各種の偏微分方程式の解法

by T. Koyama

１．内容

１）ラプラス方程式
２）拡散方程式（熱伝導方程式）
３）波動方程式
４）ヘルムホルツ方程式
５）拡散方程式のグリーン関数

付録
１）線形システム論（超関数の定義とグリーン関数の一般論）
２）コーシーの積分定理と留数の定理
３）Jordan の補助定理
４）コーシーの主値積分
５）ガンマ関数とベータ関数

・フーリエ変換の定義
本解説では、フーリエ変換および逆フーリエ変換を次のように定義する。

フーリエ変換 ： $Q(k)=\int_{-\infty}^{\infty} c(x)\exp(-ikx)dx$　　$Q(\mathbf{k})=\int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}$

逆フーリエ変換： $c(x)=\dfrac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} Q(k)\exp(ikx)dk$　　$c(\mathbf{r})=\dfrac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}$

デルタ関数のフーリエ変換
・ $c(x)=\delta(x),\ c(\mathbf{r})=\delta(\mathbf{r})$ の時

$$Q(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\exp(-ikx)dx=\delta(0)=1$$

$$Q(\mathbf{k})=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\delta(y)\delta(z)\exp\{-i(k_x x+k_y y+k_z z)dxdydz$$

$$=\delta(0)\delta(0)\delta(0)=1$$

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k)\exp(ikx)dk=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(ikx)dk$$

$$\delta(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}$$

・ $Q(k)=\delta(k),\ Q(\mathbf{k})=\delta(\mathbf{k})$ の時

$$c(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(k)\exp(ikx)dk=\frac{1}{2\pi}\delta(0)=\frac{1}{2\pi},\quad c(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}=\frac{1}{(2\pi)^3}$$

$$\delta(k)=\int_{-\infty}^{\infty}c(x)\exp(-ikx)dx=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-ikx)dx,\quad \delta(\mathbf{k})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}$$

２．各種の偏微分方程式の解法

以下、各種の偏微分方程式の解法にについて説明する。

１）ラプラス方程式

通常の空間におけるラプラス方程式については、ポアソン方程式の解法の際に説明するので、ここでは、次のような２次元ラプラス方程式を例に取る。

$$\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial t^2}+\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}=0 \tag{1}$$

$c(x,t)$ を次のようにフーリエ級数にて表現する。

$$c(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k,t)\exp(ikx)dk \tag{2}$$

これより、

$$\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}=-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}k^2Q(k,t)\exp(ikx)dk\,,\qquad \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial t^2}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2 Q(k,t)}{\partial t^2}\exp(ikx)dk$$

であるので、式(1)に代入することにより、

$$\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial t^2}+\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\partial^2 Q(k,t)}{\partial t^2}-k^2Q(k,t)\right\}\exp(ikx)dk=0$$

$$\frac{\partial^2 Q(k,t)}{\partial t^2}-k^2Q(k,t)=0 \tag{3}$$

を得る。この式が成立するためには、$Q(k,t)$ の２階微分に元の $Q(k,t)$ が現れる必要があるので、一般解は、

$$Q(k,t)=F(k)\exp(-|k|t)+H(k)\exp(|k|t) \tag{4}$$

にて与えられる。ここで、境界条件を、

境界条件： $t=\infty$ で $c(x,\infty)=0$ より、 $Q(k,\infty)=\int_{-\infty}^{\infty}c(x,\infty)\exp(-ikx)dx=0$

とすれば、式(4)は

$$Q(k,t)=F(k)\exp(-|k|t) \tag{5}$$

となる。式(5)を式(2)に代入する。

$$c(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k,t)\exp(ikx)dk=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\{F(k)\exp(-|k|t)\}\exp(ikx)dk$$

$$=\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}F(k)\exp(ikx)dk\right)*\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\{\exp(-|k|t)\}\exp(ikx)dk\right)=f(x)*I(x)$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}f(x')I(x-x')dx'=\int_{-\infty}^{\infty}f(x')\frac{1}{\pi}\left(\frac{t}{(x-x')^2-t^2}\right)dx'=\frac{t}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x')}{(x-x')^2-t^2}dx'$$

＊は畳込み計算を意味する。なお、

$$I(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-|k|t)\exp(ikx)dk=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\infty}\exp(-kt)\cos(kx)dk$$

$$=\frac{1}{\pi}\left\{\left[\frac{1}{x}\exp(-kt)\sin(kx)\right]_0^{\infty}-\frac{1}{x}\int_0^{\infty}(-t)\exp(-kt)\sin(kx)dk\right\}=\frac{t}{\pi x}\int_0^{\infty}\exp(-kt)\sin(kx)dk$$

$$=\frac{t}{\pi x}\left\{\left[-\frac{1}{x}\exp(-kt)\cos(kx)\right]_0^{\infty}-\int_0^{\infty}-\frac{1}{x}(-t)\exp(-kt)\cos(kx)dk\right\}$$

$$=\frac{t}{\pi x}\left\{\frac{1}{x}-\frac{t}{x}\int_0^{\infty}\exp(-kt)\cos(kx)dk\right\}=\frac{t}{\pi x^2}\left[1-\pi tI(x)\right]$$

より、

$$I(x)=\frac{t}{\pi x^2}\left[1-\pi tI(x)\right]=\frac{t}{\pi x^2}-\frac{\pi t^2I(x)}{\pi x^2}$$

$$\pi x^2I(x)=t-\pi t^2I(x)$$

$$I(x)=\frac{t}{\pi x^2+\pi t^2}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{t}{x^2+t^2}\right)$$

である。

２）拡散方程式（熱伝導方程式）

線形の拡散方程式と熱伝導方程式は同じ式である。ここでは、１次元の拡散方程式を扱い、次式にて与えられる。D は拡散係数で正の値を取ると仮定する。

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t}=D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} \qquad (1)$$

$c(x,t)$ を次のようにフーリエ級数にて表現する。

$$c(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k,t)\exp(ikx)dk \qquad (2)$$

これより、

$$\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}=-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}k^2Q(k,t)\exp(ikx)dk\,,\quad \frac{\partial c(x,t)}{\partial t}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial Q(k,t)}{\partial t}\exp(ikx)dk$$

であるので、式(1)に代入することにより、

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} - D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = 0 \\
&\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\partial Q(k,t)}{\partial t} + Dk^2 Q(k,t)\right\}\exp(ikx)dk = 0 \\
&\therefore\ \frac{\partial Q(k,t)}{\partial t} = -Dk^2 Q(k,t)
\end{aligned} \tag{3}$$

を得る。この一般解は、

$$\begin{aligned}
&\int_{Q(k,0)}^{Q(k,t)}\frac{1}{Q(k,t)}dQ(k,t) = -Dk^2\int_0^t dt \\
&\ln\frac{Q(k,t)}{Q(k,0)} = -Dk^2 t \\
&Q(k,t) = Q(k,0)\exp(-Dk^2 t)
\end{aligned} \tag{4}$$

と簡単に解くことが出来る。さて式(4)を式(2)に代入し逆フーリエ変換すると、$c(x,t)$ は次のように導かれる。

$$\begin{aligned}
c(x,t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k,t)\exp(ikx)dk \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k,0)\exp(-Dk^2 t)\exp(ikx)dk \\
&= \left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}Q(k,0)\exp(ikx)dk\right] * \left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk^2 t)\exp(ikx)dk\right] \\
&= c(x,0) * I(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}c(x',0)I(x-x',t)dx' = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty}c(x',0)\exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right]dx'
\end{aligned} \tag{5}$$

