δ関数、常微分方程式、偏微分方程式

筑波大学システム情報系　金澤輝代士

August 7, 2023

Contents

記号の定義

本ノートでは以下のような規則に従って記号を導入する：

1. 実数を $\boldsymbol{R} := (-\infty, \infty)$ と書く。
2. 正の実数を $\boldsymbol{R}^+ := (0, \infty)$ と書く。
3. 自然数を $\boldsymbol{N} := \{i \mid i = 0, 1, \dots\}$ と書く。
4. $a, b \in \boldsymbol{R}$ が $a < b$ を充たすとき、指示関数 $\mathbf{1}$ を

$$\mathbf{1}_{(a,b)}(y) = -\mathbf{1}_{(b,a)}(y) = \begin{cases} 1 & (y \in (a,b)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{1}$$

   として定義する。より一般の区間 A に対して $\mathbf{1}_A(y)$ に対しても同様に、

$$\mathbf{1}_A(y) = \begin{cases} 1 & (y \in A) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{2}$$

   とする。但し、A に『向き』の概念がある場合、上の関係式は A が正の向きだと仮定した。

5. 『滑らかな関数』という概念がこのノートではたびたび現れる。滑らかな関数というのは曖昧な概念であるが、 十分解析的な性質が良い関数を意味するとする。典型的には C^∞ 関数として、テイラー展開などのような数式操作が自由にでき、 関連する数列の収束・積分の収束・極限の交換などの問題が最終的に起こらないクラスを指すとする。
6. 本ノートでは極限の順序を断りなく交換することが多い。δ 関数が関わる計算過程では、極限の交換は本来様々な問題を起こしかねない[1]。しかし、本ノートでは最終的な結果に影響しない範囲で自由に交換する。

[1]実際、δ 関数はルベーグの優収束定理の条件を明らかに充たさない。例えば、$\delta_\varepsilon(x) := (1/\varepsilon)\mathbf{1}_{(0,\varepsilon)}(x)$ を考えると、普通の意味では $\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x) = 0$ が $x \neq 0$ で成り立つ。 よって、$\int_0^\infty dx \lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x) = \int_0^\infty 0 dx = 0$ と計算するのが普通である。一方、$\lim_{\varepsilon\downarrow\infty}\int_0^\infty dx\delta_\varepsilon(x) = 1$ であり、極限の交換が成り立たない。 これはまさにルベーグの優収束定理の文脈だと有名な例題だが、例えば章 1 では $\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x) = \delta(x)$ と解釈してこの問題に取り組むため、まさにデリケートな問題を扱っている。

Chapter 1

δ 関数

本を読んだものの練習問題ができないという読者は何も学んでいないのだ

桜井　純、「現代の量子力学」より

この章では数学の準備として、δ 関数について説明する[1]。但し、δ 関数を厳密な数学として定式化/解説することは一切せず、計算を遂行する上で必要な知識だけを整理して説明する[2]。δ 関数の計算に習熟したい読者は [1] 等の演習書を黙々と熟すことをお薦めする。

1.1 δ 関数の定義

δ 関数とは、物理現象でいう『衝突』のように、急激に大きな変化を引き起こす現象をモデル化する際に使用される。まずは形式的な δ 関数の定義を与えよう：

定義 1.1.1 δ 関数とは次の性質を充たす：

1.
$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & (x \neq 0) \\ \infty & (x = 0) \end{cases}. \tag{1.1}$$

2. 任意の滑らかな関数 $f(x)$ と任意の実数 $a \in \boldsymbol{R}$ に対して
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(x-a) = f(a). \tag{1.2}$$

この定義だけを見てもピンとこないと思われるため、まずは練習問題を解いて理解しよう。

練習問題

次の公式を確認せよ：

[1] δ 関数は「関数」という名前がついているが、普通の意味では関数ではない。正確には「超関数」と呼ばれる数学的な実体と見做す方が正しい。ただし、本ノートでは数学的な厳密性については一切触れないため、超関数についてまじめに定式化することは行わない。 但し、教養として知っておいても良い程度のラフなアイディアを章 1.6 に示すので、興味がある読者はそこまで読み進めてほしい

[2] 実際問題筆者は理論物理学者であるため、厳密な数学的な定式化/解説を行うことはできない。

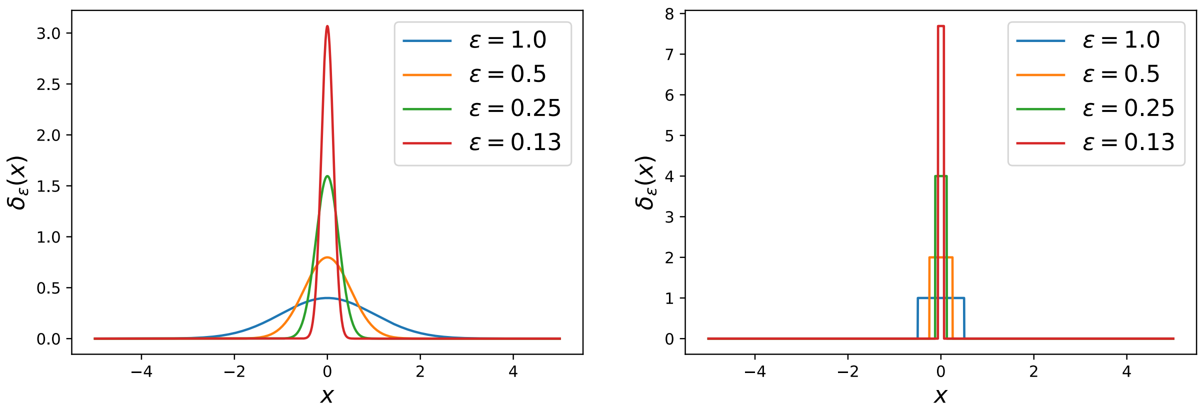

図 1.1: 連続関数から δ 関数に収束していく様子。ε を徐々に変化させている。（左）正規分布 $\delta_\varepsilon(x) = e^{-x^2/(2\varepsilon^2)}/\sqrt{2\pi\varepsilon^2}$ からの収束。（右）矩形パルス $\delta_\varepsilon(x) = (1/\varepsilon)\mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x)$ からの収束。

問 1.1.1

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \delta(x-2) = 2^2 = 4. \tag{1.3}$$

問 1.1.2

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \sin(\omega x)\delta(x-x_0) = \sin(\omega x_0). \tag{1.4}$$

問 1.1.3

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x y \delta(x-\sin y) = y \sin y. \tag{1.5}$$

問 1.1.4

$$\int_a^b dx f(x)\delta(x-y) = \begin{cases} f(y) & (a<y<b) \\ -f(y) & (b<y<a) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} = f(y)\mathbf{1}_{(a,b)}(y). \tag{1.6}$$

問 1.1.5

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(z-x)\delta(x-y) = \delta(z-y). \tag{1.7}$$

1.2 滑らかな関数の極限としての δ 関数

δ 関数は様々な滑らかな関数の極限として構成することができる。例えば、正規分布を用いて

例 1.2.1

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x), \quad \delta_\varepsilon(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon^2}}e^{-x^2/(2\varepsilon^2)} \tag{1.8}$$

である（図 1.1 左）。実際、この関数は δ 関数の定義を充たす：

導出. まず、自明に

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x) = \lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon^2}}e^{-x^2/(2\varepsilon^2)} = \begin{cases} 0 & (x\neq 0) \\ \infty & (x=0) \end{cases}. \tag{1.9}$$

という関係式が成り立つ。次に、$f(x)$ が任意の滑らかな関数とする。x が十分小さいとき、$f(x) = f(0) + f'(0)x + \dots$ と近似することができ、

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta_\varepsilon(x) &= \lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{f(0) + f'(0)x + \dots\right\}\delta_\varepsilon(x) \\ &= \lim_{\varepsilon\downarrow 0}\left(f(0) + \frac{\varepsilon f'(0)}{4} + O(\varepsilon^2)\right) \\ &= f(0) \end{aligned} \tag{1.10}$$

である。即ち、定義 1.1.1 を充たしている。

このような例はいくらでも構成できる。例えば、矩形パルスからの極限

公式 1.2.1

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{\varepsilon}\mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x) = \delta(x). \tag{1.11}$$

などである（図 1.1 右）。一般的に次の性質を充たしていれば良い：

公式 1.2.2 ある滑らかな関数 $\delta_\varepsilon(x)$ が次の性質を充たすとする：

1. $x \to \pm\infty$ で $\delta_\varepsilon(x)$ は十分速く 0 に減衰する：$\lim_{x\to\pm\infty}\delta_\varepsilon(x) = 0$.
2. $x \neq 0$ では $\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x) = 0$ である。
3. 積分すると 1 になる：$\int_{-\infty}^{\infty} dx\delta_\varepsilon(x) = 1$.

これらの関係式を充たせば、極限として δ 関数になる：

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\delta_\varepsilon(x) = \delta(x). \tag{1.12}$$

練習問題

練習問題として、次の公式を確認せよ：

問 1.2.1

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{2\varepsilon}e^{-|x|/\varepsilon} = \delta(x). \tag{1.13}$$

問 1.2.2

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{\pi x}\sin\frac{x}{\varepsilon} = \delta(x). \tag{1.14}$$

問 1.2.3

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{\pi\varepsilon}\frac{1}{1+(x/\varepsilon)^2} = \delta(x). \tag{1.15}$$

問 1.2.4 他の例を 3 つ作れ。

1.3　不連続関数の微分としての δ 関数

δ 関数は不連続関数の微分として現れることがある[3]。例えば、ヘヴィサイド関数 $\Theta(x)$ を考えよう：

$$\Theta(x) := \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ 1 & (x \geq 0) \end{cases} = \mathbf{1}_{[0,\infty)}(x). \tag{1.16}$$

ここで、次の δ 関数の等式に着目しよう：

$$\int_{-\infty}^{x} dy \delta(y) = \Theta(x). \tag{1.17}$$

この意味ではヘヴィサイド関数の微分は δ 関数と一致することになる。つまり、

公式 1.3.1

$$\frac{d}{dx}\Theta(x) = \delta(x). \tag{1.18}$$

ヘヴィサイド関数に限らずに、一般に有限個の不連続点を持つ関数（つまり区分的に滑らかな関数）を微分すると、不連続点で δ 関数が現れる。

練習問題

練習問題として、次の公式を確認せよ：

問 1.3.1

$$f(x) = \max\{0, x\} \implies \frac{df}{dx} = \Theta(x), \quad \frac{d^2 f}{dx^2} = \delta(x). \tag{1.19}$$

問 1.3.2

$$f(x) = \begin{cases} 0 & (x < -1) \\ 1 & (-1 \leq x < 1) \\ -1 & (1 \leq x) \end{cases} \implies \frac{df(x)}{dx} = \delta(x+1) - 2\delta(x-1). \tag{1.20}$$

問 1.3.3 $k = 1, \ldots, K-1$ ならば $x_k < x_{k+1}$ とする。この時、

$$f(x) = \sum_{k=1}^{K} a_k \mathbf{1}_{[x_k, x_{k+1})}(x) \implies \frac{df(x)}{dx} = a_1\delta(x - x_1) + \sum_{k=2}^{K}(a_k - a_{k-1})\delta(x - x_k) - a_K\delta(x - x_{K+1}). \tag{1.21}$$

問 1.3.4 他の例を 3 つ作れ。

1.3.1　注：有限個の不連続点での値の定義はどうでもよい

この章ではヘヴィサイド関数を $x = 0$ で $\Theta(0) = 1$ として導入した。しかし、$\Theta(0) = 1/2$ で定義している文献も世の中には多い。これらに本質的な差はあるのだろうか？

本章を通読すればわかるが、本章での全ての関数は『最終的に何らかの滑らかな関数 $g(x)$ と組み合わせて積分される』ことを念頭において計算を実行している（詳細は章 1.6 を参照されたし）。つまり、『最終的に積分に寄与するかどうか？』という視点で関数を定義する必要がある。その意味では、$\Theta(0)$ の定義は本質的ではない。実際、

$$\Theta_c(x) := \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ c & (x = 0) \\ 1 & (x > 0) \end{cases} \tag{1.22}$$

[3] 普通は『不連続点では微分不可能』と看做すが、超関数の意味では微分出来るためその立場から解釈する。

としたとき、任意の滑らかな関数 $f(x)$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\Theta_c(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\Theta(x) = \int_{0}^{\infty} dx f(x) = \text{const.} \ \ \text{for any } c \in \boldsymbol{R} \tag{1.23}$$

が成り立つ。つまり、上記の積分記号 $\int dx f(x)[...]$ を省略して、

$$\Theta_c(x) = \Theta(x) \ \ \text{for any } c \in \boldsymbol{R} \tag{1.24}$$

と形式的に書いてしまっても良い。この考え方をするならば、有限個の不連続点における関数の値は、その値が有限値であれば[4] 、どう定義しても良いことになる[5]。

1.4 便利な恒等式

次に、δ 関数を操作するうえで有用な関係式を紹介する。線形な変数変換に関わる公式として、次の公式が基礎的かつ重要である：

公式 1.4.1

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x). \tag{1.25}$$

この公式が意味することは、任意の滑らかな関数 $f(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(ax) = \frac{1}{|a|}f(0) \tag{1.26}$$

が成立するという意味である。つまり、最終的に積分されることを想定した関係式になっている。

導出. 今、$a > 0$ とする。変数変換 $y = ax$ を行うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(ax) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{a} f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y) = \frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} dy f\left(\frac{y}{a}\right)\delta(y) = \frac{1}{a}f(0) \tag{1.27}$$

である。同様の公式が $a < 0$ でも示せる。

この公式を拡張すると、一般の変数変換に関する公式を導出できる：

公式 1.4.2 任意の非線形変換 $g(x)$ を考える。この関数のゼロ点の集合を $\{x_k\}_k$ と書く：$g(x_k) = 0$. この時、

$$\delta\left(g(x)\right) = \sum_k \frac{1}{|g'(x_k)|}\delta(x - x_k) \tag{1.28}$$

と分解できる。

導出. まず、導出の流れをつかむために、$g(x)$ のゼロ点が 1 つしか存在しない場合を考えてみよう。つまり、x_0 が唯一のゼロ点 $g(x_0) = 0$ だと仮定する。この場合、$x \neq x_0 \Longrightarrow g(x) \neq 0$ が成り立つので、$x \neq x_0 \Longrightarrow \delta(g(x)) = 0$ である。つまり、

$$\delta(g(x)) = \begin{cases} 0 & (x \neq x_0) \\ \infty & (x = x_0) \end{cases} \propto \delta(x - x_0) \tag{1.29}$$

