

第 2 回 レポ ー ト (19/7/6 出題 ; 7/19(金) 定期試験開始前に提出)

大問 1, 2 がレポート問題. 大問 3 は定期試験後にでも解いてみること.

1 複素積分

(1) Cauchy の積分定理を利用して $\int_0^\infty dx e^{ix^2}$ を求めよ.

(2) $f(z) = \frac{25(z+1)}{(z+4)^2(z-1)}$ について, 以下に答えよ.

(a) $f(z)$ は極をもつか? 極をもつならば, それぞれの (極の位置, 位数, 留数) を求めよ.

(b) 周回積分 $\oint_C dz f(z)$ の積分経路 C として次の経路を選んだとき, それぞれの積分値を求めよ:

(i) $|z| = 3$ の円周 (ii) $|z| = 5$ の円周 (iii) $|z+3| = 2$ の円周

2 Fourier 変換と Laplace 変換の応用: 拡散方程式

分子 A から成る芳香剤がある. 芳香剤から放出される分子 A の拡がり方を考察したい. そのためには, 時刻 t , 位置 \vec{r} における分子 A の数密度 $n(t, \vec{r})$ の時間発展を与える方程式を得る必要がある. 以下では簡単のため, 空間を 1 次元とし, 時刻 t , 位置 x における分子 A の数密度 $n(t, x)$ の方程式を考察する.

まず, x を中心とする幅 Δx の微小区間 $I = [x - \Delta x/2, x + \Delta x/2]$ 内に含まれる分子数

$$\Delta N(t, x) := \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx' n(t, x') \simeq n(t, x) \Delta x,$$

に着目する. 微小時間 δt の間に, 微小区間 I に含まれる分子数は

$$\Delta N(t + \delta t, x) - \Delta N(t, x) \simeq (n(t + \delta t, x) - n(t, x)) \Delta x \simeq \frac{\partial n(t, x)}{\partial t} \delta t \Delta x,$$

だけ変化する. この分子数変化の原因が分かれば, n の時間発展方程式 $\partial n / \partial t = \dots$ が得られる. 微小区間 I 内の分子数変化の原因は, 大別して次の 2 つがある:

- 分子の流入 / 流出: 時刻 t , 位置 x における分子数流束^{*1} $J(t, x)$ で特徴付けられる.
- 分子の放出: 時刻 t , 位置 x における, 単位時間, 単位長さあたりの放出率 $q(t, x)$ で特徴付けられる.

(1) 微小時間 δt の間に, 微小区間 I に流入する (正味の) 分子数が, 次式で与えられることを示せ.

$$\delta t \{ J(t, x - \Delta x/2) - J(t, x + \Delta x/2) \}.$$

(2) n の時間発展方程式が次式で与えられることを説明せよ.

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} = -\frac{\partial J(t, x)}{\partial x} + q(t, x). \quad (2.1)$$

放出率 q は, 芳香剤で決まる与えられた量であるが, n, J は未知量である. ただし, それらには次のような経験則がある: 「分子は, 数密度の高いところから低いところへ流れ, 密度勾配が大きいほどその流れは強い」

(3) この経験則を再現するもっとも簡単なものは, $J(t, x) = -D \frac{\partial n(t, x)}{\partial x}$ である. 定数 D の符号を答えよ.

^{*1} 1 個の分子が, 位置 x を正方向に横切れば $+1$, 負方向に横切るなら -1 とカウントして, 単位時間あたりに位置 x を (正味に) 正方向に通過する分子数のこと. 例えば, δt の間に, 位置 x を正方向に通過した分子が α_+ 個, 負方向に通過した分子が α_- 個あれば, $J = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\alpha_+ - \alpha_-}{\delta t}$ である.

小問 (3) で与えた J の表式より, Eq.(2.1) は, 分子の数密度 n を未知数とした, 閉じた方程式となる :

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} - D \frac{\partial^2 n(t, x)}{\partial x^2} = q(t, x) . \quad (2.2)$$

この方程式を解くために, 空間座標 x には Fourier 変換を, 時間 t には Laplace 変換を適用しよう :

$n(t, x)$ を Fourier 変換した量を

$$\hat{n}(t, k) := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} n(t, x) ,$$

とし, さらに $\hat{n}(t, k)$ を Laplace 変換した量を $\mathcal{N}(s, k)$ とする :

$$\mathcal{N}(s, k) := \int_0^{\infty} dt e^{-st} \hat{n}(t, k) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} n(t, x) .$$

(4) Eq.(2.2) より $\hat{n}(t, k)$ が従う方程式を求めよ. 続いて, $\mathcal{N}(s, k)$ が従う方程式を求めよ. ただし, 分子の放出率 $q(t, x)$ に対し, x について Fourier 変換した量を $\hat{q}(t, k)$, さらに t について Laplace 変換した量を $\mathcal{Q}(s, k)$ とする.

