拡散現象の数理

川 上 竜 樹 Tatsuki KAWAKAMI

理工学部数理情報学科 准教授

Associate professor, Department of Applied Mathematics and Informatics



1. はじめに

2017年4月に数理情報学科に着任した川上竜樹です.専門は非線形偏微分方程式の漸近解析です.本稿では私の研究分野について簡単に紹介させていただきます.分野の特性上,綺麗な図や模式図等が少ないことを予めお詫びいたします.

2. 反応拡散方程式

"各点での熱流は温度勾配に比例する". これはフーリエの法則として知られている熱の流入・流出の最も基本となる法則である. 簡単に述べると, 周囲に比べて温度の高いところは時間とともに温度が低下し, 逆に温度の低いところは熱が流れ込んで温度が上昇するということである. このように, 熱伝導によって温度分布が変化していく現象を熱拡散現象という. 熱伝導以外にも拡散現象は日常生活の中にも多く潜んでおり, 例えばコーヒーにミルクを入れると模様を作りがなら溶けていく(液体中の化学物質の拡散), 研究室でカップ麺を食べると匂いが充満する(空気中の化学物質の拡散), お酒を飲み過ぎた後, ふらつきながら家に帰ろうとするといつもより時間がかかる or 帰れない (ブラウン運動, 酔歩ともいう) などである.

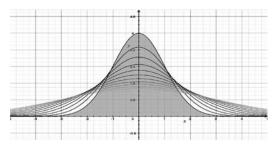
上記のような拡散現象を数理モデルとして考察する場合に現れるのが拡散方程式(熱方程式ともいう)である。理論としては上記のフーリエの法則と、"密度変化は各部分における流入と流出によって生じる"という連続の式から導出され、時刻tにおける 3 次元空間の点 $x=(x_1,x_2,x_3)$ での温度u をu=u(x,t) とすると、

$$u_t(x,t) = \Delta u(x,t)$$

と表される. ここで u_t は u の時間微分, Δ は 3 次元空間のラプラシアン(それぞれの空間変数に対する 2 階微分の和)である. (数学嫌いの方々は既に本稿を読み飛ばそうとしているかと思うが、もう少しお付き合いいただきたい.) 説明を簡単にするためにここからは空間次元は 1 次元として考える. すなわち

$$u_t = u_{xx} \tag{1}$$

である. ここで u がある点で最大値を取ったと仮定しよう. このとき,最大点では関数は上に凸,つまり $u_{xx} \leq 0$ なので, (1) から次の瞬間に u は減少するか同じ値になる. 同様に最小値を取った点では



拡散方程式の解の時間変化

関数は下に凸になるので、次の瞬間にu は増加するか同じ値になる。この様に拡散方程式を満たす関数 (温度) は平均化されていくことがわかる。一般に無限に長い針金の上で(1)を考察した場合、解u は時間無限大で0 に収束する。

一方、実際の拡散現象には様々な外力や自己(もしくは相互)からの影響が現れる。例えば、お昼の時間に食堂で食べるか、生協で購入するか、コンビニで購入するかは一様に散らばる(拡散する)だけでなく、その日の天気(外力)、それぞれの混み具合(相互効果)やその時に食べたいもの(趣向に関する走化性)に依存する。(もちろん財布の中身にもよるが….)これらの多くは反応項と呼ばれるもので表現され、先ほどの拡散方程式(1)に反応項f(u)を加えた

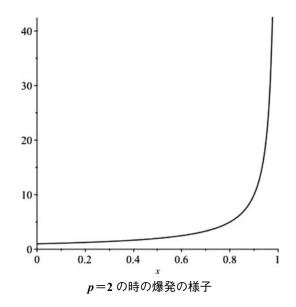
$$u_t = u_{xx} + f(u) \tag{2}$$

でモデル化される.これを反応拡散方程式という.これらの反応項 f(u) の多くは非線形項として表現される.様々な数理モデルやそれぞれの反応項については例えば参考文献 $1)\sim3$)を参照いただきたい.では、反応拡散方程式 (2) に関する研究とはどのようなものがあるのだろうか.