[4]無限大の値を取る特異点に関しては、有限個でも最終的に結果に影響する場合がある。例えば δ 関数。

[5]測度論の表現を使えば、関数 f と g が測度ゼロの集合を除いて同じ値（$f(x) = g(x)$）を取るのであれば、「f と g はほとんど至る所で同じ関数である」として、両者を同一視することを述べている。

となる。ここで比例定数を C_0 と置こう。即ち、$\delta(g(x)) = C_0\delta(x-x_0)$ である。この C_0 を求めるには、$g(x)$ を $x = x_0$ 近傍でテイラー展開し、局所的に線形に近似すればよい。つまり、

$$\delta(g(x)) = \delta\left(\underbrace{g(x_0)}_{=0} + g'(x_0)(x-x_0) + \dots\right) \simeq \delta\left(g'(x_0)(x-x_0)\right) = \frac{1}{|g'(x_0)|}\delta(x-x_0) \tag{1.30}$$

であり、$C_0 = 1/|g'(x_0)|$ が求まった。但し、公式 (1.25) を用いた。

上記の導出を踏まえると、ゼロ点が複数個ある場合の公式も求まる。即ち、ゼロ点を $\{x_k\}_k$ とするとき、ゼロ点以外の x では $g(x) \neq 0$ であるため、係数 $\{C_k\}_k$ を導入して

$$\delta(g(x)) = \sum_k C_k\delta(x-x_k) \tag{1.31}$$

の形に書くことができる。C_k を決定するには $x = x_k$ 近傍で $g(x)$ を線形近似すればよい：x が x_k の近傍の時、

$$\delta(g(x)) = \delta\left(\underbrace{g(x_k)}_{=0} + g'(x_k)(x-x_k) + \dots\right) \simeq \delta\left(g'(x_k)(x-x_k)\right) = \frac{1}{|g'(x_k)|}\delta(x-x_k). \tag{1.32}$$

即ち、$C_k = 1/|g'(x_k)|$ が求まった。以上により、公式 (1.28) が示された。

練習問題

練習問題として、次の公式を確認せよ：

問 1.4.1

$$\delta(-2x+5) = \delta\Big((-2)(x-5/2)\Big) = \frac{1}{2}\delta(x-5/2). \tag{1.33}$$

問 1.4.2

$$\delta(x^2-4) = \delta\Big(4(x-2)+\dots\Big) + \delta\Big(-4(x+2)+\dots\Big) = \frac{1}{4}\delta(x-2) + \frac{1}{4}\delta(x+2). \tag{1.34}$$

問 1.4.3

$$\delta(1-e^{-ax}) = \delta(ax+\dots) = \frac{1}{|a|}\delta(x). \tag{1.35}$$

問 1.4.4

$$\delta(x^n-1) = \begin{cases} \frac{1}{n}\delta(x-1) & (n\text{ は奇数}) \\ \frac{1}{n}\left\{\delta(x-1)+\delta(x+1)\right\} & (n\text{ は偶数}) \end{cases}. \tag{1.36}$$

問 1.4.5

$$\delta(\sin x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(x-k\pi). \tag{1.37}$$

問 1.4.6

$$\delta(\cos x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(x-\pi/2-k\pi). \tag{1.38}$$

問 1.4.7

$$\delta(x\cos x) = \delta(x) + \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi|k+1/2|}\delta(x-\pi/2-k\pi). \tag{1.39}$$

1.5　δ 関数の微分

次に、δ 関数の微分について解説する。δ 関数を微分することはしばしば行われる。例えば、

$$\frac{d}{dx}\delta(x) \tag{1.40}$$

にような記号操作を定義したい。初学者にとってこの動機はとても不可思議に映るかもしれないが、δ 関数は積分形を想定して導入されているので、積分形で考える分には意味がある定義が可能である。

具体的には、任意の滑らかな関数 $f(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\frac{d}{dx}\delta(x) = [f(x)\delta(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x)\frac{d}{dx}f(x) = -\frac{d}{dx}f(0) \tag{1.41}$$

が形式的に成り立つだろう。但し、式変形の途中で部分積分を用いた。同様にして、n を正の整数として、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\frac{d^n}{dx^n}\delta(x) = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x)\frac{d^n}{dx^n}f(x) = (-1)^n\frac{d^n}{dx^n}f(0) \tag{1.42}$$

である。以上の積分形での式変形を念頭に、δ 関数の微分は次のように定義される：

公式 1.5.1 n を正の整数とする。任意の滑らかな関数 $f(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\frac{d^n}{dx^n}\delta(x) = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x)\frac{d^n}{dx^n}f(x) = (-1)^n\frac{d^n}{dx^n}f(0) \tag{1.43}$$

で計算を行う。但し部分積分との整合性を考えて定義した。この積分形での計算を省略して、

$$f(x)\frac{d^n}{dx^n}\delta(x) = (-1)^n\delta(x)\frac{d^n}{dx^n}f(x) \tag{1.44}$$

と形式的に表現する。

練習問題

練習問題として、次の公式を確認せよ：

問 1.5.1

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2\frac{d}{dx}\delta(x-1)dx = -\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-1)\left(\frac{d}{dx}x^2\right)dx = -\int_{-\infty}^{\infty}2x\delta(x-1)dx = -2. \tag{1.45}$$

問 1.5.2

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sin(x)\frac{d^2}{dx^2}\delta(x-\theta)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-\theta)\left(\frac{d^2}{dx^2}\sin x\right)dx = -\sin\theta. \tag{1.46}$$

問 1.5.3

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d}{dx}e^x\frac{d}{dx}e^x\delta(x-y) = -\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d}{dx}e^x\delta(x-y)\right)e^x\frac{d}{dx}f(x)\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}e^x\delta(x-y)\frac{d}{dx}e^x\frac{d}{dx}f(x) = e^y\frac{d}{dy}e^y\frac{d}{dy}f(y).\end{aligned} \tag{1.47}$$

問 1.5.4 1 階 1 次元の常微分方程式

$$\frac{dX(t)}{dt} = V(X(t)) \tag{1.48}$$

を考える。この時、位相分布関数 $P_t(X)$ が連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}P_t(X)+\frac{\partial}{\partial X}\left\{V(X)P_t(X)\right\}=0 \tag{1.49}$$

を充たすことを示せ。

導出. まず $\delta\bigl(x-X(t)\bigr)$ の時間発展を考えよう：

$$\begin{aligned}\delta\bigl(x-X(t+dt)\bigr)-\delta\bigl(x-X(t)\bigr)&=\frac{d}{dt}\delta\bigl(x-X(t)\bigr)dt+O(dt^2)\\ =dt\frac{dX(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial X}\delta(x-X(t))+O(dt^2)&=dtV(X(t))\frac{\partial}{\partial X}\delta(x-X(t))+O(dt^2).\end{aligned} \tag{1.50}$$

ここで両辺の期待値を取る：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left[P_{t+dt}(X)\delta(x-X)-P_t(X)\delta(x-X)\right]=\int_{-\infty}^{\infty}dXP_t(X)dtV(X)\frac{\partial}{\partial X}\delta(x-X)+O(dt^2). \tag{1.51}$$

よって、$dt\downarrow 0$ では

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}P_t(X)\delta(x-X)=\int_{-\infty}^{\infty}dXP_t(X)V(X)\frac{\partial}{\partial X}\delta(x-X) \tag{1.52}$$

が得られる。ここで、右辺を部分積分した上で、両辺から δ 関数を積分して消去すると、

$$\frac{\partial}{\partial t}P_t(x)=-\int_{-\infty}^{\infty}dX\delta(x-X)\frac{\partial}{\partial X}P_t(X)V(X)=-\frac{\partial}{\partial x}P_t(x)V(x). \tag{1.53}$$

最後にダミー変数 x を X に置き換えることで、連続の式 (1.49) を得る。

1.5.1　δ 関数の微分の直観的な意味

δ 関数の微分というかなり変わった概念を定義したが、これを直観的に理解することはできないだろうか？δ 関数に対して直観を得るには、「δ 極限を取る前に、性質が良い関数 $\delta_\varepsilon(x)$ に対して微分を取るとどう振舞うか？」を考えるのが最も簡単である。

例 1.5.1 そこで、まずは矩形パルス型の $\delta_\varepsilon(x):=(1/\varepsilon)\mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x)$ 関数を考え（図 1.2a）、その微分を取ってみよう（図 1.2b）。計算すると

$$\delta_\varepsilon(x):=\frac{1}{\varepsilon}\mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x)\quad\Longrightarrow\quad\frac{d}{dx}\delta_\varepsilon(x)=\frac{1}{\varepsilon}\left\{\delta\left(x+\frac{\varepsilon}{2}\right)-\delta\left(x-\frac{\varepsilon}{2}\right)\right\} \tag{1.54}$$

となる。これを前提に考えてみると任意の滑らかな関数 $f(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxf(x)\frac{d}{dx}\delta_\varepsilon(x)=\int_{-\infty}^{\infty}dxf(x)\frac{1}{\varepsilon}\left\{\delta\left(x+\frac{\varepsilon}{2}\right)-\delta\left(x-\frac{\varepsilon}{2}\right)\right\}=-\frac{1}{\varepsilon}\left\{f\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)-f\left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)\right\} \tag{1.55}$$

となるであろう。最後に $\varepsilon\downarrow 0$ の極限を取ると、

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxf(x)\frac{d}{dx}\delta(x)=\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty}dxf(x)\frac{d}{dx}\delta_\varepsilon(x)=-\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\frac{1}{\varepsilon}\left\{f\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)-f\left(-\frac{\varepsilon}{2}\right)\right\}=-\frac{d}{dx}f(0) \tag{1.56}$$

となるべきであろう。これは式変形 (1.43) における $n=1$ の場合の結果である。

例 1.5.2 上では、矩形パルス関数 $\delta_\varepsilon(x):=\mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x)$ という、性質が δ 関数よりはましだが、それでも不連続性を持つ関数で議論を行った。次に、より性質がよい例として正規分布型の $\delta_\varepsilon(x):=e^{-x^2/(2\varepsilon^2)}/\sqrt{2\pi\varepsilon^2}$ を考えてみよう（図 1.2c）。この場合、

$$\delta_\varepsilon(x):=\frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon^2}}e^{-x^2/(2\varepsilon^2)}\Longrightarrow\frac{d}{dx}\delta_\varepsilon(x)=\frac{-x}{\varepsilon^3\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/(2\varepsilon^2)},\ \frac{d^2}{dx^2}\delta_\varepsilon(x)=\frac{1}{\varepsilon^3\sqrt{2\pi}}\left(\frac{x^2}{\varepsilon^2}-1\right)e^{-x^2/(2\varepsilon^2)} \tag{1.57}$$

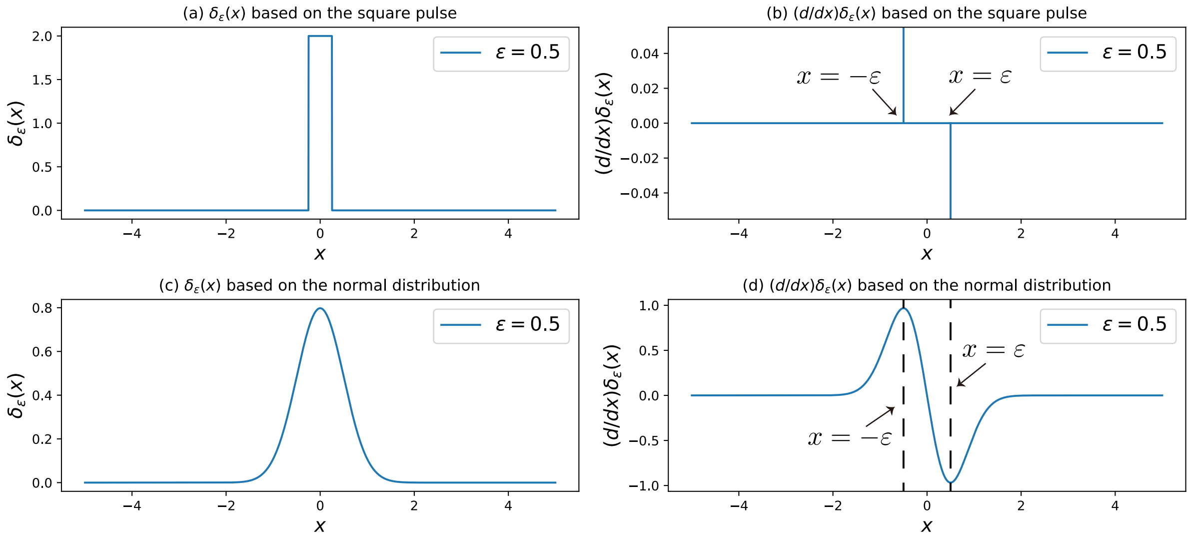

図 1.2: δ 関数に収束する前の性質が良い関数 $\delta_\varepsilon(x)$ で微分を行ったときの $(d/dx)\delta_\varepsilon(x)$ の様子。まず矩形パルス $\delta_\varepsilon(x) := \mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x)$ のグラフ (a) を考え、その微分 $(d/dx)\delta_\varepsilon(x)$ を考える (b)。次に正規分布 $\delta_\varepsilon(x) := e^{-x^2/(2\varepsilon^2)}/\sqrt{2\pi\varepsilon^2}$ のグラフ (c) を考え、その微分 $(d/dx)\delta_\varepsilon(x)$ を考える (d)。

となる。$(d^2/dx^2)\delta_\varepsilon(\pm\varepsilon) = 0$ を鑑みるに、$(d/dx)\delta_\varepsilon(x)$ は $x = -\varepsilon$ に正の高いピーク、$x = +\varepsilon$ に負の高いピークを持つ。よって、矩形パルスでの微分の図 1.2b と正規分布の微分の図 1.2d は定性的には似ていることに注意しよう。以上を念頭に任意の滑らかな関数 $f(x)$ との積分を計算しよう：