(5) 以上より, $n(t, x)$ が, その初期分布 $n(t=0, x)$ を用いて

$$n(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 G(t, x - x_0) n(t=0, x_0) + \int_0^t dt_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 G(t - t_0, x - x_0) q(t_0, x_0) ,$$

の形に表せることを示し, $G(t, x)$ を与える積分形を求めよ. (積分は実行せずともよい.)

(6) 分子数流速 $J(t, x)$ が単純な $J = -D \partial_x n$ でなく, 時間遅れを伴う流れ

$$J(t, x) = \int_{-\infty}^t ds \mathcal{D}(t - s) \frac{\partial n(s, x)}{\partial x} ,$$

によって与えられる場合, $n(t, x)$ の時間発展方程式は, Eq.(2.2) から次式にとって代わられる :

$$\frac{\partial n(t, x)}{\partial t} - \int_{-\infty}^t ds \mathcal{D}(t - s) \frac{\partial^2 n(s, x)}{\partial x^2} = q(t, x) . \quad (2.3)$$

Eq.(2.2) を解いたときと同様の手順にしたがい, Eq.(2.3) を解け.

3 ステップ関数, デルタ関数

3.1 ステップ関数, デルタ関数の定義

ステップ関数 (階段関数, Heaviside 関数) $\theta(x)$ は, 次式で定義される :

$$\theta(x) := \begin{cases} 1 & \text{for } x > 0 \\ 0 & \text{for } x < 0 \end{cases} . \quad (3.1)$$

デルタ関数は, 非常に滑らかで, $|x| \rightarrow \infty$ で急速にゼロになる任意の関数^{*2} f に対し,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x) = f(0) , \quad (3.2)$$

を満たす写像として定義される. 平たく言えば, 『デルタ関数 $\delta(x)$ とは, 関数 f の $x=0$ での値を, Eq.(3.2) の左辺の手続きで抜き出す機能』のことであり, その機能をもつものは全て同一視される. また, その定義よ

^{*2} 正確には, 次の 2 条件を満たす関数 (急減少関数) のこと : 1) 無限回微分可能. 2) 十分遠方 $|x| \rightarrow \infty$ で x のどんなべきよりもはやく減少する, つまり, 任意の $p > 0$ に対し, $\lim_{|x| \rightarrow \infty} x^p f(x) = 0$ を満たす.

り、『デルタ関数の等式や性質は、常に、(先に述べた性質をもつ) 任意の関数 f との積分形で考えよ』ということになる。例えば、デルタ関数の性質の一つに $\delta(-x) = \delta(x)$ があるが、これは次の等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(-x) f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(y) f(-y) = f(-0) = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x), \quad (3.3)$$

の略記である。同様に、ステップ関数とデルタ関数の関係^{*3} $\theta'(x) = \frac{d}{dx} \theta(x) = \delta(x)$ も、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \theta'(x) f(x) &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\theta(x+\epsilon) - \theta(x)}{\epsilon} f(x) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \theta(x+\epsilon) f(x) - \int_{-\infty}^{\infty} dx \theta(x) f(x) \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left[\int_{-\epsilon}^{\infty} dx f(x) - \int_0^{\infty} dx \theta(x) f(x) \right] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{-\epsilon}^0 dx f(x) = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x), \end{aligned} \quad (3.4)$$

のように、ステップ関数の微分を f との積分形で定義して得られる等式の略記である。^{*4}

3.2 デルタ関数の性質

Q. Eq.(3.3) に倣い、以下のデルタ関数の性質を証明せよ。

$$f(x) \delta(x - x_0) = f(x_0) \delta(x - x_0), \quad \text{特に,} \quad x \delta(x) = 0, \quad (3.5)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (a \neq 0), \quad (3.6)$$

$$\delta(g(x)) = \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|} \delta(x - x_n) \quad (x_n \text{ は } g(x_n) = 0 \text{ かつ } g'(x_n) \neq 0 \text{ を満たすもの}), \quad (3.7)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \delta(x - z) \delta(z - y) = \delta(x - y). \quad (3.8)$$

デルタ関数の微分

Q. Eq.(3.4) に倣ってデルタ関数の微分を定義し、次式を示せ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta'(x - x_0) f(x) = -f'(x_0). \quad (3.9)$$

なお上式は、デルタ関数が部分積分可能として、形式的に計算を進めた場合と一致する^{*5}：

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta'(x - x_0) f(x) &= \left[\delta(x - x_0) f(x) \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) f'(x) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) f'(x) = -f'(x_0). \end{aligned}$$

