \frac{1}{3!}\theta^3 + \cdots \simeq \theta, \tag{4.4.6}$$

$$\cos\theta = 1 - \frac{1}{2!}\theta^2 + \cdots \simeq 1, \tag{4.4.7}$$

と近似出来るので,

$$\frac{\partial \xi(x)}{\partial x} = \tan\theta = \frac{\sin\theta}{\cos\theta} \simeq \sin\theta, \tag{4.4.8}$$

と表しても良い．これを Eq. (4.4.5) に代入することで,

$$\begin{aligned} F_y &= T\left(\left.\frac{\partial \xi}{\partial x}\right|_{x=x+\Delta x} - \left.\frac{\partial \xi}{\partial x}\right|_{x=x} \right) \\ &= T \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \Delta x \end{aligned} \tag{4.4.9}$$

を得る．従って，運動方程式 Eq. (4.4.2) から,

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}, \tag{4.4.10}$$

となる．ただし,

$$v = \sqrt{\frac{T}{\rho}}, \tag{4.4.11}$$

とおいた．Eq. (4.4.10) は波動方程式と呼ばれ，媒質を伝わる振動現象 (波動) を記述する上での基礎となる．注目している現象によって，v の表式は異なるが，波動方程式の形自体は共通している．今回は端点を固定した場合で波動方程式を示したが，自由端の場合も同じ形の偏微分方程式になる．また，v が波の進行速度を表していることが，より詳細な考察から分かる．

4.4.2 無限に広がる媒質中での波

無限に広がる媒質 (無限区間，$-\infty < x < \infty$) を伝わる波の時間変化 $u(x,t)$ について見ていこう．$u(x,t)$ として何を想像しても良いが，先程の例と同じで，弦 (ただし無限に長い) の変位のようなものを考えておこう．その基礎方程式として，波動方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u\left(x,t\right) = v^2 \frac{\partial}{\partial x^2} u\left(x,t\right), \tag{4.4.12}$$

を考える．ここでは，初期条件として

$$u(x,t=0) = f(x), \tag{4.4.13}$$
$$\left.\frac{\partial}{\partial t} u(x,t)\right|_{t=0} = 0, \tag{4.4.14}$$

を与えておく．

まず，$u(x,t)$ と $f(x)$ のフーリエ変換をそれぞれ，

$$\hat{u}\left(k,t\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} u\left(x,t\right), \tag{4.4.15}$$
$$\hat{f}\left(k\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} f\left(x\right), \tag{4.4.16}$$

で定義する．

波動方程式のフーリエ変換は次式である．

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \hat{u}\left(k,t\right) = -v^2 k^2 \hat{u}\left(k,t\right). \tag{4.4.17}$$

この t に関する常微分方程式の解は

$$\hat{u}(k,t) = A(k)\cos(vkt) + B(k)\sin(vkt), \tag{4.4.18}$$

である．初期条件を考えると，

$$A(k) = \hat{f}(k), \quad B(k) = 0, \tag{4.4.19}$$

つまり，

$$\hat{u}(k,t) = \hat{f}(k)\cos(vkt), \tag{4.4.20}$$

である．次は上式のフーリエ逆変換を計算するわけだが，まず $\cos(vkt)$ の逆変換を計算しておこう．

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}^{-1}\left[\cos\left(vkt\right)\right] &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}\cos\left(vkt\right) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}\frac{e^{ivkt}+e^{-ivkt}}{2} \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x+vt)} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-vt)}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\delta\left(x+vt\right)+\delta\left(x-vt\right)\right).
\end{aligned} \tag{4.4.21}$$

上式の導出の際には，第 3 章で学んだデルタ関数の表式 Eq. (2.3.9)

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx}, \tag{4.4.22}$$

を用いた．$\hat{u}(k,t)$ は $\hat{f}(k)$ と $\cos(vkt)$ の積になっているが，これは畳み込み積分のフーリエ変換の公式 Eq. (2.3.16) を逆から見れば，

$$\begin{aligned} u\,(x,t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy\, f\,(y)\,\frac{1}{2}\,(\delta\,(x-y+vt)+\delta\,(x-y-vt)) \\ &= \frac{1}{2}\,(f\,(x-vt)+f\,(x+vt))\,, \end{aligned} \tag{4.4.23}$$

とできる．

この解は $t=0$ で $f(x)$ の形をとっていた状態が，半分の高さで左右に分かれて伝わっていくことを意味している (次図参照)．この解のことをダランベールの解と呼ぶ．