ここで、$I(x,t)$ は以下のように計算される。まず、

$$I(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk^2 t)\exp(ikx)dk = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\exp(-Dk^2 t)\cos(kx)dk \tag{6}$$

および

$$\begin{aligned}
\frac{\partial I(x,t)}{\partial x} &= \frac{1}{\pi}\frac{\partial}{\partial x}\int_0^{\infty}\exp(-Dk^2 t)\cos(kx)dk = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}(-k)\exp(-Dk^2 t)\sin(kx)dk \\
&= \frac{1}{\pi}\left\{\left[\frac{1}{2Dt}\exp(-Dk^2 t)\sin(kx)\right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty}\frac{x}{2Dt}\exp(-Dk^2 t)\cos(kx)dk\right\} \\
&= -\frac{x}{2Dt}\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\exp(-Dk^2 t)\cos(kx)dk = -\frac{x}{2Dt}I(x,t)
\end{aligned} \tag{7}$$

から、

$$
\begin{aligned}
&\frac{dI(x,t)}{d\,x} = -\frac{x}{2Dt} I(x,t) \\
&\int_{I(0,t)}^{I(x,t)} \frac{1}{I(x,t)} dI(x,t) = -\frac{1}{2Dt}\int_0^x x dx \\
&\ln\frac{I(x,t)}{I(0,t)} = -\frac{x^2}{4Dt} \\
&I(x,t) = I(0,t)\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)
\end{aligned}
\tag{8}
$$

となる。$I(0,t)$ は、$\int_0^\infty \exp(-y^2)dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ （ガンマ関数とベータ関数の性質より導出できる。）を用いることによって、

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty \exp(-y^2)dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad , \quad y = k\sqrt{Dt} \quad , \quad dy = dk\sqrt{Dt} \\
&\int_0^\infty \exp(-y^2)dy = \sqrt{Dt}\int_0^\infty \exp(-Dk^2t)dk = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
&\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \exp(-Dk^2t)dk = \frac{1}{\pi}\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{Dt}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}
\end{aligned}
$$

から、

$$
I(0,t) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \exp(-Dk^2t)dk = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \tag{9}
$$

となるので、これを式(8)に代入することにより、最終的に

$$
I(x,t) = I(0,t)\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \tag{10}
$$

を得る。

３）波動方程式

１次元の波動方程式は次式にて与えられる。この方程式は基本的に、名前のとおり波の伝播を記述する式である。特に弾性論（弾性波）や量子力学において重要な役割を果たす。C は正の定数である。

$$
\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = C\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \tag{1}
$$

$u(x,t)$ を次のようにフーリエ級数にて表現する。

$$u(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}U(k,t)\exp(ikx)dk \tag{2}$$

これより、

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}=-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}k^2U(k,t)\exp(ikx)dk\,,\qquad \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2 U(k,t)}{\partial t^2}\exp(ikx)dk$$

であるので、式(1)に代入することにより、

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}-C\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}=0\\
&\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{\partial^2 U(k,t)}{\partial t^2}+Ck^2U(k,t)\right\}\exp(ikx)dk=0 \qquad (3)\\
&\therefore\ \frac{\partial^2 U(k,t)}{\partial t^2}=-Ck^2U(k,t)
\end{aligned}$$

を得る。これは調和振動の式であるので、一般解は、

$$U(k,t)=A(k)\exp(i\sqrt{C}\,kt)+B(k)\exp(-i\sqrt{C}\,kt) \tag{4}$$

と簡単に解くことが出来る。なお、この式は基本的に三角関数であるので発散することはない。ここで、$U(k,t)$, $A(k)$, $B(k)$ が k に対して週関数であると仮定しよう。これより式(4)は、

$$\begin{aligned}
U(k,t)&=A(k)\exp(i\sqrt{C}\,kt)+B(k)\exp(-i\sqrt{C}\,kt)\\
&=A(k)[\cos(i\sqrt{C}\,kt)+i\sin(i\sqrt{C}\,kt)]+B(k)[\cos(-i\sqrt{C}\,kt)+i\sin(-i\sqrt{C}\,kt)]\\
&=\{A(k)+B(k)\}\cos(i\sqrt{C}\,kt)+i\{A(k)-B(k)\}\sin(i\sqrt{C}\,kt)\\
&=2A(k)\cos(i\sqrt{C}\,kt)
\end{aligned}$$

と書き直されるので、改めて式(4)を

$$U(k,t)=H(k)\exp(i\sqrt{C}\,kt) \tag{5}$$

と置こう。さて境界条件として、

$u(x,0)=f(x)\,,\ \dfrac{\partial u(x,0)}{\partial x}=g(x)$ を考え、 $f(x)\,,\,g(x)$ のフーリエ変換を $F(k)\,,\,G(k)$ としよう。（例えば、$u(x,t)$ が変位場であれば、これは時間 $t=0$ における変位場と歪場が境界条件として与えられたことに対応する。）

$$u(x,0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}U(k,0)\exp(ikx)dk=f(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}F(k)\exp(ikx)dk \tag{6}$$

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial x} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} ikU(k,0)\exp(ikx)dk = g(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G(k)\exp(ikx)dk \tag{7}$$

式(5)(6)(7)より、

$$\begin{aligned} &U(k,0) = H(k) = F(k) \\ &ikU(k,0) = ikH(k) = G(k) \\ &\therefore H(k) = F(k) = \frac{G(k)}{ik} \end{aligned} \tag{8}$$

であので、式(5)は

$$U(k,t) = H(k)\exp(i\sqrt{C}\,kt) = F(k)\exp(i\sqrt{C}\,kt) = \frac{G(k)}{ik}\exp(i\sqrt{C}\,kt) \tag{9}$$

となる。式(9)を式(2)に代入し逆フーリエ変換すると、$u(x,t)$は次のように導かれる。

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} U(k,t)\exp(ikx)dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left[F(k)\exp(i\sqrt{C}\,kt)\right]\exp(ikx)dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)\exp\{ik(x+\sqrt{C}t)\}dk = f(x+\sqrt{C}t) \end{aligned} \tag{10}$$

また同様に、

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} U(k,t)\exp(ikx)dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{G(k)}{ik}\exp(i\sqrt{C}\,kt)\right\}\exp(ikx)dk \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{G(k)}{ik}\exp\{ik(x+\sqrt{C}t)\}dk \end{aligned} \tag{11}$$

ここで、

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G(k)\exp\{ik(x+\sqrt{C}t)\}dk = g(x+\sqrt{C}t) \tag{12}$$

であるので、

$$u(x,t)=\int_{-\infty}^{x} g(x+\sqrt{C}t)dx=\left[u(x,t)\right]_{-\infty}^{x}=u(x,t)-u(-\infty,t)=u(x,t)$$

$$x'=x+\sqrt{C}t \quad , \quad dx'=dx \tag{13}$$

$$u(x',t)=\int_{-\infty}^{x} g(x+\sqrt{C}t)dx'=\int_{-\infty}^{x'-\sqrt{C}t} g(x')dx'$$