また、高階微分も同様に定義され、 n 階微分 ($n = 0, 1, 2, \dots$) は次式を満たす：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta^{(n)}(x - x_0) f(x) = (-)^n f^{(n)}(x_0). \quad (3.10)$$

^{*3} これから、 $x \neq 0$ に対し、 $\delta(x) = 0$ とすることが自然であると分かる。

^{*4} Eq.(3.4) の定義にある $\epsilon \rightarrow 0$ 極限が、積分の外にあることがミソ。このように、デルタ関数が絡む極限操作は、必ず積分の後に実行する。

^{*5} これから、デルタ関数の微分を含んだ計算を実際に行う際は、デルタ関数の微分の定義まで戻るのは面倒なので、形式的に部分積分ができるとして計算を進めることで済ませてしまう場合が多い。

3.3 デルタ関数, ステップ関数の Fourier 変換

ステップ関数 $\theta(x)$ と, デルタ関数 $\delta(x)$ の Fourier 変換を考えたい. しかし, (絶対) 可積分な関数に対する Fourier 変換の定義は使えない. なぜなら, θ は (絶対) 可積分ではなく, δ はその定義よりそもそも単独で取り出せない^{*6} からである.

そこで, ここでは素朴に, ステップ関数やデルタ関数に近づく関数列を考え, その関数列の Fourier 変換の極限を, ステップ関数やデルタ関数の Fourier 変換とみなすことにする. そのような関数列として, 具体的に,

$$\theta_\epsilon(x) := \begin{cases} e^{-\epsilon x} & \text{for } x > 0 \\ 0 & \text{for } x < 0 \end{cases} \quad (\epsilon > 0),$$

$$\delta_\epsilon(x) := \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + x^2} \quad (\epsilon > 0),$$

を考えよう. 実際, 関数列 $\{\theta_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ が, $\epsilon \rightarrow 0$ の極限で, ステップ関数 $\theta(x)$ になることは容易に確認できる.

(1) 関数 δ_ϵ を図示せよ. また, 関数列 $\{\delta_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ が, $\epsilon \rightarrow 0$ の極限でデルタ関数 $\delta(x)$ のはたらきをすることを説明せよ. (説明で十分だが, Riemann-Lebesgue の定理をもちいて証明しても, もちろん良い.)

(2) $\theta_\epsilon(x)$, $\delta_\epsilon(x)$, それぞれの Fourier 変換 $\hat{\theta}_\epsilon(k)$, $\hat{\delta}_\epsilon(k)$ が, 次式で表されることを示せ:^{*7}

$$\hat{\theta}_\epsilon(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i k - i\epsilon}, \quad \hat{\delta}_\epsilon(k) = \frac{e^{-\epsilon|k|}}{\sqrt{2\pi}}.$$

なお, 必要であれば, a を実定数として, $\int_0^\infty dy \frac{\cos(ay)}{1+y^2} = \frac{\pi}{2} e^{-|a|}$ をもちいて良い.

(3) $\hat{\theta}_\epsilon(k)$ の逆 Fourier 変換 $\check{\theta}_\epsilon(x)$ を求め, $\theta_\epsilon(x)$ と比較せよ.

(4) 以上より, 次のようなステップ関数, デルタ関数の積分表示が示唆される:

$$\theta(x) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{k - i\epsilon}, \quad \delta(x) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-\epsilon|k|+ikx}.$$

ステップ関数の積分表示の右辺を直接計算することで, 第 1 式の成立を確かめよ.(ヒント: 留数計算)

(5) デルタ関数の積分表示に現われる因子 $e^{-\epsilon|k|}$ は, 『 k の絶対値の大きいところは積分にほとんど寄与しない』という効果をもたらす. そこで, 次式を期待することは自然である.

$$\delta(x) \stackrel{?}{=} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\Lambda x)}{x}.$$

この期待が成立すること, つまり, 次式が成立することを説明せよ.

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\Lambda x)}{x} f(x) = f(0).$$

(6) 前小問の結果を利用し, 急減少関数が Fourier 展開可能であること, すなわち, f の Fourier 変換

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx'} f(x'),$$

をもちいて, f が次式で表されることを示せ:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \hat{f}(k).$$

^{*6} この意味で, デルタ “関数” δ を, 関数と呼ぶのは相応しくない. 正しくは, 超関数という.

^{*7} これから, デルタ関数の Fourier 変換は $\hat{\delta}(k) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \hat{\delta}_\epsilon(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ とみなせることが分かる. そしてこの結果は, 素朴に計算した結果 $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \delta(x) e^{-ikx} = \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \Big|_{x=0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ と一致する.