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{d}{dx}\delta_\varepsilon(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n} f(0)\right] \frac{-x}{\varepsilon^3\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/(2\varepsilon^2)} \quad (\text{注：テイラー展開した}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-\varepsilon^{n-1}}{n!}\frac{d^n}{dx^n} f(0) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^{n+1}}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (\text{注：変数変換 } x \to \varepsilon x \text{ を行った}) \\
&= -\frac{d}{dx} f(0) + O(\varepsilon^2)
\end{aligned} \tag{1.58}$$

となる。即ち、$\varepsilon \downarrow 0$ では式変形 (1.43) における $n = 1$ の場合と同じ結果が得られる。

以上を考えると、形式的に部分積分を経由して定義された式変形 (1.43) は、直観的には δ 極限を取る前の段階の $\delta_\varepsilon(x)$ で計算して直観を掴み、そこで成立する計算公式が一般的に成り立つように自然に定義されていると思うことができるだろう。実際、例えば物理学で衝突現象を記述する際に現れる δ 関数は、本来物理的には滑らかな関数として定義される劇力が、実験の分解能等の結果から δ 関数に見えるため、議論の単純化として導入されるものである。よって、そういった本来滑らかな関数としての $\delta_\varepsilon(x)$ について成立する演算が、極限としての δ 関数にも素朴に成立することを期待するのは『物理的直観/実用的な姿勢として正しい』と思われる[6]。

[6]『命題/性質 X が物理的直観として正しい』という表現を物理学者はよく使用する。これは業界のジャーゴンなので説明が難しいが、「実際の現象がまず現実に存在していて、それをモデル化したのがこの数理モデルだと思えば、当然、命題/性質 X が成立するのは自明である」とでも表現すれば良いだろうか？この論法は当然数学として認められるべき論法ではないが、「物理的直観として正しいので、それ以上の数学的論証上のテクニカルなポイントを論じることはしない」という姿勢を取る物理学者はよくいる。もちろんこれは厳密な数学的論証を避けているだけであり、問題を引き起こす可能性はある（し、実際しばしば問題になっている）が、応用志向の人間にとって数学はあくまで言語/道具なのであって、厳密な文法の問題/仕様の問題についてはその道の専門家に任せてしまって、実際に問題が起きてからまじめに考えるという姿勢を採用するのは合理性がある思う。そして実際問題、その程度の数学的論証レベルでかなりの物理学の世界は回っている。

練習問題

問 1.5.5 式変形 (1.58) を念頭に、同じ計算手法を用いて、$\delta_\varepsilon(x) := e^{-x^2/(2\varepsilon^2)}/\sqrt{2\pi\varepsilon^2}$ から出発して

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d^2}{dx^2}\delta_\varepsilon(x)dx = \frac{d^2}{dx^2}f(0) \tag{1.59}$$

を、$\delta_\varepsilon(x)$ を愚直に微分することで示せ。但し、$f(x)$ は任意の滑らかな関数とする。

問 1.5.6 式変形 (1.58) を念頭に、同じ計算手法を用いて、$\delta_\varepsilon(x) := e^{-x^2/(2\varepsilon^2)}/\sqrt{2\pi\varepsilon^2}$ から出発して

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d^n}{dx^n}\delta_\varepsilon(x)dx = (-1)^n\frac{d^n}{dx^n}f(0) \tag{1.60}$$

を一般の正の整数 n について示せ。但し、$f(x)$ は任意の滑らかな関数とする。（ヒント：部分積分を使う。結局、$\delta_\varepsilon(x)$ を愚直に微分するのは面倒なので、式変形 (1.43) と同様に、一般には部分積分を用いて導出するのが楽である。その意味で部分積分を用いて定義するのが一般の n について自然だと思われる。）

1.5.2 注意事項：混乱すれば積分形に戻れ！

先ほど δ 関数の微分を定義した。その結果、$f(x)(d/dx)\delta(x) = -\delta(x)(df(x)/dx)$ などという風変わりな記法を形式的に導入した。しかし、**こういった形式的な記法はあくまで積分形を想定しての式変形であることを忘れてはいけない**。δ 関数を扱っていると、一見謎の式変形が現れることが度々あるが、それらは積分形に立ち返って考えてみると混乱せずに済む。このことを具体例を通して説明していこう。

例 1.5.3 例えば、何も考えずに δ 関数を扱うと、次のような式変形をしたくなる：

$$x^2\frac{d}{dx}\delta(x-y) = -2x\delta(x-y) = -2y\delta(x-y). \tag{1.61}$$

これは一見正しそうに見える。しかし、式 (1.61) を『無条件で正しい式』と考えると、深刻な計算間違いに遭遇する可能性がある。例えば、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^3\frac{d}{dx}\delta(x-y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x\times \underline{x^2\frac{d}{dx}\delta(x-y)} \overset{?}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx x\times \underline{-2y\delta(x-y)} = -2y^2 \tag{1.62}$$

と変形するのは正しいだろうか？ここでは式 (1.61) を下線を引いた部分で「適用」した。この式変形は明らかに間違っている。正しくは

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^3\frac{d}{dx}\delta(x-y) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x-y)\frac{d}{dx}x^3 = -3y^2 \tag{1.63}$$

である（部分積分を用いた）。

例 1.5.4 筆者が昔混乱した別の例を提示しよう：まず次の式変形を考える

$$\frac{d}{dx}\{\underline{f(x)}\delta(x-y)\} = \frac{d}{dx}\{\underline{f(y)}\delta(x-y)\} = \underline{f(y)}\frac{d}{dx}\delta(x-y). \tag{1.64}$$

この変形は $x=y$ 以外では 0 になることから、$f(x)$ を $f(y)$ に置き換えている。これは結果的に正しい式変形である。では次の変形はどうだろうか？

$$\underline{f(y)}\frac{d}{dx}\delta(x-y) \overset{?}{=} \underline{f(x)}\frac{d}{dx}\delta(x-y). \tag{1.65}$$

ここでは $(d/dx)\delta(x-y)$ も $x=y$ 以外では 0 の値を取るだろうことから、$f(y)$ を素朴に $f(x)$ に置き換えている。この式変形は正しいだろうか？いや、この式変形は誤っている[7]。事実、この式変形が正しければ式 (1.64) と組み合わせることで、

$$\frac{d}{dx}\{f(x)\delta(x-y)\} \overset{?}{=} f(x)\frac{d}{dx}\delta(x-y) \tag{1.66}$$

[7] これは論外な式変形だと一目見てわかった人にはこの例は面白く見えないかもしれないが、『$x=y$ 以外の場所では値は 0 だから x を y に置き換える』という素朴な論理だけを信じれば、正しい式変形 (1.64) と間違った式変形 (1.65) の間の区別はつかないことに気を付けよう。

という明らかにおかしい「公式」が「導出」されてしまう。

両者の区別をするには、積分形で考えればよい。まず正しい式変形 (1.64) について考えよう。任意の滑らかな関数 $g(x)$ に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) \frac{d}{dx}\{\underline{f(x)}\delta(x-y)\} = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \{\underline{f(x)}\delta(x-y)\} \frac{d}{dx} g(x) = -f(y)\frac{d}{dy}g(y) \tag{1.67}$$

である（部分積分を用いた）。また、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) \underline{f(y)} \frac{d}{dx}\delta(x-y) = -\underline{f(y)}\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-y) \frac{d}{dx} g(x) = -f(y)\frac{d}{dy}g(y) \tag{1.68}$$

でもある（部分積分を用いた）。よって、結果的には、式変形 (1.64) における左辺と右辺が積分形の意味で等しいことがわかる。

一方、間違った式変形 (1.65) は積分形で考えると明らかに誤っている：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) \underline{f(x)} \frac{d}{dx}\delta(x-y) = -\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-y) \frac{d}{dx}\{g(x)\underline{f(x)}\} \tag{1.69}$$

であるため（部分積分を用いた）、式変形 (1.65) の左辺と右辺は等しくない。

つまり、『$x=y$ での成分しか積分に寄与しないので、$f(x)$ を $f(y)$ に置き換える』という素朴な論理は、微分が関わってくる盤面では常には正しくない。結局のところ、δ 関数の微分は積分形でしか定義されていないため、微分形の等式 (1.44) はあくまで積分形 (1.43) の省略と考えるべきであり、変形の最中に混乱した場合は常に積分形に立ち返って計算を実行するべきである。

1.6　発展：超関数としての δ 関数

ここまでで δ 関数に関する様々な風変わりな式変形を取り扱った。式変形の際にしばしば混乱が生じた場合は、『積分形で考える』という対処療法としての処方箋を提示してきた。実はこの処方箋は場当たり的なものではなく、δ 関数の数学的な正当化の際のアイディアを崩したものである[8]。

数学では δ 関数のような存在は超関数と呼ばれ、普通の関数とは異なる存在として定義される。超関数の基本的な考え方は次のようになる：ある適切な滑らかな関数 $g(x)$ を考える。このような都合の良い関数を**テスト関数**と呼ぶ。テスト関数の空間上での線形汎関数 $T[g]$ を、例えば

$$T[g] := g(0) \tag{1.70}$$

として定めよう。このような線形汎関数 T は δ 関数とは異なり、特に困難なく定義できるであろう。ここで汎関数 T は形式的に δ 関数を用いて

$$T[g] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) g(x) \tag{1.71}$$

と書き直すことができることに着目する。そこで δ 関数という異質な存在を、well-defined な式 (1.70) を経由して定義する。つまり、テスト関数 $g(x)$ と組み合わせた積分記号 $\int dx g(x)[...]$ を省略するという意味で、クリアに定義可能な線形汎関数 (1.70) と δ 関数が入った式 (1.71) を同一視し、$\delta(x)$ を定義することができる。

もう少し丁寧に『同一視』のアイディアを説明しよう。任意のテスト関数 $g(x)$ に対して、ある関数 $f(x)$ と組み合わせた

$$\langle f, g\rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) g(x) \tag{1.72}$$

という積分を定義する。この積分はテスト関数 $g(x)$ に関する線形汎関数である。つまり関数 f を与えるとそれに対応する線形汎関数 $\langle f, g\rangle$ を構成することができる。この意味で、関数 f を線形汎関数 $\langle f, g\rangle$ を同一視し、f 自体をテスト関数 g 全体のなす空間上の線形汎関数と『見做す』ことができる。この意味においては $\delta(x)$ は線形汎関数 $T[g] := g(0)$ と同一視できる。つまり、

$$\langle \delta, g\rangle = T[g] = g(0) \tag{1.73}$$

[8] ここでも数学的に厳密な考え方を述べているのではなく、数学的な正当化のラフなアイディアを述べているだけなので、詳細に興味がある読者はちゃんとした数学としての超関数を勉強されたし。

が成り立つため、δ は線形汎関数 T と対応するのだ。これが超関数としての同一視の考え方である。

この考え方では、任意のテスト関数 g に対して

$$\langle f, g\rangle = \langle h, g\rangle \tag{1.74}$$

が成り立つとき、f と h を超関数の意味で同一視されるため、$f = h$ と記述することができる。この考え方を踏まえていれば、ヘヴィサイド関数に関する不可思議な等号 (1.24) は理解できるであろう。即ち、テスト関数 $g(x)$ と積分したときの等号 (1.23) を踏まえれば超関数の意味で $\Theta_c(x) = \Theta(x)$ が成り立っているのだ。

また、δ 関数の微分もこの意味においては理解可能であろう。まずは

$$T[g] := (-1)^n \frac{d^n g}{dx^n}(0) \tag{1.75}$$

という線形汎関数 T を定義する。この線形汎関数は問題なく定義できるであろう。一方、δ 関数を用いて形式的に

$$\left\langle \frac{d^n}{dx^n}\delta(x), g\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) \frac{d^n}{dx^n}\delta(x) = (-1)^n \frac{d^n g}{dx^n}(0) = T[g] \tag{1.76}$$

という関係式がなりたつ。そこで $(d^n/dx^n)\delta(x)$ という不可思議な存在を、well-defined な線形汎関数 $T[g] := (-1)^n (d^n/dx^n) g(0)$ と同一視して定義すればよい。

1.7　注意事項：δ 関数の端点を含む積分について

ここでデリケートな問題として、δ 関数の端を含む積分について触れよう。即ち、

$$\int_0^{\infty} dx \delta(x) =? \tag{1.77}$$

という問題である。この積分が出てくると、しばしば物理数学の本では

$$\int_0^{\infty} dx \delta(x) = \frac{1}{2} \tag{1.78}$$

という計算が出てくる。これは以下の論理で出てくる：δ 関数が対称性（$\delta(x) = \delta(-x)$）を持つならば、

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = \int_{-\infty}^{0} dx f(x) + \int_0^{\infty} dx f(x) = 2\int_0^{\infty} dx f(x) \tag{1.79}$$

という式変形が可能であろう。この式変形を素朴に信じるならば、1/2 という値に設定することが自然だろう。この計算はしばしば正しい答えを与えるため、必ずしも間違っているとは言いきれない。

ではこの問の回答であるが、『一般には未定義であり、設定による』というのが正しい回答だと筆者は考えている。というのは、どういう極限で定義されているかわからないからだ。例えば変わった極限として、次のような例を考えることができる：

例 1.7.1 まず、$\delta_\varepsilon^{\mathrm{a}}(x)$ を

$$\delta_\varepsilon^{\mathrm{a}}(x) = \frac{1}{\varepsilon}\mathbf{1}_{(0,\varepsilon)}(x) \tag{1.80}$$

と定義しよう。これは左右非対称である：$\delta_\varepsilon^{\mathrm{a}}(x) \neq \delta_\varepsilon^{\mathrm{a}}(-x)$. この時、

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_0^{\infty} \delta_\varepsilon^{\mathrm{a}}(x) = 1 \tag{1.81}$$

であることは明らかである。

例 1.7.2 一方、$\delta_\varepsilon^{\mathrm{s}}(x)$ を

$$\delta_\varepsilon^{\mathrm{s}}(x) = \frac{1}{\varepsilon}\mathbf{1}_{(-\varepsilon/2,\varepsilon/2)}(x) \tag{1.82}$$

と定義する。これは左右対称である：$\delta^{\mathrm{s}}_{\varepsilon}(x)=\delta^{\mathrm{s}}_{\varepsilon}(-x)$. よって、

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_0^\infty \delta^{\mathrm{s}}_{\varepsilon}(x)=\frac{1}{2} \tag{1.83}$$