3. 爆発現象と臨界指数

ここでは最も単純な非線形性として自身の冪乗で 増加する反応項

$$f(u) = u^p, \quad p > 1 \tag{3}$$



の場合を考える. 関数 u(x,t) が空間的に一様、つまり u(x,t) = v(t) の場合、 $v_{xx} = 0$ となるので、(2) は次の常微分方程式

$$v_t = v^p$$

となる. これは変数分離形の1階常微分方程式であるので、解を具体的に求めることができ、初期値v(0) = 1とすると

$$v(t) = \left\{1 - (p-1)t\right\}^{-\frac{1}{p-1}}$$

となる. これは有限時刻 T=1/(p-1) で $v(T)=+\infty$ となることがわかる. これを解の爆発という. この爆発現象は明らかに関数 (温度) を平均化するという拡散方程式の作用とは相反する. では (3) のような反応項を持った反応拡散方程式 (2), つまり

$$u_t = u_{xx} + u^p \tag{4}$$

(これを半線形熱方程式という)を無限に長い針金の上で考えた場合,解 u は

①0に収束する.(拡散が支配的)

- ②有限時間で爆発する. (反応項が支配的)
- ③それ以外の挙動をする. (両方のバランス) のどれになるであろうか. これは (4) に対する最も基本的かつ重要な問題として古くから研究されており、1966年の藤田宏先生の研究4)に端を発するものである. 詳細は省くが初期温度が恒等的に 0 でないとき
 - 1) $p \le 3$ のとき、どんな初期温度でも必ず有限時間で爆発する。
 - 2) p>3 のとき、初期温度の状況により有限時間で爆発する場合と 0 に収束する場合の両方が起こる.

ことが示されている. この臨界指数 (p=3) は藤田指数と呼ばれている. また, それぞれの場合について, その形状や速さについても盛んに研究されている. 詳しくは参考文献 5) を参照いただきたい. ここでは, 著者の研究としては解の高次漸近展開理論を構築した参考文献 6) を挙げるに留める. 上記のような臨界指数は他にもいくつか知られており, 拡散と非線形のバランスや方程式に内在する構造, また考える領域の形状から現れる. そのため, 様々な反応項に対して現在も精力的に研究が続いている.

4. 境界からの影響

上記の話題は主に無限に長い針金や平面全体もしくは3次元空間全体(全空間という)をイメージしたものである。一方で、実際の化学物質の反応実験や部屋での熱の動きは限られた空間(有界領域)やそれを顕微鏡で拡大した領域(半空間など)で観察され、モデル化される。この場合は先ほどと違い、考える空間に縁(境界)が存在するため、縁での状況(境界条件)を考える必要がある。例えば有限の長さの針金の両端を氷等で冷やして温度を固定したもの(ディリクレ境界条件 or 第1種境界条件)や、保温瓶のように外部との熱のやり取りをなくしたもの(ノイマン境界条件 or 第2種境界条件)、もしくはその両方が合わさったもの(ロバン境界条件 or 第3種境界条件)等が代表的なものである。また硫

化鉄の実験のように縁からの熱により自己生成的に 反応が進んでいくようなものや、より積極的に境界 上での反応を考慮したもの、縁の表面での拡散を考 慮したものなども近年では考察されてきている。著 者も半空間という最も単純な境界のある非有界領域 について、境界からの流入量が自身の温度に依存す るような次の場合

 $\partial_{\nu}u = u^{p}$ (非線形境界条件), $u_{t} + \partial_{\nu}u = u^{p}$ (動的境界条件)

についてそれぞれ藤田指数と解が 0 に収束する場合の形状と速さを求めた^{7).8)}. ここで ∂_ν は法線方向微分である. このように,領域の内部における拡散現象に留まらず,境界からの影響を考慮した拡散現象が近年盛んに研究されている. 特に,工学などからの要請もあり,境界上での反応を考慮した動的境界条件が世界中で盛んに研究されている. この動的境界条件については領域が有界な場合については古くは1990年代から精力的に研究されてきているが,非有界領域の場合はこれまでほとんど研究成果がなく,多くの未解決問題が残っているとともに,今後の進展が期待されている.

5. 異常拡散

これまで述べてきた拡散は、物質の粒子の平均二乗変位が経過時間 t に関して線形に増大するいわゆる "通常の拡散" である.これと異なり,非線形に増大する,すなわち, $t^{\alpha}(\alpha \neq 1)$ に比例する現象が知られており,異常拡散と呼ばれている.特に $\alpha > 1$ の場合を優拡散, $0 < \alpha < 1$ の場合を劣拡散と呼び,乱気流や金融市場,アモルファス(半晶体)半導体や有機 EL 素材における電荷移動,軽石やスポンジなどの多孔質媒質における拡散,あるいは高分子の緩和現象などが知られている.この異常拡散に付随する微分方程式としては