を得る。

4）ヘルムホルツ方程式

ヘルムホルツ方程式は次式にて与えられる。

$$(\Delta+a^2)\phi(\mathbf{r})=-f(\mathbf{r}) \tag{1}$$

Δ はラプラシアンで、$\Delta=\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$ にて定義される。

さて、グリーン関数を $G(\mathbf{r}-\mathbf{r'})$ としよう。$G(\mathbf{r}-\mathbf{r'})$ は、

$$(\Delta+a^2)G(\mathbf{r}-\mathbf{r'})=-\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r'}) \tag{2}$$

を満たすように定義される。空間座標において原点は、どこにとっても一般性は失われないので、ここでは $\mathbf{r'}$ を位置座標の原点に置く。したがって、

$$(\Delta+a^2)G(\mathbf{r})=-\delta(\mathbf{r}) \tag{3}$$

となる。$G(\mathbf{r})$ のフーリエ変換と逆フーリエ変換を、
を、

$$\hat{G}(\mathbf{k})=\int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} \tag{4}$$

$$G(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k} \tag{5}$$

と定義する。式(4)(5)を式(3)に代入する。

$$\begin{aligned}(\Delta+a^2)G(\mathbf{r})&=\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+a^2\right\}G(\mathbf{r})\\ &=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\{-(k_x^2+k_y^2+k_z^2)+a^2\}\hat{G}(\mathbf{k})\exp\{i(k_x x+k_y y+k_z z)\}dk_x dk_y dk_z\end{aligned} \tag{6}$$

ここで、

$$G(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\hat{G}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\hat{G}(\mathbf{k})\exp\{i(k_x x+k_y y+k_z z)\}dk_x dk_y dk_z$$

$$\frac{\partial^2 G(\mathbf{r})}{\partial x^2}==\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(-k_x^2)\hat{G}(\mathbf{k})\exp\{i(k_x x+k_y y+k_z z)\}dk_x dk_y dk_z$$

$$\frac{\partial^2 G(\mathbf{r})}{\partial y^2}==\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(-k_y^2)\hat{G}(\mathbf{k})\exp\{i(k_x x+k_y y+k_z z)\}dk_x dk_y dk_z \tag{7}$$

$$\frac{\partial^2 G(\mathbf{r})}{\partial z^2}==\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(-k_z^2)\hat{G}(\mathbf{k})\exp\{i(k_x x+k_y y+k_z z)\}dk_x dk_y dk_z$$

である。またデルタ関数は、

$$\delta(\mathbf{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\{-i(k_x x+k_y y+k_z z)dxdydz \tag{8}$$

と計算される。したがって、式(6)(8)を式(3)に代入することにより、

$$\{-(k_x^2+k_y^2+k_z^2)+a^2\}\hat{G}(\mathbf{k})=-1 \tag{9}$$

ここで、$k=\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}$ とすると式(9)は、

$$(k^2-a^2)\hat{G}(\mathbf{k})=1 \tag{10}$$

と書き直される。デルタ関数の性質から恒等的に $t\delta(t)=0$ であるので、$(k^2-a^2)\delta(k^2-a^2)=0$ が成立する。今、m の任意定数とすると、式(10)は、

$$\begin{aligned}&(k^2-a^2)\hat{G}(\mathbf{k})=1+m\cdot 0=1+m(k^2-a^2)\delta(k^2-a^2)\\&\hat{G}(\mathbf{k})=\mathrm{vp}\frac{1}{k^2-a^2}+m\delta(k^2-a^2)\end{aligned} \tag{11}$$

と書き直される。vp はコーシーの主値積分を意味し、付録より $m=\pm i\pi$ であることが導かれる。したがって、式(11)は、

$$\hat{G}(\mathbf{k})=\mathrm{vp}\frac{1}{k^2-a^2}\pm i\pi\delta(k^2-a^2) \tag{12}$$

と解くことが出来る。ここで行った操作は比較的重要である。なぜなら、この操作はデルタ関数を利用することによって、発散する点を含んでいても解析的に解けるようになったからである。また、

$$\frac{1}{x\mp i\varepsilon}=\mathrm{vp}\frac{1}{x}\pm i\pi\delta(x) \quad ： \quad (\varepsilon\to 0)\text{ の時} \tag{13}$$

が成立する。なおコーシーの主値積分および式(12)(13)の導出に関しては、付録を参照いた

だきたい。
　さて、式(12)(13)より、

$$\hat{G}^{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2 - a^2 \mp i\varepsilon} \tag{14}$$

と書くことができる。なお、この式は複号同順で、εは正の無限に小さい数である。
　さて、式(14)を式(7)に代入しよう。

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{kr}) d\mathbf{k} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}^{\pm}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{kr}) d\mathbf{k} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k^2 - a^2 \mp i\varepsilon} \exp(i\mathbf{kr}) d\mathbf{k} \end{aligned}$$

計算を簡単にするために、ベクトル$\mathbf{r}$をk_z軸上にとり、ベクトル$\mathbf{k}$を次のように座標変換する。

$$\begin{aligned} k_x &= k \sin\theta \cos\varphi \\ k_y &= k \sin\theta \sin\varphi \\ k_z &= k \cos\theta \end{aligned}$$

これより、

$$\begin{aligned} &\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = kr\cos\theta \quad ,(r \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad k \equiv \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}\ ) \\ &d\mathbf{k} = k^2 \sin\theta dk d\theta d\varphi \end{aligned}$$

となり、

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{k^2-a^2\mp i\varepsilon}\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\frac{1}{k^2-a^2\mp i\varepsilon}\exp(ikr\cos\theta)k^2\sin\theta dkd\theta d\varphi \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\infty}\frac{k^2}{k^2-a^2\mp i\varepsilon}\left\{\int_0^{\pi}\exp(ikr\cos\theta)\sin\theta d\theta\right\}dk \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\frac{k^2}{k^2-a^2\mp i\varepsilon}\left\{\int_1^{-1}\exp(ikr\xi)(-d\xi)\right\}dk \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\frac{k^2}{k^2-a^2\mp i\varepsilon}\left\{\int_{-1}^{1}\exp(ikr\xi)d\xi\right\}dk \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}\frac{k^2}{k^2-a^2\mp i\varepsilon}\left\{\frac{\exp(ikr)-\exp(-ikr)}{ikr}\right\}dk \\
&= -\frac{i}{4\pi^2 r}\int_0^{\infty}\frac{k\left[\exp(ikr)-\exp(-ikr)\right]}{k^2-(a^2\pm i\varepsilon)}dk \\
&= -\frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\left[\exp(ikr)-\exp(-ikr)\right]}{k^2-(a^2\pm i\varepsilon)}dk
\end{aligned}
$$

と変形される。ここで、

$$
a_\pm \equiv \sqrt{a^2\pm i\varepsilon} = a\left(1\pm i\frac{\varepsilon}{a^2}\right)^{1/2} \cong a\left(1\pm i\frac{\varepsilon}{2a^2}\right) = a\pm i\frac{\varepsilon}{2a} = a\pm i\eta
$$