が成り立つ。

例 1.7.3 では、対称な δ 関数を扱えば常に 1/2 が自然なのだろうか？それも必ずしも言い切ることができない。なぜなら、

$$\lim_{\varepsilon'\downarrow 0}\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{-\varepsilon'}^\infty dx\delta^{\mathrm{s}}_{\varepsilon}(x)=1 \tag{1.84}$$

であり、これを形式的に書くと $\int_0^\infty dx\delta(x)=1$ に見えることもあるからだ。

例 1.7.4 また、積分値を 0 と解釈するような極限も構成できる。例えば、

$$\lim_{\varepsilon'\downarrow 0}\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\int_{+\varepsilon'}^\infty dx\delta^{\mathrm{s}}_{\varepsilon}(x)=0 \tag{1.85}$$

であり、これを形式的に書くと $\int_0^\infty dx\delta(x)=0$ になる。

これらの様に、$\int_0^\infty dx\delta(x)$ をどのような極限として定義するかによって値が異なってしまう。つまり、$\int_0^\infty dx\delta(x)$ と遭遇した時は、その積分がどういう極限の結果として解釈すべきか考える必要がある[9]。例えば、確率過程では次のような計算が実際に現れることがある：

例 1.7.5 ノイズの相関関数を

$$C_\varepsilon(t)=\frac{D}{\varepsilon}e^{-|t|/\varepsilon} \tag{1.86}$$

と書くことにする。今 $\varepsilon\downarrow 0$ を取ると相関関数は δ 関数になる：

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}C_\varepsilon(t)=2D\delta(t). \tag{1.87}$$

ここで、次のような積分を考えよう：

$$\int_0^\infty dtC_\varepsilon(t)=D \tag{1.88}$$

である。ここで、最初に δ 極限を取ろう：

$$\int_0^\infty dt\lim_{\varepsilon\downarrow 0}C_\varepsilon(t)=\int_0^\infty dt\Big(2D\delta(t)\Big). \tag{1.89}$$

この場合の δ 関数については $\int_0^\infty \delta(x)=1/2$ と解釈することが式 (1.88) との整合性の上で必要になる。

以上のように、δ 関数の計算では極限の順序についてのデリケートな問題が本来存在し、それらを無視して形式的に記号操作を行うと安全な『ちゃんとした数学』の範疇から外れてしまい、解釈に悩むことになる。こういった問題に悩まされたくないと思った人は、厳密な数学を勉強した方が良いと思われる。但し、『正しい数学』を学ぶには非常に時間がかかるため、物理学者のように「計算が仕事の関係で必要だが、手っ取り早く計算だけ出来るようになりたい人」にとっては、『数学 (mathematics)』ではなく『算術 (arithmetics)』として形式的な計算に習熟することを目指すことが多い[10]。多くの場合それで問題は生じないが、当然深刻な計算の問題を引き起こすこともあり得る。そのような場合は問題に出会ってからまじめに考えていくスタイルがよく採用されている。本ノートはそのような目的を達成することを目的としているので、厳密な数学の話はしない。

[9]筆者の感覚で言えば、確率微分方程式論における確率積分の定義と関係する。0 に設定するのが伊藤型であり、1/2 に設定するのがストラトノヴィッチ型である。

[10]物理学者は「私は数学は出来ません。算数ができます。」という表現を使うことが業界ではある。これは物理学者は『厳密数学』を必ずしも適切に使用していないという自覚があるので、自らに対する蔑称表現としてしばしば使用される。

Chapter 2

常微分方程式

この章では常微分方程式について概要を説明する。まずは 1 次元系の 1 階微分方程式について説明し、その後で多次元系（高階微分方程式を含む）について説明する。本章ではしばしば Python によるプログラミングコードが出てくるが、実際に入力・実行して式に対する数値的な感覚を掴むことを**非常に強くお薦め**する。そしてプログラミングコードを組んで具体的な数値評価ができない場合、読者は「自分はおそらく、実用的な範囲ではこのノートの内容を何も理解できていない。おそらく定義のレベルですら理解できていない」と判断して、そこまでの内容を再度読み直すことを**非常に強く薦める**。また、常微分方程式の計算練習を更に進めたい場合は、定評のある物理数学の書籍 [2]（原著は英語だが、翻訳した和書も存在する）を熟読したり、演習書 [1] の問題を黙々と熟すことをお薦めする。

2.1 微分方程式とは何か？

微分方程式を学ぶ大きな目的の一つが**ダイナミクスに関する予測モデル**を立てることである。予測とはざっくり言えば次のように定義するのが良いであろう：まず予測したい対象を決定しよう。簡単のため予測対象を 1 変数に限るものとして、時刻 t に置ける値を $x(t)$ と書くことにする。現時点までで得られる過去の情報 $\{x(s)\}_{s\leq t}$ を元に、将来の状態 $x(\tau)$ を決定する（但し、$\tau \geq t$）。数式で書けば、

$$\mathcal{P}_\tau: \quad \underbrace{\{x(s)\}_{s\leq t}}_{\text{現時刻までの全時系列情報}} \quad \longmapsto \quad \underbrace{x(\tau)}_{\text{未来の状態}} \tag{2.1}$$

となるマップ $\mathcal{P}_\tau$ を構成することが目標である。これがこの章で想定している『予測』の定義である。『ダイナミクス』という形容詞が強調されているのは、時間という概念が陽に含まれていることに起因している。

しかし、いきなりこの様なマップ $\mathcal{P}_\tau$ を抽象的に考えることは初学者にとってはわかりやすくないであろう。そこで本ノートでは、簡単で具体的な例題を通じて徐々に理解を深めていこう。よってまずは離散時刻系を考え、その後に連続極限を考えるこちで微分方程式系に到達する戦略を採用する事にする。

2.1.1 離散時間での予測モデル

まずは最も簡単な例題として離散時間系を考える。即ち、t は離散の値 $0, 1, 2, \ldots$ だけを取ることにする。そこで数列の記号を用いて、自然数の集合 $\boldsymbol{N} := \{t \,|\, t = 0, 1, \ldots\}$ を考えて、

$$t \in \boldsymbol{N}, \quad y_t := x(t) \tag{2.2}$$

と書くことにする。では具体的な離散時間での予測モデルを複数見て行こう。

例 2.1.1 このような離散時間系での予測モデルとして最も簡単なものの 1 つに、一階の線型漸化式

$$y_{t+1} = a y_t \tag{2.3}$$

が挙げられるだろう。このモデルでは現時点の情報 y_t が与えられれば未来の状態 y_{t+1} が決まるモデルになっている。予測のマップ $\mathcal{P}$ は：

$$\mathcal{P}: y_t \longmapsto y_{t+1}. \tag{2.4}$$

という構造をしている。プログラミングコードで書くとコード 2.1 のようになる。

この 1 階漸化式は解析的に解くことが可能であり、解は良く知られているように陽に[1]指数関数で与えら、初期条件 y_1 が与えられると、どの時刻 $t \geq 1$ の値 y_t であっても予測が出来る：

$$y_t = a^{t-1} y_1. \tag{2.5}$$

つまりこの陽的な解を踏まえると、より直接的に役に立つ予測の構造として、任意の $t \geq 1$ に対して次の構造が成り立っている：

$$\mathcal{P}_t : \underbrace{y_1}_{\text{初期条件}} \longmapsto \underbrace{y_t}_{\text{未来の状態}}. \tag{2.6}$$

つまり、初期条件 y_1 を与えると、未来の全ての状態が一意に予測できる。

コード 2.1: 1 階差分方程式の数値計算コード

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
plt.rcParams["font.size"] = 18

def generate(t):
    a = 0.5
    x = x_1 = 1.0
    xs = [x_1]
    for i in range(1,t):
        x = a*x
        xs.append(x)
    return np.array(xs)

xs = generate(20)
ts = np.arange(20)
plt.xlabel("discrete time ($t$)")
plt.ylabel("$y_t$")
plt.plot(ts, xs, "o", label="iteration")
plt.plot(ts, 0.5**ts, label="theory")
plt.legend()
```

例 2.1.2 もう少し複雑な例としては、線形 n 階漸化式を考えることもできるだろう：

$$y_{t+1} = \sum_{k=1}^{n} a_k y_{t-k+1} + c \tag{2.7}$$

このモデルでは過去 n ステップの情報 $\{y_{t-k+1}\}_{k=1,\dots,n}$ が与えられれば未来の状態 y_{t+1} が決まるモデルになっている。予測のマップ $\mathcal{P}$ は次のような構造をしている：

$$\mathcal{P} : \{y_{t-k+1}\}_{k=1,\dots,n} \longmapsto y_{t+1}. \tag{2.8}$$

このモデルの数値計算のコードはリスト 2.2 の様になる。

コード 2.2: 2 階の差分方程式の数値計算コード

```python
import numpy as np

  def generate(t):
    a_1, a_2, c = 1.5, -2.0, 1.0
```

[1]『陽に』という表現は少し不自然な日本語だと筆者には感じられるが、英単語 “implicitly” の訳語だと考えればよい。

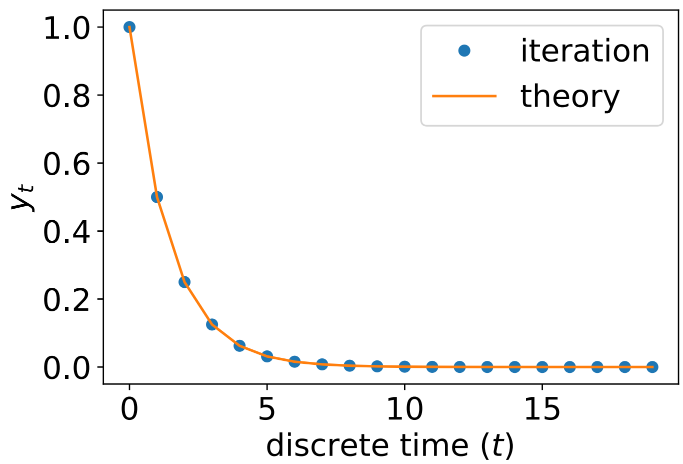

図 2.1: 1 階の差分方程式 (2.3) の数値計算（コード 2.1）の結果。指数関数の解 (2.5) と一致していることがわかる。

```
    x, y = x_2, x_1 = 1.0, 2.0
    xs = [x_1, x_2]
    for i in range(2,t):
        x_temp, y_temp = x, y
        x = a_1*x_temp + a_2*y_temp + c
        y = x_temp
        xs.append(x)
    return np.array(xs)

