12.14/2012　学修相談実施報告

来室学生

三回生　　男子　一名

計一名

質問内容

化学数学の課題であるが、以下の関数の重積分の仕方がわからないので教えてほしい。

$$\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-a\left(x^2+y^2\right)}dxdy$$

計算には極座標とヤコービアンを用いるらしいが。

回答内容

物理化学でよく用いる積分（式(1)の左辺）の値を求める方法の一つで、以下のように考えればよい。式(1)の求める値を A とおくと、

$$\int_0^\infty e^{-ax^2}dx = A \quad \left(=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) \qquad (1)$$

式（１）の２乗は式(2)のように表わすことができる。

$$\left(\int_0^\infty e^{-ax^2}dx\right)\times\left(\int_0^\infty e^{-ax^2}dx\right)=\left(\int_0^\infty e^{-ax^2}dx\right)\times\left(\int_0^\infty e^{-ay^2}dy\right)=A^2 \qquad (2)$$

一方、括弧内の積分をそれぞれ　$e^{-ax^2}dx$、$e^{-ay^2}dy$　和と考えると、式(2)は和の各項の積

$e^{-ax^2}dx\times e^{-ay^2}dy$ を求めてから和（積分）を求めても同じ結果になるので、

$$\left(\int_0^\infty e^{-ax^2}dx\right)\times\left(\int_0^\infty e^{-ax^2}dx\right)=\int_{x,y=0}^{x,y=\infty}\left(e^{-ax^2}dx\cdot e^{-ay^2}dy\right)=\int_{x,y=0}^{x,y=\infty}\left(e^{-ax^2}\cdot e^{-ay^2}dxdy\right)$$

$$=\int_{x,y=0}^{x,y=\infty}\left(e^{-ax^2-ay^2}dxdy\right)=\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-a\left(x^2+y^2\right)}dxdy=A^2 \qquad (3)$$

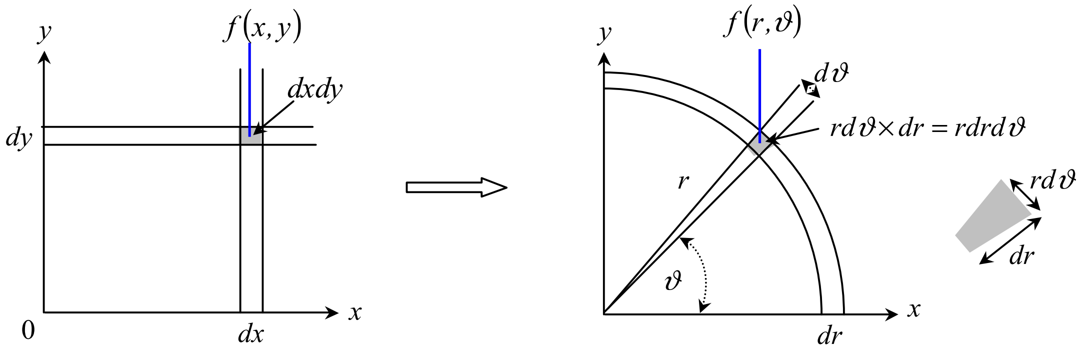
つまり式(1)の値は重積分式(3)の値の平方根であることがわかる。

式(3)の積分は被積分関数の形から、変数を極座標に変換すればよいことが予想される。実際 $x=r\,cos\,\vartheta$、$y=r\,sin\,\vartheta$ として x,y から r,ϑ へ座標変換すれば式(3)の積分は式(4)のように書くことができる。

$$\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-a\left(x^2+y^2\right)}dxdy=\int_0^\infty\int_0^{\pi/2} e^{-ar^2}rdrd\vartheta \qquad (4)$$

ここで、変数変換に伴う積分領域の変化に注意しなければならない（ϑは$[0,2\pi]$ではなく$[0,\pi/2]$）。

ヤコービアンについては知らないようだったので、それには特に触れずに下図を描いて面積素片と積分領域の説明をした。



式(4)の積分を実行すると式(5)の値が得られる。

$$\int_0^\infty\int_0^{\pi/2} e^{-ar^2}rdrd\vartheta=\frac{\pi}{2}\int_0^\infty e^{-ar^2}rdr=\frac{\pi}{2}\int_0^\infty -\frac{1}{2a}\left(e^{-ar^2}\right)'dr=-\frac{\pi}{4a}\left[e^{-ar^2}\right]_0^\infty=\frac{\pi}{4a} \qquad (5)$$

したがって求める式(1)の値 A は$\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{\pi}{a}}$となる。

物理化学でよく出会う下の積分は

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax^2}dx$$

$\int_0^\infty e^{-ax^2}dx$ 、 $\int_0^\infty xe^{-ax^2}dx$ の値を知っていれば簡単に自分で計算できる、と回答した。（実際の計算過程では、もっともたもたしたので学生には返ってよく分かったかもしれない。）

このほか就職面接や大学院進学のことなど、ごく一般論として雑談した。

以上