とおく。$\eta = \dfrac{\varepsilon}{2a}$ も微小な正の実数である。これより、

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\left[\exp(ikr)-\exp(-ikr)\right]}{k^2-(a^2\pm i\varepsilon)}dk \\
&= -\frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_\pm^2}dk + \frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_\pm^2}dk = I_1^\pm + I_2^\pm
\end{aligned} \tag{15}
$$

となる。$I_1^\pm, I_2^\pm$ を求めよう。

$$
I_1^\pm = -\frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_\pm^2}dk \tag{16}
$$

$$
I_2^\pm = \frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_\pm^2}dk \tag{17}
$$

また、$k^2-a_\pm^2 = (k+a_\pm)(k-a_\pm)$ より、特異点は、

$$
\begin{aligned}
k_+ &= -a_+ = -(a+i\eta) = -a - i\eta \\
k_+ &= \ \ a_+ = \ \ (a+i\eta) = \ a + i\eta \\
k_- &= -a_- = -(a-i\eta) = -a + i\eta \\
k_- &= \ \ a_- = \ \ (a-i\eta) = \ a - i\eta
\end{aligned}
$$

となる。複素空間の上側円弧を選択することにより、Jordan の補助定理から円弧上の複素積分は０となる。またこの領域に該当する特異点は、$k_+ = a_+ = a + i\eta$ ，$k_- = -a_- = -a + i\eta$ の２つである。したがって、$I_1^{\pm}$ の積分は、

$$
\begin{aligned}
I_1^+ &= -\frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_+^2}dk = -\frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_+^2}dk = -\frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\oint_{C}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_+^2}dk \\
&= -\frac{i}{8\pi^2 r}2\pi i \operatorname*{Res}_{k=a_+}\left[\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_+^2}\right] = \frac{1}{4\pi r}\lim_{k\to a_+}\left[\frac{k\exp(ikr)}{2k}\right] = \frac{1}{8\pi r}\exp(ia_+ r)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I_1^- &= -\frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_-^2}dk = -\frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_-^2}dk = -\frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\oint_{C}\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_-^2}dk \\
&= -\frac{i}{8\pi^2 r}2\pi i \operatorname*{Res}_{k=-a_-}\left[\frac{k\exp(ikr)}{k^2-a_-^2}\right] = \frac{1}{4\pi r}\lim_{k\to -a_-}\left[\frac{k\exp(ikr)}{2k}\right] = \frac{1}{8\pi r}\exp(-ia_- r)
\end{aligned}
$$

となり、さらに $\eta = \dfrac{\varepsilon}{2a} \to 0$ とすることによって、$a_+ = a_- = a$ であるから最終的に

$$
I_1^{\pm} = \frac{1}{8\pi r}\exp(\pm iar) \tag{18}
$$

にて与えられる。同様に、$I_2^{\pm}$ の積分については、複素空間の下側円弧を選択することにより、Jordan の補助定理から円弧上の複素積分は０となる。またこの領域に該当する特異点は、$k_+ = -a_+ = -a - i\eta$ ，$k_- = a_- = a - i\eta$ の２つである。ただし、積分経路が負の方向の回転であるので、留数の定理において $2\pi i \to -2\pi i$ とする必要がある。さて、$I_2^{\pm}$ の積分は、

$$
\begin{aligned}
I_2^+ &= \frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_+^2}dk = \frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_+^2}dk = \frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\oint_{C}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_+^2}dk \\
&= \frac{i}{8\pi^2 r}(-2\pi i) \operatorname*{Res}_{k=-a_+}\left[\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_+^2}\right] = \frac{1}{4\pi r}\lim_{k\to -a_+}\left[\frac{k\exp(-ikr)}{2k}\right] = \frac{1}{8\pi r}\exp(ia_+ r)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I_2^- &= \frac{i}{8\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_-^2}dk = \frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\int_{-R}^{R}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_-^2}dk = \frac{i}{8\pi^2 r}\lim_{R\to\infty}\oint_{C}\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_-^2}dk \\
&= \frac{i}{8\pi^2 r}(-2\pi i) \operatorname*{Res}_{k=-a_-}\left[\frac{k\exp(-ikr)}{k^2-a_-^2}\right] = \frac{1}{4\pi r}\lim_{k\to -a_-}\left[\frac{k\exp(-ikr)}{2k}\right] = \frac{1}{8\pi r}\exp(-ia_- r)
\end{aligned}
$$

となり、さらに $\eta = \dfrac{\varepsilon}{2a} \to 0$ とすることによって、$a_+ = a_- = a$ であるから最終的に

$$I_2^{\pm} = \frac{1}{8\pi r}\exp(\pm iar) \tag{19}$$

式(15)(18)(19)より、

$$G(\mathbf{r}) = G^{\pm}(\mathbf{r}) = I_1^{\pm} + I_2^{\pm} = \frac{1}{8\pi r}\exp(\pm iar) + \frac{1}{8\pi r}\exp(\pm iar) = \frac{1}{4\pi r}\exp(\pm iar) \tag{20}$$

となる。グリーン関数が得られたので、ヘルムホルツ方程式は、最終的に次式のように解くことができる。

ヘルムホルツ方程式：$(\Delta + a^2)\phi(\mathbf{r}) = -f(\mathbf{r})$

グリーン関数の定義から、

$$\begin{aligned}(\Delta + a^2)\int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}' &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}')(\Delta + a^2)G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = -f(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{21}$$

したがって、

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi r} f(\mathbf{r}')\exp\{\pm ia|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\}d\mathbf{r}' \tag{22}$$

ところで、ポアソンの方程式はヘルムホルツ方程式において、$a = 0$とすれば良いので、

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) \text{：ポアソンの方程式} \tag{23}$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi r}\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \tag{24}$$

となる。

５）拡散方程式のグリーン関数

グリーン関数を用いた場合の拡散方程式の解法について説明する。まず、３次元拡散方程式を次式にて定義する。

$$\left(\Delta - \frac{1}{D}\frac{\partial}{\partial t} - a^2\right)c(\mathbf{r},t) = -f(\mathbf{r},t) \tag{1}$$

グリーン関数は、

$$\left(\Delta - \frac{1}{D}\frac{\partial}{\partial t} - a^2\right) G(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t') = -\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t') \tag{2}$$

である。$\mathbf{r}'=0$と原点にとる。式(2)の空間に関するフーリエ変換は、

$$\left\{\frac{1}{D}\frac{\partial}{\partial t} + (k^2+a^2)\right\}\hat{G}(\mathbf{k},t) = \delta(t) \tag{3}$$

となる。さらに$t'=0$として、時間に対してフーリエ変換する。

$$\left\{\frac{i\omega}{D} + (k^2+a^2)\right\}\hat{G}_t(\mathbf{k},\omega) = 1 \tag{4}$$