generate(5)
```

このモデルは解析解が求まり、解は n 個の指数関数の和で陽に書くことが出来る。具体的な解の形を書くと

$$y_t = \sum_{k=1}^{n} C_k z_k^t + C_0 \tag{2.9}$$

となる。ここで定数 z_k は特性方程式の k 番目の解であり、$C_0, \ldots, C_n$ は定数である。具体的には次の式を充たす：

$$z_k^n = \sum_{k=1}^{n} a_k z_k^{n-k}, \quad C_0 = \frac{c}{1 - \sum_{k=1}^{n} a_k}. \tag{2.10}$$

但し、簡単のため特性方程式の解は全て 1 とは異なると仮定する[2]。$C_1, \ldots, C_n$ は初期条件で決まる。以上のことから、初期条件 $\{y_1, \ldots, y_n\}$ を与えると任意の時刻 $t \geq 1$ での値 y_t が予測できる。よって、より直接的に役に立つ予測構造として、次の構造が成り立つ（但し、$t \geq 1$）：

$$\mathcal{P}_t : \underbrace{\{y_1, \ldots, y_n\}}_{\text{初期条件}} \longmapsto \underbrace{y_t}_{\text{未来の状態}} \tag{2.11}$$

もっと一般的な離散時間系の予測モデルを非線形な漸化式によって構成することができる。このようなモデルを**非線形差分方程式**と呼ぶことも多い。以下、差分方程式という単語を使うことにする。

[2]解が 1 の場合は単位根過程といって少し取り扱いが異なるが、そのような場合でも解析解は求まる。

定義 2.1.1 (非線形差分方程式) 離散時間系の予測モデルの一般的な構成方法の 1 つとして、過去 n ステップの情報を用いた**非線形差分方程式**を用いることがある：

$$y_{t+1} = F(y_t, y_{t-1}, \ldots, y_{t-n+1}). \tag{2.12}$$

但し、F は非線形変換である。このモデルでは過去 n ステップの情報 $\{y_{t-k}\}_{k=0,\ldots,n}$ が与えられれば未来の状態 y_{t+1} が決まるモデルになっている。この差分方程式を用いることで最終的に予測の構造は次のように与えられる（但し、$t \geq 1$）：

$$\mathcal{P}_t : \underbrace{\{y_1, \ldots, y_n\}}_{\text{初期条件}} \longmapsto \underbrace{y_t}_{\text{未来の状態}}. \tag{2.13}$$

このような一般の非線形差分方程式に対して、殆どの場合解析解は求まらないため、数値計算を行うことが多い。それでは数値計算のコードを具体的に書いてみよう：

練習問題

次の差分方程式を数値計算するコードを書き、$t = 1, \ldots, 50$ についての結果をグラフとして表示せよ。

問 2.1.1

$$y_{t+1} = ay_t + b \tag{2.14}$$

に対して以下のパラメタで考察せよ：

1. $a = 2, b = -1$
2. $a = 1, b = 1$
3. $a = 1/2, b = 5$
4. $a = -1/2, b = 0$

また、厳密解とも比較せよ。

問 2.1.2

$$y_{t+1} = 2y_t + y_{t-1} + 2 \tag{2.15}$$

問 2.1.3 (ロジスティクス写像)

$$y_{t+1} = ay_t(1 - y_t) \tag{2.16}$$

に対して、初期値は $y_1 \in (0, 1)$ とする。以下のパラメタで考察せよ：

1. $a = 1/2$
2. $a = 3/2$
3. $a = 3.8$

問 2.1.4 自分で差分方程式を後 5 つ考えて、様々なパラメタで数値計算せよ。

2.1.2 連続極限としての微分方程式

ここまでの例は全て離散時間系のみを扱った：$t \in \boldsymbol{N}$。しかし、一般の予測とは連続時間 $t \in \boldsymbol{R}^+ := (0, \infty)$ を対象に行うものである。微分方程式はこの問題を解決できる、連続時間系の予測モデルである。但し、常に離散時間系との（近似的な）対応関係を考えることが、直観的な理解を行う上で有益である。

例 2.1.3 まず簡単な例を考えよう。予測したい変数を $x(t)$ と書く。$t \in \boldsymbol{R}^+$ だとする。ここで

$$\frac{dx(t)}{dt} = ax(t) \tag{2.17}$$

という関係式が成立している場合考えよう。これは 1 階線形微分方程式の代表例である。方程式 (2.17) の解は指数関数で与えられる：

$$x(t) = C_0 e^{at}. \tag{2.18}$$

但し、C_0 は任意定数であり、初期値と関係する $C_0 = x(0)$。よって、モデル (2.17) は初期値 $x(0)$ を与えると、任意の時刻 t に置ける値が決まる予測構造になっている：

$$\mathcal{P}_t : \quad \underbrace{x(0)}_{\text{初期条件}} \quad \longmapsto \quad \underbrace{x(t)}_{\text{未来の状態}} \quad . \tag{2.19}$$

微分方程式 (2.17) について考察しよう。

$$\frac{d}{dt}x(t) = \frac{d}{dt}C_0 e^{at} = aC_0 e^{at} = ax(t) \tag{2.20}$$

であり、陽的な解析解 (2.18) は微分方程式 (2.17) を充たしている。よって、解 (2.18) は微分方程式 (2.17) の解である。

さて、微分方程式から未来の時刻 t の予測が原理上できることを形式的な式変形として説明したが、もう少し直観的な理解法を提示したい。それは、**離散時間系に近似的に引き戻して考える**ということである[3]。まず微分の定義

$$\frac{dx(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} + O(\Delta t) \tag{2.21}$$

を用いて、

$$\frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} \simeq ax(t) \tag{2.22}$$

と評価しよう。この式を整理すると差分方程式

$$x(t+\Delta t) \simeq (1 + a\Delta t)x(t) \tag{2.23}$$

が得られる。これは 1 階線形の差分方程式 (2.3) と全く同じ形をしており、既に解 (2.5) が完全に求まっているクラスの方程式である。実際、任意の自然数 $n \in \boldsymbol{N}$ に対して解は

$$x(n\Delta t) = (1 + a\Delta t)^n \, x(0) \tag{2.24}$$

で与えられるだろう。今 $t = n\Delta t$ と書き直して、t の値を固定したまま $\Delta t \downarrow 0$ の極限を取ると

$$x(t) = (1 + a\Delta t)^{t/\Delta t} \, x(0) = x(0) \left\{ (1 + a\Delta t)^{\frac{1}{a\Delta t}} \right\}^{at} \to x(0)e^{at} \tag{2.25}$$

となる。但し、$\lim_{h\downarrow 0}(1+h)^{1/h} = e$ を用いた。差分方程式を経由して得たこの解は、微分方程式の形式解 (2.18) と完全に一致する。つまり、**「微分方程式 (2.17) は差分方程式 (2.23) の自然な連続極限として得られる概念である」**という風に、理解することができる。

さて、章 2.1.1 では例 2.1.2 として、n 階の差分方程式を取り上げた。では、**n 階の差分方程式に対応する微分方程式とは何であろうか？その答えは n 階の微分方程式になる。**そこでまずは 2 解の線形微分方程式を具体例として取り上げよう[4]：

[3]微分方程式でよくわからなくなったら、離散時間系に戻して考え直すことを非常に強くお勧めする。
[4]正確には、定数係数の斉次 2 階線型微分方程式と呼ばれる。

例 2.1.4 2 階の線型微分方程式とは次の形をしている

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2}+\gamma\frac{dx(t)}{dt}+kx(t)=0. \tag{2.26}$$

但し、γ と k は定数である。この方程式の陽的な解析解は

$$x(t)=C_1e^{a_1t}+C_2e^{a_2t} \tag{2.27}$$

で与えらえる。但し、複素数の定数 a_1, a_2 は特性方程式の解である：$a_i^2+\gamma a_i+k=0$ $(i=1,2)$. 但し、今は簡単のため、特性方程式は重解を持たないと仮定した。また、C_1, C_2 は適当な任意定数であり、初期条件を与えると決まる。具体的には初期条件として $x(0), dx(0)/dt$ を与えると $C_1+C_2=x(0), a_1C_1+a_2C_2=dx(0)/dt$ で決まる。このモデルの解析解から予測が可能である。つまり、時刻 0 における情報 $x(0), dx(0)/dt$ を与えると、任意の時刻 $t\geq 0$ での値が確定する：

$$\mathcal{P}_t:\underbrace{\left\{x(0),\frac{dx(0)}{dt}\right\}}_{\text{初期条件}}\longmapsto\underbrace{x(t)}_{\text{未来の状態}}. \tag{2.28}$$

この 2 階の線型微分方程式が 2 階の差分方程式に対応することを確認してみよう。微分の定義から離散化すると、

$$\frac{dx(t)}{dt}\simeq\frac{x(t+\Delta t)-x(t)}{\Delta t},\quad \frac{d^2x(t)}{dt^2}\simeq\frac{x(t+2\Delta t)-2x(t+\Delta t)+x(t)}{\Delta t^2} \tag{2.29}$$

である[5]。よって、

$$\begin{aligned}&\frac{x(t+2\Delta t)-2x(t+\Delta t)+x(t)}{\Delta t^2}+\gamma\frac{x(t+\Delta t)-x(t)}{\Delta t}+kx(t)\simeq 0\\ \Longleftrightarrow\, &x(t+2\Delta t)\simeq(2-\gamma\Delta t)\,x(t+\Delta t)-\left(1-\gamma\Delta t+k\Delta t^2\right)x(t)\end{aligned} \tag{2.31}$$

と変形することができる。これは 2 階の差分方程式である。2 階の差分方程式 (2.7) の解は一般に 2 つの指数関数の和 (2.9) で書くことが出来るが、2 解の微分方程式 (2.26) の解 (2.27) は全く同じ形の構造を持っていることに注意しよう。これは結局、2 階の差分方程式の解から $\Delta t\downarrow 0$ の極限をとると 2 階の微分方程式 (2.26) の解 (2.27) が現れることを考えると、非常に自然だと思われるであろう。

また、予測の構造としてインプットパラメタとして必要な情報が $x(0)$ と $dx(0)/dt$ になっていることに注意しよう。これも 2 階の差分方程式との対応を考えると自然である。2 階の差分方程式では、その構成からほぼ自明なこととして $\{y_0, y_1\}$ が与えられて任意の時刻 $t\geq 0$ の値 y_t が予測可能であった。2 階の微分方程式では $\{x(0), dx(0)/dt\}$ が必要であり、必要なパラメタの個数が同じである。また、微分の定義を考えると $x(0+\Delta t)\simeq x(0)+\Delta t(dx(0)/dt)$ であることに着目しよう。今式を整理するために $y_n:=x(n\Delta t)$ と置くと、$y_0=x(0), y_1=x(0)+\Delta t(dx(0)/dt)$ である。よって結局、$\{x(0), dx(0)/dt\}$ を与えることは、$\{y_0, y_1\}$ を与えることと等価である。即ち、2 階の微分方程式のインプットパラメタが $\{x(0), dx(0)/dt\}$ である事実は、2 階の差分方程式のインプットパラメタが $\{y_0, y_1\}$ であることと完全に対応している。この事は実際の数値計算を通じて理解すれば、極めて自明な事と感じられるであろう。

2.2 1 階の常微分方程式

2.2.1 1 階の常微分方程式の定義

以上を踏まえて、1 階の微分方程式は次のように定義される：

[5] より丁寧に書くと、$dx/dt=y$ と書いて以下のように変形する：

$$\frac{d^2x}{dt^2}\simeq\frac{y(t+\Delta t)-y(t)}{\Delta t}\simeq\frac{1}{\Delta t}\left\{\frac{x(t+2\Delta t)-x(t+\Delta t)}{\Delta t}-\frac{x(t+\Delta t)-x(t)}{\Delta t}\right\}\simeq\frac{x(t+2\Delta t)-2x(t+\Delta t)+x(t)}{\Delta t^2}. \tag{2.30}$$

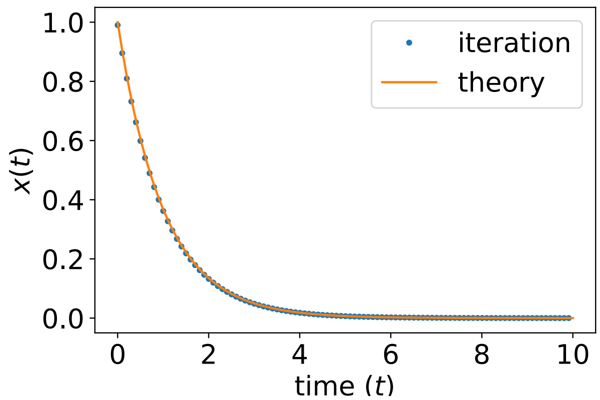

図 2.2: コード 2.3 に基づく計算結果。ここでは $F(x,t)=-x, x_0=1$ を想定した。厳密解は $x(t)=x_0e^{-t}$ で与えられる。

定義 2.2.1 $F(x,t)$ を任意の非線形関数とする。1 階の微分方程式とは

$$\frac{dx(t)}{dt}=F(x(t),t) \tag{2.32}$$

を指す。特に $F(x,t)$ における t 依存性がない場合は、『この微分方程式系は**自励系**である』と表現する。このモデルには初期条件 $x(0)$ をインプットパラメタとして任意の時刻 $t\geq 0$ の状態 $x(t)$ を予測する：

$$\mathcal{P}_t:\quad \underbrace{x(0)}_{\text{初期条件}} \quad\longmapsto\quad \underbrace{x(t)}_{\text{未来の状態}} \quad . \tag{2.33}$$

但し、次の章で学ぶ偏微分方程式と区別して、**常微分方程式**と呼ぶことも多い。この呼称も覚えておくこと。1 階の常微分方程式を素朴に離散化すると、次のコードのようになる（注：後述するオイラー法による数値計算；この方法は精度が非常に悪いので、直観を掴む以上の用途で使用しないこと。特に章 2.5 を必ず後で読むこと）：

コード 2.3: 1 階微分方程式の数値計算コード（オイラー法；精度は良くない）

```
import numpy as np

def F(x,t):
return −x

def generate(t_fin):
x = x_1 = 1.0
xs = []
N_steps = 1000
ts = np.linspace(0,t_fin,N_steps)
dt = ts[1]−ts[0]
for t in ts:
    xs.append(x)
    x += F(x,t)∗dt
return ts, np.array(xs)