したがって、

$$\hat{G}_t(\mathbf{k},\omega) = \frac{D}{i\omega + D(k^2+a^2)} \tag{5}$$

が得られる。時間に対して逆フーリエ変換しよう。

$$\hat{G}(\mathbf{k},t) = D\exp\{-D(k^2+a^2)t\}u(t) \tag{6}$$

ここで、$u(t)$はステップ関数である。さらに空間に対して、逆フーリエ変換する。

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} D\exp\{-D(k^2+a^2)t\}u(t)\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k} \\
&= \frac{Du(t)}{(2\pi)^3}\exp(-Da^2t)\iiint_k \exp\{-D(k_x^2+k_y^2+k_z^2)t\}\exp\{i(k_x x + k_y y + k_z z)\}dk_x dk_y dk_z \\
&= \frac{Du(t)}{(2\pi)^3}\exp(-Da^2t)\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk_x^2t + ik_x x)dk_x \int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk_y^2t + ik_y x)dk_y \int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk_z^2t + ik_z x)dk_z
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk_x^2t + ik_x x)dk_x &= \int_{-\infty}^{\infty}\exp(-Dk_x^2t)\{\cos(k_x x) + i\sin(k_x x)\}dk_x \\
&= 2\int_{0}^{\infty}\exp(-Dk_x^2t)\cos(k_x x)dk_x \\
&= \sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)
\end{aligned}$$

であるから、グリーン関数は、

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{r},t) &= \frac{Du(t)}{(2\pi)^3}\exp(-Da^2 t)\sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)\sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\exp\left(-\frac{y^2}{4Dt}\right)\sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\exp\left(-\frac{z^2}{4Dt}\right) \\
&= Du(t)\left(\frac{1}{4\pi Dt}\right)^{3/2}\exp\left(-Da^2 t-\frac{r^2}{4Dt}\right)
\end{aligned}
\tag{7}
$$

にて与えられる。

付録

１）線形システム論（超関数の定義とグリーン関数の一般論）

まず、超関数の定義は以下のようにようになる。

・超関数

超関数とは一般化された関数である。連続で任意次数の導関数を有し、$x \to \infty$ の時に０に近づく（いわゆる C 級）関数族を$\{\phi(x)\}$としよう。超関数は下記のように、$\{\phi(x)\}$に対して$F_f(\phi)$を割り当てる操作である。

$$F_f(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\phi(x)dx$$

$\phi(x)$はテスト関数と呼ばれ、$F_f(\phi)$または$f(x)$を超関数という。普通の関数$f(x)$は、xから$y(=f(x))$への写像である。超関数は、テスト関数をフィルターとした、関数$f(x)$から関数$F_f(\phi)$への写像（関数$F_f(\phi)$から関数$f(x)$への写像）である。

次に線形システム論について説明する。これは超関数の概念を用いる、有用な写像方式の１つである。さて、線形システムとして線形な工学システム(測定装置)を考えよう。ある物理量を測定する場合、工学システムでは次の関係が存在する。

測定する物理量の真の値	：$c(x)$	：入力
工学システム（測定装置）	：$L\{f(x)\}$	：フィルター
測定結果	：$e(x)$	：出力

また線形システムでは重ね合わせの原理が成立する。すなわち、

$$c(x) = a_1 c_1(x) + a_2 c_2(x)$$

$$\Downarrow$$

$$L\{c_1(x)\} = e_1(x) \quad , \quad L\{c_2(x)\} = e_2(x)$$

$$\Downarrow$$

$$e(x) = a_1 e_1(x) + a_2 e_2(x)$$

となる。特に、入力がインパルス$\delta(x)$の場合、出力を$G(x)$とすると、

$$L\{\delta(x)\} = G(x)$$

となり、この$G(x)$を線形システムLのインパルス応答といい、グリーン関数とも呼ばれる。このことを明確にするために、入力をデルタ関数の重ね合わせで書こう。

$$c(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x')\delta(x-x')dx'$$

これを線形システムに入力すると、

$$e(x) = L\{c(x)\} = L\left\{\int_{-\infty}^{\infty} c(x')\delta(x-x')dx'\right\} = \int_{-\infty}^{\infty} L\{c(x')\delta(x-x')\}dx'$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} c(x')\, L\{\delta(x-x')\}dx' \qquad (1)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} c(x')\, G(x-x')dx'$$

となる。ここで $L\{\delta(x-x')\} = G(x-x')$ を使用した。これより $G(x)$ がグリーン関数を意味することは明らかである。ところで、式(1)は畳み込み計算である。したがって、$e(x), c(x), G(x)$ のフーリエ変換をそれぞれ $E(k), Q(k), \hat{G}(k)$ とすれば、

$$e(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x')\, G(x-x')dx' = c(x) * G(x)$$
$$E(k) = Q(k)\hat{G}(k)$$

が成立する。ここで $\hat{G}(k)$ はシステム関数と呼ばれる。

2）コーシーの積分定理と留数の定理

まず z を複素数として、複素空間における微分を定義しよう。

$$\frac{df(z_0)}{dz} \equiv \lim_{\Delta z \to 0} \frac{f(z_0 + \Delta z) - f(z_0)}{\Delta z} \qquad (1)$$

注意すべきは、複素数は複素平面上の点であるので、上式の極限は四方八方から $\Delta z \to 0$ とすることができる。どの方向から $\Delta z \to 0$ となっても上式の値が等しい時に $f(z)$ は z_0 で微分可能であると定義される（具体的には複素平面上で、x 方向から z_0 へ近づけた場合のの極限値と y 方向から z_0 へ近づけた場合の極限値が、z_0 において一致しなくてはならない。この条件から、コーシー・リーマンの偏微分方程式が導かれる）。また、z_0 の $\varepsilon > 0$ の近傍の全ての点で微分可能の場合、$z = z_0$ は正則点と呼ばれ、その z_0 を中心にテイラー展開が可能である。特に、$f(z)$ が特異点を除いた全ての点で正則な時、$f(z)$ は正則関数と呼ばれる。

次に複素関数論の存在意義は積分にある。複素関数論における積分は基本的に複素空間上の線積分で、積分経路を C（反時計まわり方向を正の方向とする。）とすると、式(2)のように表現される。

$$\int_C f(z)dz \qquad (2)$$

しかし、実際の計算においては、複素数 z でまともに積分することは困難であるので、通常、複素平面状の方向を表すパタメータ θ を用いて、z を媒介変数表示する。すなわち、

$$z(\theta) = x(\theta) + iy(\theta) \qquad (3)$$

$x(\theta)$, $y(\theta)$ は実関数である。したがって、式(2)は、

$$\int_C f(z)dz = \int_a^b f\{z(\theta)\}\frac{dz}{d\theta}d\theta = \int_a^b f\{x(\theta)+iy(\theta)\}\frac{dz}{d\theta}d\theta \tag{4}$$

と書き直され計算が実行される。１例を示す。

$f(z)=\dfrac{1}{z}$ の時、

$z(\theta)=R\exp(i\theta)=R\cos(\theta)+iR\sin(\theta)$, $dz=iR\exp(i\theta)d\theta$ と置いて、

$$\int_C f(z)dz = \int_C \frac{1}{z}dz = \int_0^{2\pi}\frac{1}{R\exp(i\theta)}iR\exp(i\theta)d\theta = i\int_0^{2\pi}d\theta = 2\pi i$$

と計算される。さて、本題であるコーシーの積分定理の解説に入ろう。まず、コーシーの積分定理から導かれる結果を先に定性的に説明する。

（１）複素積分は、始点と終点が同じでも積分経路が異なれば一般に積分値も異なる。しかし、$f(z)$ が領域 D で正則ならば、その積分値は始点と終点のみによって定まり、D 内の積分経路には無関係である。（この結果は熱力学ではおなじみ！）

（２）$f(z)$ が積分経路 C 上および C 内の領域 D で正則の場合、その周回積分の値は０となり、正則でない点が１つでも、上記領域内に存在すると、０になるとは限らない。