ts, xs = generate(10.0)
```

練習問題

以下の常微分方程式を $x(t)$ について数値計算し、その結果をグラフ化せよ。

問 2.2.1

$$\frac{dx}{dt} = 5x, \quad x(0) = 1. \tag{2.34}$$

問 2.2.2

$$\frac{dx}{dt} = \frac{t}{1+t^2}x, \quad x(0) = 1. \tag{2.35}$$

問 2.2.3

$$\frac{dx}{dt} = -x + \cos t, \quad x(0) = 1. \tag{2.36}$$

問 2.2.4

$$\frac{dx}{dt} = -tx + \sin t, \quad x(0) = 1. \tag{2.37}$$

問 2.2.5

$$\frac{dx}{dt} = -x - x^2, \quad x(0) = \frac{1}{2}. \tag{2.38}$$

問 2.2.6

$$\frac{dx}{dt} = -x^2, \quad x(0) = 1. \tag{2.39}$$

問 2.2.7

$$\frac{dx}{dt} = \sin x, \quad x(0) = 1. \tag{2.40}$$

問 2.2.8

$$\frac{dx}{dt} = x \sin x, \quad x(0) = \frac{1}{2}. \tag{2.41}$$

2.2.2 変数分離形

では、今まで 1 階常微分方程式の定義と数値解を得る（素朴な）方法を議論した。次に、解析解について議論する。最も単純な 1 階常微分方程式は**変数分離形**と呼ばれる形をしている：

定義 2.2.2 次の形の 1 階常微分方程式を**変数分離形**と呼ぶ：

$$\frac{dx(t)}{dt} = F(x(t))g(t). \tag{2.42}$$

但し、$F(x)$ と $g(t)$ は任意関数とする。この場合、解は

$$\int_{x(0)}^{x(t)} \frac{dx'}{F(x')} = \int_0^t g(t')dt' \tag{2.43}$$

で与えられる。

「習うより慣れよ」という。いくつかの具体例を見て行こう：

例 2.2.1

$$\frac{dx}{dt} = ax \tag{2.44}$$

は変数分離形であり、解は次のように与えられる：

$$\int_{x(0)}^{x(t)} \frac{dx'}{x'} = \int_0^t adt' \iff \ln \frac{x(t)}{x(0)} = at \iff x(t) = x(0)e^{at}. \tag{2.45}$$

例 2.2.2

$$\frac{dx}{dt} = \frac{a}{1+t}x \tag{2.46}$$

は変数分離形であり、解は次のように与えられる：

$$\int_{x(0)}^{x(t)} \frac{dx'}{x'} = \int_0^t \frac{adt'}{1+t'} \iff x(t) = x(0)\left(1+t\right)^a. \tag{2.47}$$

例 2.2.3

$$\frac{dx}{dt} = ax^2 \tag{2.48}$$

は変数分離形であり、解は次のように与えられる：

$$\int_{x(0)}^{x(t)} \frac{dx'}{x'^2} = \int_0^t adt \iff x(t) = \frac{x(0)}{1-ax(0)t}. \tag{2.49}$$

この解が意味する事として、解は $t \in [0, t_{\mathrm{fin}}), t_{\mathrm{fin}} := 1/(ax(0))$ でしか定義されておらず、$t = t_{\mathrm{fin}}$ で解が発散するということだ。この現象を**解の爆発**という。一般に非線形常微分方程式では解の爆発が生じることがある。

2.2.3　線型微分方程式

次に、1 階線型微分方程式を扱う。具体的には次のようになる：

定義 2.2.3 1 階線型微分方程式とは次の形の常微分方程式である：

$$\frac{dx(t)}{dt} = -a(t)x(t) + b(t). \tag{2.50}$$

この解は具体的には次の式で与えられる：

$$x(t) = x(0)\exp\left[-\int_0^t a(s)ds\right] + \int_0^t dsb(s)\exp\left[-\int_s^t a(s')ds'\right]. \tag{2.51}$$

また $b(t) = 0$ の場合は**斉次 1 階線型微分方程式**、$b(t) \neq 0$ の場合は**非斉次 1 階線型微分方程式**と呼ぶ。

導出. まずは斉次解に注目する。$b(t) = 0$ の時、

$$\frac{dx(t)}{dt} = -a(t)x(t) \iff \int_{x(0)}^{x(t)} \frac{dx'}{x'} = -\int_0^t a(s)ds \iff x(t) = x(0)\exp\left[-\int_0^t a(s)ds\right] \tag{2.52}$$

ここでこの斉次解をベースに、非斉次解（$b(t) \neq 0$ の場合）を推測する。具体的には式 (2.50) の解の形として、

$$x(t) = y(t)\exp\left[-\int_0^t a(s)ds\right] \tag{2.53}$$

を仮定する。つまり元の変数 $x(t)$ より、$y(t)$ を調べる方が計算が楽になるという推測をする。これは斉次解 (2.52) の定数項 $x(0)$ を関数 $y(t)$ に置き換えて変形するため、**定数変化法**と呼ぶ。式 (2.50) に変形 (2.53) を適用すると

$$\frac{dy(t)}{dt} = b(t)\exp\left[\int_0^t dsa(s)\right] \Longrightarrow y(t) = y(0) + \int_0^t dsb(s)\exp\left[\int_0^s ds'a(s')\right] \tag{2.54}$$

よって、整理すると解 (2.51) を得る。

練習問題

次の微分方程式に対する数値計算のコードを書き、結果を図示せよ。また厳密解を導出し、数値計算結果と一致することをグラフ上で図示せよ[6]。

問 2.2.9

$$\frac{dx}{dt} = -x + \sin t. \tag{2.55}$$

問 2.2.10

$$\frac{dx}{dt} = -x + e^{-t}. \tag{2.56}$$

問 2.2.11

$$\frac{dx}{dt} = -tx + t. \tag{2.57}$$

問 2.2.12

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{x}{t} + \sin t. \tag{2.58}$$

問 2.2.13

$$\frac{dx}{dt} = t^2 x + t. \tag{2.59}$$

2.3 2 階の常微分方程式

2.3.1 2 階の常微分方程式の定義

1 階の常微分方程式と同様に、2 階の常微分方程式も定義できる：

定義 2.3.1 $F(x, v, t)$ を任意の非線形関数とする。2 階の微分方程式とは

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F\left(x(t), \frac{dx(t)}{dt}, t\right) \tag{2.60}$$

を指す。特に $F(x, v, t)$ における t 依存性がない場合は**自励系**と呼ぶ。このモデルは初期条件 $\{x(0), dx(0)/dt\}$ を元に、任意の時刻 $t \geq 0$ の状態 $x(t)$ を予測する：

$$\mathcal{P}_t : \underbrace{\left\{x(0), \frac{dx(0)}{dt}\right\}}_{\text{初期条件}} \longmapsto \underbrace{x(t)}_{\text{未来の状態}}. \tag{2.61}$$

2.3.2 2 階の 1 変数常微分方程式 = 2 次元の 1 階微分方程式である

ここで 2 階の 1 変数常微分方程式は、2 次元空間での 1 階微分方程式になることに触れよう。具体的には、式 (2.60) を次のように変形しよう：

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{dx}{dt}\right) = F\left(x, \frac{dx}{dt}, t\right), \quad \frac{d}{dt}x = \frac{dx}{dt} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{d}{dt}X_2 = F\left(X_1, X_2, t\right), \quad \frac{d}{dt}X_1 = X_2 \tag{2.62}$$

但し、次の変数を定義した：

$$X_1(t) := x(t), \quad X_2(t) := \frac{dx(t)}{dt}. \tag{2.63}$$

[6] 式変形で困った場合は Mathematica を用いるか、岩波の数学公式集を見よ。

この式変形を踏まえると、2 階の常微分方程式は 2 変数 (X_1, X_2) についての連立 1 階常微分方程式と看做せる。この事実をまとめると以下のようになる：

公式 2.3.1 2 階の微分方程式

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = F\left(x(t), \frac{dx(t)}{dt}, t\right) \tag{2.64}$$

は、

$$\boldsymbol{X}(t) := \begin{pmatrix} X_1(t) \\ X_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x(t) \\ \frac{dx(t)}{dt} \end{pmatrix}, \quad \frac{d\boldsymbol{X}(t)}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}(t), t), \quad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}(t), t) := \begin{pmatrix} X_2 \\ F(X_1, X_2, t) \end{pmatrix} \tag{2.65}$$

と等価である。つまり、2 次元ベクトル $\boldsymbol{X}(t)$ についての 1 階の常微分方程式と看做すことができる。

2 階の常微分方程式を 2 次元空間の 1 階常微分方程式と看做したうえで素朴に離散化すると、次のコードのようになる（注：後述するオイラー法による数値計算；この方法は精度が非常に悪いので、直観を掴む以上の用途で使用しないこと。特に章 2.5 を必ず後で読むこと）：

コード 2.4: 2 階微分方程式の数値計算コード（オイラー法；精度は良くない）

```
import numpy as np

def F(x,v,t):
    return −x

def generate(t_fin):
    x = x_1 = 1.0
    v = v_1 = 0.0
    xs, vs = [], []
    N_steps = 1000
    ts = np.linspace(0,t_fin,N_steps)
    dt = ts[1]−ts[0]
    for t in ts:
        xs.append(x)
        vs.append(x)
        x += v∗dt
        v += F(x,v,t)∗dt
    return ts, np.array(xs), np.array(vs)

ts, xs, vs = generate(10.0)
```

練習問題

以下の常微分方程式を $x(t)$ について数値計算し、その結果をグラフ化せよ。

問 2.3.1

$$\frac{d^2x}{dt^2} = x, \quad x(0) = 1, \quad \frac{dx(0)}{dt} = 0. \tag{2.66}$$

問 2.3.2

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x - \frac{dx}{dt}, \quad x(0) = 1, \quad \frac{dx(0)}{dt} = 0. \tag{2.67}$$

問 2.3.3

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x - \epsilon x^3, \quad x(0) = 1, \quad \frac{dx(0)}{dt} = 0, \quad \epsilon = 0.1. \tag{2.68}$$

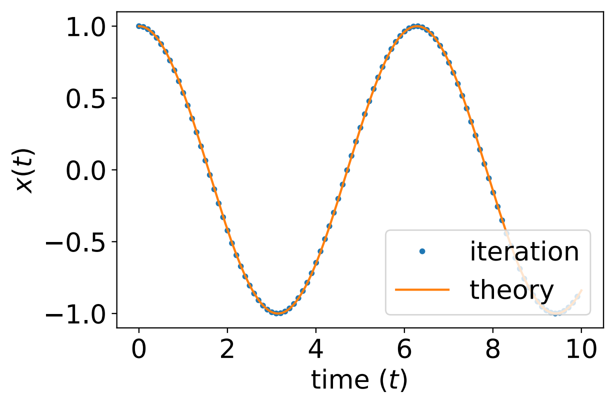

図 2.3: コード 2.4 に基づく計算結果。ここでは $F(x,v,t)=-x, x_0=1, v_0=0$ を想定した。厳密解は $x(t)=x_0\cos t+v_0\sin t$ で与えられる。

2.3.3 斉次定数係数線型方程式

まずは定数係数の線型方程式から扱おう：

公式 2.3.2 定数係数の斉次 2 階線型方程式は

$$\frac{dx^2(t)}{dt^2}=-\eta\frac{dx(t)}{dt}-kx(t) \tag{2.69}$$

で与えられる。この解は、C_1, C_2 は任意定数としたうえで、指数関数の重ね合わせ

$$x(t)=C_1e^{a_1t}+C_2e^{a_2t} \tag{2.70}$$

で与えられる。但し、特性方程式 $a_i^2+\eta a_i+k=0\ \ (i=1,2)$ が重解を持たないと仮定した。

導出. 解 (2.70) を式 (2.69) を充たすことをチェックできる。そして解 (2.70) は 2 つの任意定数を持っており、

$$x(0)=C_1+C_2,\ \ \frac{dx(0)}{dt}=C_1a_1+C_2a_2 \tag{2.71}$$

によって決まる。よって、予測構造 $\mathcal{P}:\{x(0),dx(0)/dt\}\longmapsto x(t)$ が一意に定まるのでこれで十分である[7]。

最も簡単であり、尚且つ応用上重要な例題は単振動であろう：

例 2.3.1 (単振動) 単振動のモデルとは

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2}=-\omega^2x(t) \tag{2.72}$$

で与えられる。但し、$\omega^2>0$ とする。この場合の特性方程式は

$$a_k^2=-\omega^2\ \ (k=1,2)\quad\Longleftrightarrow\quad a_1=i\omega, a_2=-i\omega \tag{2.73}$$

である。よって、一般解は

$$x(t)=C_1e^{i\omega t}+C_2e^{-i\omega t} \tag{2.74}$$

で与えられる（C_1, C_2 は任意の複素数の定数）。ここでオイラーの公式

$$e^{i\omega t}=\cos\omega t+i\sin\omega t \tag{2.75}$$

[7]厳密な証明は数学の本を参照されたし。一般に、性質のよい微分方程式については解の存在ならびに一意性が証明できるため、任意の初期条件を表現できる解を 1 つ具体的に見つけることができればそれが必要十分解である。また、例外的な特異解が存在する場合もあるが、本ノートでは扱わない。

を用いると

$$x(t) = C_1' \cos \omega t + C_2' \sin \omega t \tag{2.76}$$

と書きなおすことができる（$C_1' := C_1 + C_2, C_2' := C_1 - C_2$ は任意の複素数の定数)。初期条件 $\{x(0), dx(0)/dt\}$ を与えると定数が決まり、次の予測公式が得られる：

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{1}{\omega}\frac{dx(0)}{dt} \sin \omega t. \tag{2.77}$$

例 2.3.2 (減衰・発散振動) k と η が実数であり、尚且つ、特性方程式の解が実部も虚部もゼロではない複素数とする：

$$a_1 = -\frac{1}{\tau} + i\omega, \quad a_2 = -\frac{1}{\tau} - i\omega. \tag{2.78}$$

但し、τ と ω はゼロでない任意の実数（正でも負でもよい）とする。この場合解は任意定数 C_1, C_2 を導入して

$$x(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} \left(C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t\right) \tag{2.79}$$

と書くことができる。つまり、$\tau > 0$ なら減衰振動し、$\tau < 0$ なら発散振動する。

特性方程式が重解を持つ場合

次に特性方程式が重解を持つ場合を考えよう。つまり $k = \eta^2/4$ の場合である。この場合は特殊な扱いが必要になる。この場合の解決法は以下のようになる。

いま、重解をぎりぎり持たないパラメタになっているとしよう。即ち、ある微量パラメタ $\varepsilon > 0$ があって、

$$k = \frac{\eta^2}{4} - \frac{\varepsilon^2}{4} \tag{2.80}$$

とする。この場合の特性方程式の解は

$$a_1 = \frac{-\eta + \varepsilon}{2}, \quad a_2 = \frac{-\eta - \varepsilon}{2} \tag{2.81}$$

となり、2 つの解をもつ。そこでここでの問題解決の方針として、$\varepsilon \neq 0$ では解が完全に求まっていることを踏まえて、徐々に $\varepsilon \downarrow 0$ の極限を取って、解がどのように変化していくかを調べよう。特性方程式の解から、$\varepsilon \neq 0$ では

$$x(t) = e^{-\frac{\eta t}{2}} \left(C_1 \cos \frac{\varepsilon t}{2} + C_2 \sin \frac{\varepsilon t}{2}\right) \tag{2.82}$$

が解になることがわかる。ここで $\varepsilon \downarrow 0$ において

$$\cos \frac{\varepsilon t}{2} \to 1, \quad \sin \frac{\varepsilon t}{2} \to 0 \tag{2.83}$$

になることに着目しよう。つまり、$\varepsilon \downarrow 0$ を完全に取ってしまうと任意定数 C_2 の自由度が消失してしまう。これによって、$\varepsilon \downarrow 0$ では独立な解が 2 つ得られなくなってしまうことがわかる。しかし同時に、ε が微小量であってもノンゼロであれば

$$\cos \frac{\varepsilon t}{2} \simeq 1 + O(\varepsilon^2), \quad \sin \frac{\varepsilon t}{2} \simeq \frac{\varepsilon t}{2} + O(\varepsilon^2) \tag{2.84}$$

として振舞うことがわかる。ここで、C_2 は任意定数だったので定数 ε を含めてしまって、$C_2' := \frac{2C_2}{\varepsilon}$ と置き換えてもいいだろう。すると

$$x(t) \simeq e^{-\frac{\eta t}{2}} \left(C_1 + C_2' t + O(\varepsilon)\right) \tag{2.85}$$

と書き換えることができる。C_2' を大きさを一定に保ったまま $\varepsilon \downarrow 0$ の極限を完全に取ると

$$x(t) = e^{-\frac{\eta t}{2}} \left(C_1 + C_2' t\right) \tag{2.86}$$

が得られる。これは 2 つの任意定数 C_1, C_2' を含むため、一般解である。これが、特性方程式が重解を持つ場合の一般解である。まとめると次のようになる：

公式 2.3.3 特性方程式が重解をもつ 2 解の斉次線形微分方程式

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\eta\frac{dx(t)}{dt} - \frac{\eta^2}{4}x(t) \tag{2.87}$$

の一般解は任意定数 C_1, C_2 を用いて次の式で与えられる：

$$x(t) = e^{-\frac{\eta t}{2}}\left(C_1 + C_2 t\right). \tag{2.88}$$

2.3.4 保存系

2 階の微分方程式でも特殊な系として**保存系**がある。具体的には次のような系である：

公式 2.3.4 次の形の 2 階の微分方程式

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = F(x(t)) \tag{2.89}$$

は**保存系**である。保存系とは、**保存量**（**運動の積分**とも言う）が存在する系である。この系の保存量は

$$\mathcal{H}\left(x(t), \frac{dx(t)}{dt}\right) := \frac{1}{2}\left(\frac{dx(t)}{dt}\right)^2 + V(x(t)) = E = \text{const.}, \quad V(x) := -\int dx F(x) \tag{2.90}$$

であり、この保存量を**エネルギー**と呼ぶ。この保存系では、エネルギーが常に時間的に一定の値を取り続ける。保存系の解は次の式によって陰的に与えられる：

$$\pm\int_{x(0)}^{x(t)} \frac{dx'}{\sqrt{2(E - V(x'))}} = t \tag{2.91}$$

2.4 高次元の微分方程式

2.4.1 n 階の常微分方程式

一般の n 階の常微分方程式は次のように定義される：

定義 2.4.1 $F(x_0, x_1, ..., x_{n-1}, t)$ を任意の非線形関数とする。n 階の微分方程式とは

$$\frac{d^n x(t)}{dt^n} = F\left(x(t), \frac{dx(t)}{dt}, \ldots, \frac{d^{n-1}x(t)}{dt^{n-1}}, t\right) \tag{2.92}$$

を指す。特に $F(x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, t)$ における t 依存性がない場合は**自励系**と呼ぶ。このモデルは初期条件 $\{x(0), dx(0)/dt, \ldots, d^{n-1}x(0)/dt^{n-1}\}$ を元に、任意の時刻 $t \geq 0$ の状態 $x(t)$ を予測する：

$$\mathcal{P}_t : \underbrace{\left\{x(0), \frac{dx(0)}{dt}, \ldots, \frac{d^{n-1}x(0)}{dt^{n-1}}\right\}}_{\text{初期条件}} \longmapsto \underbrace{x(t)}_{\text{未来の状態}}. \tag{2.93}$$

2.4.2 n 階の 1 変数微分方程式 $=$ n 次元の 1 階微分方程式である

ここで、n 階の 1 変数微分方程式は常に n 次元系の 1 階微分方程式と看做せることに触れておこう。

公式 2.4.1 n 階の微分方程式

$$\frac{d^n x(t)}{dt^n} = F\left(x(t), \frac{dx(t)}{dt}, \ldots, \frac{d^{n-1}x(t)}{dt^{n-1}}, t\right) \tag{2.94}$$

は、

$$\boldsymbol{X}(t) := \begin{pmatrix} X_1(t) \\ X_2(t) \\ \vdots \\ X_{n-1}(t) \\ X_n(t) \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} x(t) \\ dx(t)/dt \\ \vdots \\ d^{n-2}x(t)/dt^{n-2} \\ d^{n-1}x(t)/dt^{n-1} \end{pmatrix}, \ \frac{d\boldsymbol{X}}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}, t), \ \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}, t) := \begin{pmatrix} X_2 \\ X_3 \\ \vdots \\ X_{n-1} \\ F(X_1, \ldots, X_n, t) \end{pmatrix} \tag{2.95}$$

と等価である。つまり、n 次元ベクトル $\boldsymbol{X}(t)$ についての 1 階の常微分方程式と看做すことができる。

練習問題

次の $x(t)$ についての高階微分方程式を n 次元空間の 1 階常微分方程式に直せ。但し n は適当な非負整数である。

問 2.4.1

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\eta\frac{dx}{dt} - kx - \varepsilon x^3 \quad (\text{但し、}\eta, k, \varepsilon \text{ は定数}). \tag{2.96}$$

問 2.4.2

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x. \tag{2.97}$$

問 2.4.3

$$\frac{d^3x}{dt^3} = -\frac{dx}{dt} - x. \tag{2.98}$$

問 2.4.4

$$\frac{d^4x}{dt^4} = -x. \tag{2.99}$$

2.5 数値計算の方法

ここまで、微分方程式を離散化した数値計算手法をベースに、式から読み取れる「直観」について理解を深めてきた。しかし、この章で今まで提示してきた離散化手法はわかりやすいが、計算精度はかなり悪い。そこで、ここでは微分方程式の数値計算についてもう少し精度がよい技法について解説する。ここまでの知識については理工系学生なら全員知っておくべき『常識』[8]だと筆者は考えている。

2.5.1 オイラー法

ここまで説明してきた微分方程式の離散化方法は**オイラー法**と呼ばれる手法をベースにしている。ここからは 1 次元の 1 階微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = F(x, t) \tag{2.100}$$

を考えていく。x が n 次元ベクトル $\boldsymbol{x} := (x_1, \ldots, x_n)$ の場合にも拡張は容易であるが、本ノートでは説明しない。また、本章で説明する手法は全て陽的解法 (explicit solution) であり、陰的解法 (implicit solution) については解説しない[9]。

[8]『常識』という単語はあまりに便利であり、筆者としてはあまり使いたく単語ではあるが、知っておかないと「学部で訓練が足りていないのではないか？」と疑われる可能性が高い項目ではあるため、ここでは『常識』という単語で形容した。

[9]数値計算の安定性を考慮すべき堅い方程式 (stiff equations) については陰的手法を用いるのが普通である。

オイラー法に基づく離散化とは次の様に定義される：

定義 2.5.1 (オイラー法) 時間刻み幅 Δt とするとき時刻 $t_n = n\Delta t$ とする。$x_n := x(t_n)$ とするとき、**オイラー法 (explicit Euler method)** に基づく離散化とは、

$$x_{n+1} = x_n + F(x_n, t_n)\Delta t \tag{2.101}$$

とするものである。

このオイラー法の悪いところは、$\Delta t \downarrow 0$ での収束速度が $O(\Delta t^1)$ であり、非常に遅いということだ。実際、

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta t^k}{k!} \frac{dx(t_n)}{dt^k} \tag{2.102}$$

であることを考えると、

$$x_{n+1} = x_n + F(x_n, t_n)\Delta t + O(\Delta t^2) \tag{2.103}$$

となり、誤差項は Δt^2 のオーダーになっている。更に、区間 $[0, t_{\mathrm{fin}}]$ を数値計算する場合、計算回数は $t_{\mathrm{fin}}/\Delta t = O(\Delta t^{-1})$ となっているため、累積する計算誤差は $O(\Delta t^1)$ の速度で収束する。

Δt^1 の速度で収束するということは、計算精度を 10 倍に上げるためには計算コストが 10 倍に増えてしまうということである。これは非常に遅く、実用には堪えない。なのでオイラー法はあくまで学習目的でのみ使用するのが良い。そこで、収束速度を上げた 4 次ルンゲクッタ法がよく使われる[10]。

2.5.2 4 次ルンゲクッタ法

それでは 4 次ルンゲクッタ法について説明する。4 次ルンゲクッタ法では次のように離散化を行う：

定義 2.5.2 (4 次ルンゲクッタ法) 時間刻み幅 Δt とするとき時刻 $t_n = n\Delta t$ とする。$x_n := x(t_n)$ とするとき、**4 次ルンゲクッタ法 (fourth-order Runge-Kutta method)** に基づく離散化とは、

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) \tag{2.104a}$$

とするものである。但し、

$$k_1 := f(x_n, t_n), \quad k_2 := f\left(x_n + \frac{\Delta t}{2}k_1, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right), \tag{2.104b}$$

$$k_3 := f\left(x_n + \frac{\Delta t}{2}k_2, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad k_4 := f\left(x_n + \Delta t k_3, t_n + \Delta t\right). \tag{2.104c}$$

このルンゲクッタ法の良いところは、誤差の収束速度が $O(\Delta t^4)$ に従う事である。つまり、Δt を 10 分の 1 にすると（つまり計算コストを 10 倍にすると）、誤差が 10^4 分の 1 になるということである。これを示すには、具体的に計算することで

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right) + O(\Delta t^5) \tag{2.105}$$

を示せばよい。計算回数は Δt^{-1} に比例するため、累積する計算誤差は $O(\Delta t^4)$ になる。

4 次ルンゲクッタ法に従った時の数値計算のコードを下記のように示す（$F(x,t) = -x$ の場合を例示する）：