「コーシーの積分定理」
$f(z)$ は D で正則とし、周囲およびその内部が D に含まれるような単一閉曲線を C とする。このとき積分路 C に沿う複素積分は常に０となる。すなわち $\int_C f(z)dz = 0$ が成立する。

・証明
まず、正則であることから、コーシー・リーマンの偏微分方程式(x 方向と y 方向から z_0 へ近づけた場合の極限値 $f(z_0)$ が、z_0 において一致しなくてはならない条件から導かれる関係式)が成立する。

$z=x+iy \qquad f(z)=u(x,y)+iv(x,y)$

コーシー・リーマンの偏微分方程式 ： $\dfrac{\partial u}{\partial y}=-\dfrac{\partial v}{\partial x}$, $\dfrac{\partial u}{\partial x}=\dfrac{\partial v}{\partial y}$

$$\begin{aligned}\int_C f(z)dz &= \int_C \{u(x,y)+iv(x,y)\}(dx+idy)\\ &= \int_C \{u(x,y)dx - v(x,y)dy + i\int_C \{v(x,y)dx+u(x,y)dy\}\\ &= -\iint_S \left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)dxdy + i\iint_S \left(\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{\partial v}{\partial y}\right)dxdy = 0\end{aligned}$$

なお、コーシー・リーマンの偏微分方程式は、熱力学の分野ではマックスウェルの関係式として良く知られている。すなわち、多変数関数における微分可能条件(微分したい位置において極限が存在する条件)から、一般的にコーシー・リーマンの偏微分方程式は導かれ、熱力学では変数として、温度、エントロピー、体積、圧力、濃度、化学ポテンシャル等が取られるが、複素関数論では、複素平面状の x,y の２変数が取られていると解釈できる。

さて、上記の定理より、次のコーシーの積分公式が導かれる（証明は省略)。

・コーシーの積分公式

$f(z)$ は領域 D で正則とする。正方向の単位閉曲線 C が D に含まれており、α を C 内の任意の１点とする時、

$$f(\alpha)=\frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{f(z)}{z-\alpha}dz$$

が成立する。これをコーシーの積分公式という。

さて、準備が整ったので留数の定理の説明に入る。まず、特異点に関する定義を明確にしなくてはならない。

・特異点の定義

関数 $f(z)$ が α で正則でないとき、α を $f(z)$ の特異点という。特に α が $f(z)$ の特異点で、ある正の数 ρ について $f(z)$ が $0<|z-\alpha|<\rho$ にて正則である時、$z=\alpha$ を $f(z)$ の孤立特異点という。孤立していない特異点を集積特異点という。さらに、α を $f(z)$ の孤立特異点とするとき、もし極限値 $\lim_{z\to\alpha} f(z)$ が存在するならば、α は除去可能な孤立特異点と呼ばれる。

・留数とは！

留数 $\operatorname*{Res}_{z=\alpha} f(z)$ は、次のように定義される。

$$\operatorname*{Res}_{z=\alpha} f(z)=\frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)dz$$

（１） $f(z)$ が $|z-\alpha|\le\rho$ で正則であり、 $z=\alpha$ が正則もしくは除去可能な特異点である時、コーシーの定理より、 $\operatorname*{Res}_{z=\alpha} f(z)=0$ である。

（２）積分経路 C 内の孤立特異点 α を中心とした $f(z)$ のローラン展開を、

$$f(z)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}a_n(z-\alpha)^n$$

とするとき、

$$\operatorname*{Res}_{z=\alpha} f(z)=\frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)dz=\frac{1}{2\pi i}\oint_C\sum_{n=-\infty}^{\infty}a_n(z-\alpha)^n dz=\frac{1}{2\pi i}\sum_{n=-\infty}^{\infty}a_n\oint_C(z-\alpha)^n dz=a_{-1}$$

が成立する。すなわち、$f(z)$ の $z=\alpha$ における留数は $f(z)$ の $z=\alpha$ におけるローラン展開の-1 次の係数 a_{-1} に他ならない。
　C を半径 ρ,中心 α の円とする。$z-\alpha=\rho\exp(i\theta)$ と置くと、$n\neq -1$ の時、

$$
\begin{aligned}
\oint_C (z-\alpha)^n dz &= \int_0^{2\pi} \rho^n \exp(in\theta) i\rho \exp(i\theta) d\theta \\
&= i\rho^{n+1} \int_0^{2\pi} \exp\{i(n+1)\theta\} d\theta \\
&= i\rho^{n+1} \left[\frac{\exp\{i(n+1)\theta\}}{i(n+1)} \right]_0^{2\pi} = 0
\end{aligned}
$$

となり、$n=-1$ の時、

$$
\oint_C (z-\alpha)^{-1} dz = \int_0^{2\pi} \rho^{-1} \exp(-i\theta) i\rho \exp(i\theta) d\theta = i\int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi i
$$

が導かれる。結局、留数とは、ある関数をある領域で一周積分する場合に、内部の特異点以外では積分が消えてしまい、特異点のみにおいて積分値が残ることから、”留まる数として ” 命名されたものである。さて、以上から留数の定理は次のようになる。

・留数の定理
　関数が単一閉曲線 C を境界とする領域 D に有限個の孤立特異点 $\alpha_k (k=1,2,3,\cdots,n)$ を持ち、それ以外の D の点および D の境界 C で正則せあるとき、積分経路を正方向として、

$$
\oint_C f(z)dz = 2\pi i \sum_{k=1}^{n} \operatorname*{Res}_{z=\alpha_k} f(z)
$$

が成立する。これを留数の定理という。
　結局、留数を見つければ自動的に積分計算が出来ることになる。したがって、実際の計算に必要なテクニックは留数の見つけ方である。

・留数の見つけ方

（１） $f(z)$ を α のまわりでローラン展開し、-1 次の係数 a_{-1} を求めれば、それが留数である。

（２） $f(z)$ が $z=\alpha$ に１位の極を持つ場合、$z=\alpha$ におけるローラン展開は、

$$
f(z) = a_{-1}(z-\alpha)^{-1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z-\alpha)^n
$$

となる。したがって、

$$
\operatorname*{Res}_{z=\alpha_k} f(z) = a_{-1} = \lim_{z\to\alpha} (z-\alpha) f(z) = a_{-1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z-\alpha)^{n+1} = \left[(z-\alpha) f(z) \right]_{z=\alpha}
$$

と計算できる。また $f(z)=\dfrac{h(z)}{g(z)}$ で、$g(z)$ が $z=\alpha$ を１位の零点として持つ解析関数、$h(z)$ が $z=\alpha$ で正則で $h(z)\neq 0$ である解析関数の場合、$f(z)$ は $z=\alpha$ を１位の極として持つ。

$g(z)$ と $h(z)$ を

$$g(z)=b_1(z-\alpha)+b_2(z-\alpha)^2+b_3(z-\alpha)^3+\cdots \quad (b_1\neq 0)$$
$$h(z)=c_0+c_1(z-\alpha)+c_2(z-\alpha)^2+c_3(z-\alpha)^3+\cdots \quad (c_0\neq 0)$$