```
import numpy as np

def F(x,t):
    return -x
```

[10]『よく使われる』というのは数値計算のプロが使うという意味ではない。4 次ルンゲクッタは初歩的な手法であり、本当に真面目に数値計算するときに使用することが積極的に推奨されているわけではない。どちらかというと、数値計算を専門としないユーザーであっても、4 次ルンゲクッタまでは当然知っている事が想定されているという意味である。

```python

def generate(t_fin):
    x = x_1 = 1.0
    xs = []
    N_steps = 100
    ts = np.linspace(0,t_fin,N_steps)
    dt = ts[1]-ts[0]
    for t in ts:
        xs.append(x)
        k1 = F(x,t)
        k2 = F(x+dt/2.0*k1,t+dt/2.0)
        k3 = F(x+dt/2.0*k2,t+dt/2.0)
        k4 = F(x+dt*k3,t+dt)
        x += dt/6.0*(k1+2.0*k2+2.0*k3+k4)
    return ts, np.array(xs)

ts, xs = generate(10.0)
```

練習問題

問 2.5.1 4 次ルンゲクッタ法を用いたときの 1 ステップでの計算誤差が $O(\Delta t^5)$ であること、つまり関係式 (2.105) を示せ。

問 2.5.2 章 2.2.3 の全ての練習問題に対して、4 次ルンゲクッタ法を用いて数値計算のコードを組み直し、計算結果を図示せよ。

2.5.3　より高度な方法について

適応的時間刻み幅制御アルゴリズム

ここで説明した方法は最も初等的な数値計算手法であり、これだけを知っておけば十分というわけではな全くない。必要になった時に自分で調べることを薦める。例えば、数値計算に関する名著である [3] によれば、**適応的時間刻み幅制御**の数値計算くらいは概念として知っておいた方が良い。今までの計算では時間刻み幅 Δt は常に一定であると仮定した。しかし、時間刻み幅を可変にして、時々刻々と刻み幅を最適なものに変化させることで、計算効率/計算精度を上昇させる手法がある。適応的時間刻み幅制御は、実際の研究でも必要になることがある。興味がある読者は [3, 4] 等を参照されたし。

硬い方程式と陰的解法

また、**硬い方程式 (stiff equations)** を数値計算する場合は**陰的解法 (implicit solution)** を使用した方がいい場合もある。これについても多少説明しよう。本章で説明した解析方法は

$$x_{n+1} = \mathcal{F}(x_n) \tag{2.106}$$

の形になっており、x_n を与えると直ちに x_{n+1} を計算することができた。このような解析手法を**陽的解法 (explicit solution)** という。一方で陰的解法も採用すると、例えば、

$$x_{n+1} = \mathcal{F}\left(\frac{x_n + x_{n+1}}{2}\right) \tag{2.107}$$

のように、陰的に x_{n+1} が決定するアルゴリズムを考えることも出来る。このような陰的解法を採用するメリットは一見明確ではないが、ある種の方程式においては、陽的解法では数値計算が不安定になるが、陰的解法では数値計算が安定化することが知られているため、陰的解法を採用するメリットがある。このような方程式のことを硬い方程式と呼ぶ。興味がある読者は例えば [5] 等を参照されたし。

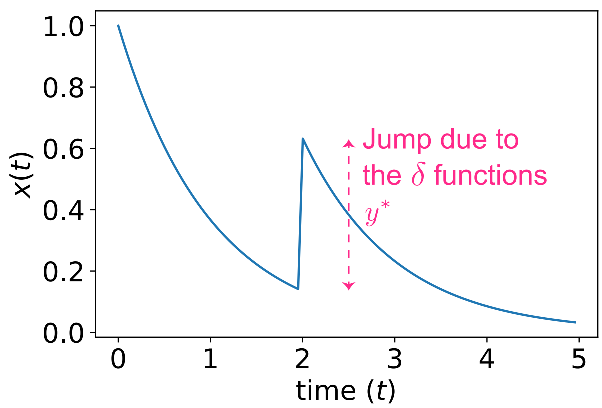

図 2.4: δ 関数に駆動される微分方程式の数値計算結果のグラフ。採用したパラメータは $x_0 = 1$, $\tau = 1$, $t^* = 2$, $y^* = 1/2$.

2.6 δ 関数と常微分方程式

最後に、δ 関数を含む常微分方程式の解法について触れる。例えば次のような微分方程式を考えよう：

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{x(t)}{\tau} + y^*\delta(t - t^*), \quad x(0) = x_0. \tag{2.108}$$

但し、x_0、τ、y^*、t^* は正の定数。とする。この方程式の解は次のように与えられる。まず区間 $t \in [0, t^*)$ を考えよう。この区間では

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{x(t)}{\tau} \tag{2.109}$$

が成立するため解は

$$x(t) = x_0 e^{-t/\tau} \quad (t \in [0, t^*)) \tag{2.110}$$

で与えられる。また、区間 $t \in (t^*, \infty)$ での解も

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{x(t)}{\tau} \quad \Longrightarrow \quad x(t) = Ce^{-t/\tau} \quad (t \in (t^*, \infty)) \tag{2.111}$$

となる。但し、C は適当な定数。ここまでは異論がないであろう。

では、不連続点 $t = t^*$ をまたぐ時に解はどのように変化するであろうか？これを理解するためには、$h > 0$ を微小な数とした上で式 (2.108) の両辺を区間 $(t^* - h, t^* + h)$ で積分すればよい。つまり、

$$\int_{t^*-h}^{t^*+h} dt \frac{dx(t)}{dt} = \int_{t^*-h}^{t^*+h} dt \left[-\frac{x(t)}{\tau} + y^*\delta(t - t^*) \right] \quad \Longrightarrow \quad x(t^* + h) - x(t^* - h) = y^* + O(h). \tag{2.112}$$

よって、$h \downarrow 0$ の極限を取ることで解の接続条件

$$\lim_{h\downarrow 0} x(t^* + h) = \lim_{h\downarrow 0} x(t^* - h) + y^* \tag{2.113}$$

が得られる（図 (2.4) を見よ）。以上の結果から、

$$x(t) = \begin{cases} x_0 e^{-t/\tau} & (t \in [0, t^*)) \\ (y^* + x_0 e^{-t^*/\tau}) e^{-(t-t^*)/\tau} & (t \in (t^*, \infty)) \end{cases} \tag{2.114}$$

が得られる。このように、δ 関数を用いることで、劇力によって軌道に不連続性（ジャンプ）が生じる様子をモデル化することができる。

Chapter 3

偏微分方程式

この章では偏微分方程式について簡単に説明する。本章の説明は本当に最小限であり、偏微分方程式に習熟したい物は演習書 [1] を黙々と熟すことを薦める。

3.1　偏微分方程式の目的：関数の予測モデルを構築する

ここまでで常微分方程式の理解を深めた。常微分方程式では変数の時間発展をモデル化した。即ち、例えば 1 次元系を考えると、目標となる変数 $x(t)$ があったとして、その将来時刻の予測モデル：

$$\mathcal{P}_t : x(0) \longmapsto x(t) \tag{3.1}$$

をモデル化するにあたって、常微分方程式を考えた。例えば、

$$\frac{dx(t)}{dt} = F(x(t), t) \tag{3.2}$$

などである。

では、次のような問題設定はある種の拡張として自然ではないだろうか？**関数の時間発展についての予測モデルはどう構成するべきだろうか？**たとえば、予測したい関数を $f_t(x)$ と書くとき、

$$\mathcal{P}_t : \underbrace{f_0(x)}_{\text{初期状態}} \longmapsto \underbrace{f_t(x)}_{\text{未来の状態}} \tag{3.3}$$

をモデル化するためのマップ $\mathcal{P}_t$ を構成するということだ。

3.1.1　具体的な動機の例：株価の予測モデル

たとえば、変数 $x(t)$ を株価としたとき、その確率分布を $P_t(x)$ を予測するモデルを考えてみよう。確率分布は時々刻々と変化していくはずである。現時点での株価は x_0 だとしよう。この場合、確率分布は δ 関数を用いて表すことができ、

$$P_0(x) = \delta(x - x_0) \tag{3.4}$$

である。今の目標は時刻 $t > 0$ における確率分布 $P_t(x)$ を予測することである。つまり、

$$\mathcal{P}_t : P_0(x) = \delta(x - x_0) \longmapsto P_t(x) \tag{3.5}$$

となる写像 $\mathcal{P}_t$ が構成できれば、確率分布の予測モデルとして話が成立するだろう。

ここでは直観的な例として確率分布 $P_t(x)$ を考えたが、確率分布は関数の一種であり、確率分布に限らず一般的に関数の時間発展/予測モデルを考えることは自然であろう。よって、以下では一般に関数の時間発展/予測モデルを考えていく。

3.2 偏微分方程式の例 1：自明な例題

では、この写像 $\mathcal{P}_t$ をどうやって構成するのが良いだろうか？一つの手法は、**偏微分方程式 (partial differential equation, PDE)** を用いることである。偏微分方程式の初等的なアイディアは、常微分方程式と同様に関数の時間微分の関係式を作ることである。最も簡単な例であれば

$$\frac{\partial f_t(x)}{\partial t} = -k(x)f_t(x) \tag{3.6}$$

などであろうか？但し、$k(x)$ は既知関数とする。ここで $f_t(x)$ は t と x の 2 変数関数であるため、t についての微分は**偏微分 (partial derivative)** になる。離散化した時のイメージとしては

$$f_{t+dt}(x) = f_t(x) - k(x)f_t(x)dt \tag{3.7}$$

となるであろうか？確かに $f_t(x)$ が分かれば次の時間ステップにおける $f_{t+dt}(x)$ が決定されるため、未来の時刻における $f_t(x)$ を決定することができるであろう。またこの例は殆ど常微分方程式と変わらない程度の変更しか施していないので、解は常微分方程式と同様に求まる：

$$\frac{\partial \log f_t(x)}{\partial t} = -k(x) \quad \Longrightarrow \quad \log f_t(x) = -k(x)t + c(x) \tag{3.8}$$

である。但し、$c(x)$ は x についての任意関数である。よって解は

$$f_t(x) = e^{c(x)-k(x)t} \tag{3.9}$$

となるであろう。任意関数 $c(x)$ は初期条件によって決定される。つまり、$f_0(x)$ が与えられていると仮定して、

$$f_0(x) = e^{c(x)} \tag{3.10}$$

であるから、初期条件を固定した時の解は

$$f_t(x) = f_0(x)e^{-k(x)t} \tag{3.11}$$

となる。このように、偏微分方程式の解には初期条件 $f_0(x)$ で決定される任意関数 $c(x)$ が入ってくることが一般的であり、一つの特徴となっている。

3.3 偏微分方程式の例 2：拡散方程式

例 1 は非常に自明な例であり、殆ど常微分方程式との差が見えないモデルであった。次に、代表的な偏微分方程式として**拡散方程式 (diffusion equation)** を扱う。拡散方程式はブラウン運動のモデルに使われる方程式であり、物理学・化学・生物学・金融工学・統計学などの様々な分野で現れる。

拡散方程式は次の式で与えられる偏微分方程式である：

$$\frac{\partial f_t(x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}f_t(x). \tag{3.12}$$

但し、$D > 0$ は正の定数とする。この方程式には時間に関する偏微分 $\partial/\partial t$ と x に関する偏微分 $\partial/\partial x$ の両方が関わっているため、常微分方程式との差が本質的に現れてくる。

3.3.1 数値計算のための素朴な離散化方法

拡散方程式が $f_t(x)$ の予測モデルとして機能する事に対する直観についてである。基本的には離散化して考えるのがわかりやすいと筆者は考える[1]。つまり、時間に関するオイラー法を前提にすると

$$f_{t+dt}(x) \simeq f_t(x) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}f_t(x)dt \tag{3.13}$$

[1]偏微分方程式の数値計算は非常にむずかしいので、ここで説明する離散化法は実用目的ではなく教育目的のものである。

によって有限の刻み幅 dt 毎に時間発展させることが出来る。

また、空間微分 $\partial/\partial x$ についても数値微分を使うことが普通である。例えば最も素朴には、刻み幅 $h>0$ を導入して空間についても離散化を行うと、

$$f_{t+dt}(x) \simeq f_t(x) + D\frac{f_t(x+h) - 2f_t(x) + f_t(x-h)}{h^2}dt \tag{3.14}$$

と近似すれば、$g_t^{(i)} := f_t(x_i)$ を導入して（$x_i := hi$, i は整数)、

$$g_{t+dt}^{(i)} \simeq g_t^{(i)} + D\frac{g_t^{(i+1)} - 2g_t^{(i)} + g_t^{(i-1)}}{h^2}dt \tag{3.15}$$

と置けば $\{g_t^{(i)}\}_i$ についての時間発展方程式が構築でき、原理的には dt と h を十分小さく設定することで数値計算が出来るだろう。実際に数値計算する場合は色々な工夫を行うことが偏微分方程式については薦められる[2]が、原理的にはこのようなイメージをもって式に対する直観を発展させるのが良い。

3.3.2 フーリエ変換

次に拡散方程式を厳密に解くことを考えよう。そのためには**フーリエ変換 (Fourier transformation)** を用いる。フーリエ変換 $\mathcal{F}$ とは関数 $f(x)$ を次のように積分変換する手法である：

$$\tilde{f}(k) = \mathcal{F}\left[\{f(x)\}_x\right] := \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x). \tag{3.16}$$

このフーリエ変換の逆変換 $\mathcal{F}^{-1}$ は次のようになる：

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1}\left[\{\tilde{f}(k)\}_k\right] := \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \tilde{f}(k). \tag{3.17}$$

いくつか例を出す：

- δ 関数のフーリエ変換：この定義に従うと δ 関数 $\delta(x-x_0)$ のフーリエ変換は次のようになる：

$$\mathcal{F}\left[\{\delta(x-x_0)\}_x\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx}\delta(x-x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx_0}. \tag{3.18}$$

- 正規分布のフーリエ変換：正規分布 $e^{-x^2}/\sqrt{2\pi}$ の変換は

$$\mathcal{F}\left[\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}\right\}_x\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2-ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-k^2/2}. \tag{3.19}$$

- 指数分布のフーリエ変換：指数分布 $e^{-|x|}/2$ の変換は

$$\mathcal{F}\left[\left\{\frac{1}{2}e^{-|x|}\right\}_x\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{2}e^{-|x|-ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{k^2+1}. \tag{3.20}$$

この手の積分計算を全て自分の手で実行する必要はない。例えば、岩波数学公式集を参照したり、Mathematica で調べると簡単に出てくるので、現代となってはそれを利用するのが良い。もし計算結果を自力で導出したい場合（例えば正規分布のフーリエ変換の結果を自分の手で得たい場合）は、複素関数論を学ぶのがよい[3]。コーシーの積分定理や留数定理は教養として知っておくと良いと思われる。

[2]偏微分方程式の数値計算は非常に不安定になりやすいので、歴史的にも様々な工夫が導入されて来た。筆者は数値計算の専門家ではないため、それらについては専門書を参照されたし。

[3]例えば筆者は高橋礼司の複素解析の本 [6] を学部時代に読んだ。計算練習を行いたい場合は [1] を熟すのが良い。あと、アールフォルスの書籍 [7] も定評がある。

3.3.3 厳密解

ではフーリエ変換を用いて拡散方程式 (3.12) の厳密解を導出しよう。但し無限遠の境界条件として

$$\lim_{x\to\pm\infty} f_t(x) = 0 \tag{3.21}$$

を仮定する。では、まず $f_t(x)$ のフーリエ変換表示を $\tilde{f}(k)$ と書く：

$$\tilde{f}_t(k) := \mathcal{F}\left[\{f_t(x)\}_x\right] := \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f_t(x). \tag{3.22}$$

そこで拡散方程式 (3.12) の両辺をフーリエ変換しよう。左辺のフーリエ変換は

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial f_t(x)}{\partial t} e^{-ikx} = \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx f_t(x) e^{-ikx} = \frac{\partial}{\partial t}\tilde{f}_t(k) \tag{3.23}$$

である。また右辺のフーリエ変換は

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} D\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_t(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\left[e^{-ikx} D\frac{\partial}{\partial x} f_t(x)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x}\left(e^{-ikx}\right) D\frac{\partial}{\partial x} f_t(x)\right\} \\
&= \frac{ik}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} D\frac{\partial}{\partial x} f_t(x) \\
&= \frac{ik}{\sqrt{2\pi}}\left\{\left[e^{-ikx} D f_t(x)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx D f_t(x) \frac{\partial}{\partial x} e^{-ikx}\right\} \\
&= \frac{-Dk^2}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f_t(x) \\
&= -Dk^2 \tilde{f}_t(k)
\end{aligned} \tag{3.24}$$

となる。よって、

$$\frac{\partial \tilde{f}_t(k)}{\partial t} = -Dk^2 \tilde{f}_t(k) \tag{3.25}$$

を得る。この方程式の解は

$$\tilde{f}_t(k) = \tilde{f}_0(k) e^{-Dk^2 t} \tag{3.26}$$

である。初期条件 $f_0(x) = \delta(x - x_0)$ から

$$\tilde{f}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0} \tag{3.27}$$

が得られる。よって、

$$\tilde{f}_t(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0 - Dk^2 t} \tag{3.28}$$

を得る。この結果を逆フーリエ変換すると

$$f_t(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x_0) - Dk^2 t} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-x_0)^2/(4Dt)} \tag{3.29}$$

を得る。つまり、拡散方程式に従うと確率分布がガウス分布に従って徐々に位置が『拡散』していくことがわかる：

$$\mathcal{P}_t : f_0(x) = \delta(x - x_0) \longmapsto f_t(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-x_0)^2/(4Dt)}. \tag{3.30}$$

3.4 偏微分方程式の例３：スモルコフスキー方程式

次に定常厳密解が得られるスモルコフスキー方程式 (Smoluchowski equation) を扱おう。スモルコフスキー方程式は次の式で与えられる[4]：

$$\frac{\partial f_t(x)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{\left[F(x) + \frac{\partial}{\partial x}\right] f_t(x)\right\}. \tag{3.31}$$

但し、$F(x) > 0$ は適当な非負関数とする。この方程式を

$$\lim_{x\to\pm\infty} f_t(x) = 0 \tag{3.32}$$

という境界条件の下で定常厳密解を導出しよう。定常状態とは

$$\lim_{t\to\infty} f_t(x) = f_{\mathrm{ss}}(x) \tag{3.33}$$

で定義される。定常状態では

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\partial f_t(x)}{\partial t} = \frac{\partial f_{\mathrm{ss}}(x)}{\partial t} = 0 \tag{3.34}$$

を充たす。よって、定常解 $f_{\mathrm{ss}}(x)$ は

$$\frac{d}{dx}\left[F(x) + \frac{d}{dx}\right] f_{\mathrm{ss}}(x) = 0 \tag{3.35}$$

を充たす。つまり、偏微分方程式は定常状態では常微分方程式になる。ここで両辺を積分すると、

$$F(x)f_{\mathrm{ss}}(x) + \frac{d}{dx}f_{\mathrm{ss}}(x) = C_1 \tag{3.36}$$

である。但し、C_1 は積分定数。ここで境界条件 (3.32) を用いると、

$$\lim_{x\to\pm\infty}\left[F(x)f_{\mathrm{ss}}(x) + \frac{d}{dx}f_{\mathrm{ss}}(x)\right] = 0 \tag{3.37}$$

より、$C_1 = 0$ となる。つまり、

$$F(x)f_{\mathrm{ss}}(x) + \frac{d}{dx}f_{\mathrm{ss}}(x) = 0$$

$$\Longleftrightarrow \frac{d}{dx}\log f_{\mathrm{ss}}(x) = -F(x) \tag{3.38}$$

$$\Longleftrightarrow \log f_{\mathrm{ss}}(x) = C_2 - \int F(x)dx \tag{3.39}$$

$$\Longleftrightarrow f_{\mathrm{ss}}(x) = C_2' \exp\left[-\int F(x)dx\right] \tag{3.40}$$

となる。但し C_2 と $C_2' := \exp(C_2)$ は積分定数。例えば、$F(x) = x$ の場合は

$$f_{\mathrm{ss}}(x) = C_2' e^{-x^2/2} \tag{3.41}$$

が解となり、分散が定数の正規分布である。このように、偏微分方程式を用いることで、様々な関数の時間発展に関わる予測モデルを構築できる。

[4] この方程式は Ornstein-Uhlenbeck 過程と言う代表的な確率過程に対応する Fokker-Planck 方程式であり、とても有名である。

Bibliography

[1] 後藤 憲一、山本 邦夫、神吉 健、詳解物理応用数学演習（共立出版、1979）

[2] G.B. Arfken, H.-J. Weber, and F.E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide, 7th edn.* (Academic Press, San Diego, 2012)

[3] 伊理 正夫、藤野 和建、数値計算の常識（共立出版、1985 年）

[4] E. ハイラー、G. ヴァンナー、常微分方程式の数値解法 I、基礎編（シュプリンガージャパン、2007 年）

[5] E. ハイラー、G. ヴァンナー、常微分方程式の数値解法 II、発展編（シュプリンガージャパン、2008 年）

[6] 高橋礼司、基礎数学 8 複素関数（東京大学出版会、2006）

[7] L.V. アールフォルス、複素解析（現代数学社、1982）