のようにテイラー展開すると、

$$\operatorname*{Res}_{z=\alpha_k} f(z)=\lim_{z\to\alpha}(z-\alpha)f(z)=\lim_{z\to\alpha}(z-\alpha)\frac{h(z)}{g(z)}=\lim_{z\to\alpha}\frac{h(z)}{\dfrac{g(z)}{(z-\alpha)}}=\frac{c_0}{b_1}=\left[\frac{h(z)}{g'(z)}\right]_{z=\alpha}$$

であることがわかる。したがって、

$$\operatorname*{Res}_{z=\alpha_k}\frac{h(z)}{g(z)}=\left[\frac{h(z)}{g'(z)}\right]_{z=\alpha}$$

と計算される。

（３） α が m 位の極の場合

$f(z)$ が $z=\alpha$ に $m(\geq 1)$ 位の極を持つ場合、$z=\alpha$ におけるローラン展開は、

$$f(z)=\sum_{n=-m}^{\infty}a_n(z-\alpha)^n \quad (a_{-m}\neq 0)$$

となる。この時、

$$(z-\alpha)^m f(z)=a_{-m}+a_{-m+1}(z-\alpha)+a_{-m+2}(z-\alpha)^2+\cdots+a_0(z-\alpha)^m+a_1(z-\alpha)^{m+1}+\cdots$$

$$\frac{d^{m-1}\{(z-\alpha)^m f(z)\}}{dz^{m-1}}=(m-1)!a_{-1}+\frac{m!}{1!}a_0(z-\alpha)+\frac{(m+1)!}{2!}a_1(z-\alpha)^2+\cdots$$

であるから、

$$\operatorname*{Res}_{z=\alpha_k} f(z)=\lim_{z\to\alpha}(z-\alpha)f(z)=\frac{1}{(m-1)!}\lim_{z\to\alpha}\left[\frac{d^{m-1}\{(z-\alpha)^m f(z)\}}{dz^{m-1}}\right]$$

にて計算される。

３）Jordan の補助定理

複素関数 $f(z)$ が、$|z-\alpha|\to\infty$ において連続、かつ、$\lim_{z\to\infty}|f(z)|=0$ ならば、α を中心とした半径 R の円周片 Γ ： $z-\alpha=R\exp(i\theta) \quad (0\leq\theta_1\leq\theta\leq\theta_2\leq\pi)$ に対して、

$$\lim_{R\to\infty}\int_\Gamma \exp(imz)f(x)dz = 0 \quad (m>0)$$

が成立する。これを Jordan の補助定理という。

この定理は非常に有用で、実軸上の積分を複素平面上の一周積分に変換する場合の目安に使われる。基本的に留数の定理が利用できるのは複素平面状の一周積分であるので、実軸上の積分を行いたい場合、Jordan の補助定理が成立するような条件下で円周片Γを付け加えた後、１周積分にすれば、実軸上の積分を留数の定理に基づき導くことができる。なぜなら、Jordan の補助定理によって、円周片Γ上の積分は０になるからである。

４）コーシーの主値積分

いま実関数$f(x)$が、$a \le x \le b$で定義され、$a \le x_0 \le b$のある点$x = x_0$において有界ではない(例えば$f(x_0)$が発散する)とする。この時、積分

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

を実行する場合、

$$I = \int_a^b f(x)dx = \lim_{\varepsilon_1\to 0}\int_a^{x_0-\varepsilon_1} f(x)dx + \lim_{\varepsilon_2\to 0}\int_{x_0+\varepsilon_2}^b f(x)dx$$

と計算を行う。ここで、$\varepsilon_1, \varepsilon_2$は微小な正の実数である。この積分の極限値が存在する時、積分Iはリーマン積分可能と言われる。

さて、$\varepsilon_1, \varepsilon_2$を別々独立に$\varepsilon_1 \to 0,\ \varepsilon_2 \to 0$とした場合、通常は積分$I$には極限値は存在しない。しかし、$\varepsilon_1$と$\varepsilon_2$を同じ速度で 0 に近づける，すなわち$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \to 0$とした場合、極限値が確定することがある。この時、その極限値をコーシーの主値と呼び、

$$I = \mathrm{vp}\int_a^b f(x)dx$$

と書かれる。また、この積分をコーシーの主値積分と呼ぶ。具体例として、

$$I = \int_{-1}^1 \frac{1}{x}dx$$

を考えてみよう。これは、

$$I=\int_{-1}^{1}\frac{1}{x}dx=\lim_{\varepsilon_1\to 0}\int_{-1}^{0-\varepsilon_1}\frac{1}{x}dx+\lim_{\varepsilon_2\to 0}\int_{0+\varepsilon_2}^{1}\frac{1}{x}dx \ =\lim_{\varepsilon_1\to 0}\int_{-1}^{-\varepsilon_1}\frac{1}{x}dx+\lim_{\varepsilon_2\to 0}\int_{\varepsilon_2}^{1}\frac{1}{x}dx$$

$$=\lim_{\varepsilon_1\to 0}\int_{1}^{\varepsilon_1}\frac{1}{(-t)}(-dt)+\lim_{\varepsilon_2\to 0}\int_{\varepsilon_2}^{1}\frac{1}{x}dx$$

$$=\lim_{\varepsilon_1\to 0}\int_{1}^{\varepsilon_1}\frac{1}{x}dx+\lim_{\varepsilon_2\to 0}\int_{\varepsilon_2}^{1}\frac{1}{x}dx$$

$$=\lim_{\varepsilon_1\to 0}\left[\ln x\right]_{1}^{\varepsilon_1}+\lim_{\varepsilon_2\to 0}\left[\ln x\right]_{\varepsilon_2}^{1}$$

$$=\lim_{\varepsilon_1\to 0}\left(\ln\varepsilon_1\right)-\lim_{\varepsilon_2\to 0}\left(\ln\varepsilon_2\right)=\lim_{\substack{\varepsilon_1\to 0\\ \varepsilon_2\to 0}}\left(\ln\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}\right)$$

と計算できる。ここで、$\varepsilon_1=\varepsilon_2$の時には$I=\ln 1=0$となり、例えば$\varepsilon_1=2\varepsilon_2$の時には、$I=\ln 2$となる。つまり極限の取り方によって極限値が無数に存在する。この内$\varepsilon_1=\varepsilon_2$とした場合の$I=0$がコーシーの主値である。すなわち、

$$I=\mathrm{vp}\int_{-1}^{1}\frac{1}{x}dx=0$$

ただし、これら無数にある極限値は数学的にはすべて正しい計算から導かれている。したがって、純粋に数学的には極限値が定まらないとするのが正しい。しかし、物理的・工学的見地からから、この積分における極限値が実験的に決定できる場合、コーシーの主値を用いて、その実験値を表現することが行われている。（はやいはなし、工学的に解が無数にあって不定では困るので、上記のように強引に約束しただけ！）

さて、このコーシーの主値とデルタ関数の関係式を導こう。まず結果を先に書く。

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{t\mp i\varepsilon}=\mathrm{vp}\frac{1}{t}\pm i\pi\delta(t)$$

・証明：まず初等的に

$$\frac{1}{t\mp i\varepsilon}=\frac{t\pm i\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}=\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\pm i\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2} \tag{1}$$

である。tに関してならかなある任意関数を$\varphi(t)$としよう。この式の右辺第１項と関数$\varphi(t)$の積の積分は、

$$\int_{a}^{b}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt=\int_{-a}^{-\eta}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt+\int_{-\eta}^{\eta}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt+\int_{\eta}^{b}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt$$

と書かれる。ηおよびεは微小な正の実数で、$(a,b>>\eta>\varepsilon>0)$の関係にある。この式の右辺第２項は、$\varphi(t)$をならかな関数としたので、$\eta\to 0$である$t=0$近傍では、

$$\int_{-\eta}^{\eta}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt\cong\varphi(0)\int_{-\eta}^{\eta}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}dt$$

と近似できる。さらにこの積分内関数は奇関数であるので積分値は０になる。すなわち、

$$\int_{-\eta}^{\eta}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt \cong \varphi(0)\int_{-\eta}^{\eta}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}dt = 0$$

である。またεが微小であることから、$t=0$近傍でない限り、

$$\frac{t}{t^2+\varepsilon^2} \cong \frac{1}{t}$$

を置くことができるので、結局、コーシーの主値の定義から、

$$\int_{a}^{b}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt = \int_{-a}^{-\eta}\frac{\varphi(t)}{t}dt + \int_{\eta}^{b}\frac{\varphi(t)}{t}dt = \mathrm{vp}\int_{-a}^{b}\frac{\varphi(t)}{t}dt \tag{2}$$

となる。一方、式(1)右辺の第２項は、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}dt \quad , \quad t = \varepsilon\tan\theta \quad , \quad dt = \frac{\varepsilon}{\cos^2\theta}d\theta$$

より、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}dt = \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2\tan^2\theta+\varepsilon^2}\left(\frac{\varepsilon}{\cos^2\theta}\right)d\theta = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta = \pi$$

となる。$t=0$で$\dfrac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}$は$\infty$となり、かつ、$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}dt = \pi$であるので、結局、

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2} = \pi\delta(t)$$

となる。したがって、先の任意関数を用いて、

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt = \pi\int_{-\infty}^{\infty}\delta(t)\varphi(t)dt \tag{3}$$

と書くことが出来る。最終的に、式(1)-(3)より、

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{t\mp i\varepsilon}\varphi(t)dt &= \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{t}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt \pm i\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{t^2+\varepsilon^2}\varphi(t)dt \\ &= \mathrm{vp}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varphi(t)}{t}dt \pm i\pi\int_{-\infty}^{\infty}\delta(t)\varphi(t)dt\end{aligned} \tag{4}$$

となる。これより、超関数の意味で、

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{t\mp i\varepsilon} = \mathrm{vp}\frac{1}{t} \pm i\pi\delta(t) \tag{5}$$

が成立する。

５）ガンマ関数とベータ関数

ガンマ関数とベータ関数は次のように定義される。

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty x^{s-1}\exp(-x)dx \quad ,(s>0) \tag{1}$$

$$B(p,q) = \int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1}dx \quad ,(p,q>0) \tag{2}$$

式(1)において、$x=t^2$ と置くと、

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty x^{s-1}\exp(-x)dx = \int_0^\infty t^{2s-2}\exp(-t^2)2tdt = 2\int_0^\infty t^{2s-1}\exp(-t^2)dt \tag{3}$$

式(2)において、$x=y/(1+y)$ と置くと、$x=\dfrac{y}{1+y}$ ，$dx=\dfrac{1}{(1+y)^2}dy$ より、

$$\begin{aligned} B(p,q) &= \int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1}dx \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{y}{1+y}\right)^{p-1}\left(1-\frac{y}{1+y}\right)^{q-1}\frac{1}{(1+y)^2}dy \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{y}{1+y}\right)^{p-1}\left(\frac{1}{1+y}\right)^{q+1}dy = \int_0^\infty \frac{y^{p-1}}{(1+y)^{p+q}}dy \end{aligned} \tag{4}$$

となる。さらに $x=\cos^2\theta$ と置く。$x=\cos^2\theta$ ，$dx=-2\sin\theta\cos\theta d\theta$ より、

$$\begin{aligned} B(p,q) &= \int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1}dx \\ &= -2\int_{\pi/2}^0 \cos^{2p-2}\theta(1-\cos^2\theta)^{q-1}\sin\theta\cos\theta d\theta \\ &= 2\int_0^{\pi/2}\cos^{2p-1}\theta\sin^{2q-1}\theta d\theta \end{aligned} \tag{5}$$

以上からわかるように、多くの有理関数、三角関数、指数関数の積分は、ガンマ関数とベータ関数に帰着される。

・ガンマ関数の性質

定義より、

$$\Gamma(1) = 1 \tag{6}$$

である。また式(1)を部分積分することにより、

$$\Gamma(s+1)=s\Gamma(s) \tag{7}$$

が成立することがわかる。式(6)(7)から、n が自然数の場合、

$$\Gamma(n)=(n-1)! \tag{8}$$

であり、ガンマ関数は階乗計算の一般化を意味している。なぜなら、ガンマ関数では n は自然数である必要はなく、正の実数でも良いからである。

・ベータ関数の性質

$$B(p,q)=\frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)} \tag{9}$$

が成立する。式(3)の表現を用いると、

$$\begin{aligned}\Gamma(p)\Gamma(q)&=4\left(\int_0^\infty x^{2p-1}\exp(-x^2)dx\right)\left(\int_0^\infty y^{2q-1}\exp(-y^2)dy\right)\\&=4\int_0^\infty\int_0^\infty x^{2p-1}y^{2q-1}\exp\{-(x^2+y^2)\}dxdy\end{aligned}$$

である。$x=r\cos\theta,\quad y=r\sin\theta$ とすると、

$$\begin{aligned}\Gamma(p)\Gamma(q)&=4\int_0^\infty\int_0^\infty x^{2p-1}y^{2q-1}\exp\{-(x^2+y^2)\}dxdy\\&=4\int_0^{\pi/2}\int_0^\infty(r\cos\theta)^{2p-1}(r\sin\theta)^{2q-1}\exp(-r^2)rdrd\theta\\&=4\int_0^{\pi/2}\int_0^\infty r^{2(p+q)-1}\cos^{2p-1}\theta\sin^{2q-1}\theta\exp(-r^2)drd\theta\\&=\left(2\int_0^\infty r^{2(p+q)-1}\exp(-r^2)dr\right)\left(2\int_0^{\pi/2}\cos^{2p-1}\theta\sin^{2q-1}\theta d\theta\right)\end{aligned}$$

式(3)(5)より、

$$\Gamma(p)\Gamma(q)=\left(2\int_0^\infty r^{2(p+q)-1}\exp(-r^2)dr\right)\left(2\int_0^{\pi/2}\cos^{2p-1}\theta\sin^{2q-1}\theta d\theta\right)=\Gamma(p+q)B(p,q)$$

したがって、式(9)が成立する。

特に $p=q=1/2$ と置くと、式(5)より、$B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)=2\int_0^{\pi/2}d\theta=\pi$ となり、また式(9)から、$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\Gamma(1)B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ であるから、

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\Gamma(1)B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)} = \sqrt{\pi} \tag{10}$$

となる。式(3)より、$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = 2\int_0^\infty \exp(-t^2)dt$ であるから、

$$\int_0^\infty \exp(-t^2)dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \tag{11}$$

が得られる。