- (i)多孔質媒質方程式 $u_t = \Delta u^m (m > 1)$
- (ii)空間微分に関して分数冪微分作用素を含む放

物型方程式

(iii)時間微分に関して非整数階微分を含む微分方 程式

などが挙げられる. (i) の多孔質媒質方程式は、先 に挙げたフーリエの法則の代わりに、温度勾配の係 数(拡散係数)として自身の量を考慮したダルシー の法則を用いることで得られる. 多孔質媒質方程式 は見かけの単純さに反して. 方程式自身が非線形性 を有しており、(1) のような拡散方程式と大きく異 なる性質を有している. 例えば、拡散方程式の解は 無限伝播性(目の前でライターの火を灯すと、アン ドロメダ星雲にある星の温度が微少であるが変化す る!!)を有するのに対して、多孔質媒質方程式の 解は有限伝播性という性質を持っている。これは感 覚的には非常に現実に即しているように思われる. 余談であるが、著者が修士の頃、助教の方に同じこ とを意見した. その時は、"神ならぬあなたが、東 京湾に一粒落とした塩が、次の瞬間にカリフォルニ ア海岸の塩分濃度を全く上昇させないとなぜ言い切 れるのか"と言われた、著書の修士論文はこの多孔 質媒質方程式を扱ったものであったので、"物理現 象と数学の理論は違う"ということを伝えてくれよ うとしたのだと理解しているが、かなり衝撃的であ ったのを覚えている、話を元に戻すが、このように 解の性質の違いからも、数学的な取り扱いが大きく 異なり、非常に豊かな構造を含んでいることから多 くの研究が行われてきた9). 一方で、非線形項を含 んだ問題を考えた場合、方程式と反応項の両方の非 線形性の影響により、拡散方程式に対して非常に有 効な解析手法が適用できず、多くの未解決問題が起 こされている. また、金融市場や生物個体の空間移 動における異常拡散、特に飛躍型マルコフ過程と呼 ばれる確率過程によって記述される異常拡散の離散 モデルの連続極限として現れる分数冪微分作用素 や、高分子溶液のような不均質媒体中での拡散や土 壌中での汚染物質の拡散などの数理モデルとして現 れる非整数階の時間微分を含んだ微分方程式は近年 非常に注目を浴びている. また, 分数冪微分作用素 については先に挙げた動的境界条件との関連も指摘され¹⁰⁾,ますますその研究の進展が期待されている。著者もこれらの話題についていくつか研究を行なっている^{11),12)}が、その扱いの困難さからも非常に多くの課題が残されている。特に、非整数階の時間微分を含む問題に関しては、数学的な基礎理論すら整備されていない状況であり、これからの研究の担う役割は非常に大きいと言える。

6. おわりに

この様に、身近な現象を元にモデル化・簡単化された問題についてもまだまだ多くの未解決問題が残されている。近年では非常に優秀な計算機や数値計算の理論が急速に発展してきており、多くの未解決問題への強力なアプローチの一つとして注目を増している。いつか(そう遠くない未来?)AIによって、未解決問題に対して完璧な証明が与えられる日が来てしまうかもしれない。そんな日が来るまでは、紙とペンで数学の思考を楽しんでいきたいと思います。

参考文献

- 1) 柳田英二, 爆発と凝集 (非線形・非平衡現象の数理), 東京大学出版会, 2006.
- 2) 柳田英二, 反応拡散方程式, 東京大学出版会, 2015.
- 3) 二宮広和, 侵入・伝播と拡散方程式, 共立出版, 2014.
- 4) H. Fujita, On the blowing up of solutions of the Cauchy problem for $u_t = u + u^{1+\alpha}$, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. I, 13 (1966) 109-124.
- P. Quittner and P. Souplet, Superlinear Parabolic Problems: Blow-up, Global Existence and Steady States, Birkhuser Verlag, Basel, 2007.
- 6) K. Ishige and T. Kawakami, Refined asymptotic profiles for a semilinear heat equation, Math. Ann., 353 (2012)
- T. Kawakami, Global existence of solutions for the heat equation with a nonlinear boundary condition, J. Math. Anal. Appl., 368 (2010) 320-329.
- 8) M. Fila, K. Ishige and T. Kawakami, Large time behavior of solutions of a semilinear elliptic equation with a dynami-

- cal boundary condition, Adv. Differential Equations, 18 (2013) 69-100.
- 9) J. L. Vazquez, Porous Medium Equation. Mathematical Theory, Oxford University Press, Oxford, 2006.
- L. Caffarelli and L. Silvestre, An extension problem related to the fractional Laplacian, Comm. Partial Differential Equations, 32 (2007) 1245-1260.
- 11) T. Iwabuchi and T. Kawakami, Existence of maild solutions for a Hamilton-Jacobi equation with critical fractional viscosity in the Besov spaces, J. Math. Pures Appl. (9), 107 (2017) 464-489.
- 12) K. Ishige, T. Kawakami and H. Michihisa, Asymptotic expansions of solutions of fractional diffusion equations, SIAM J. Math. Anal., 49 (2017) 2167-2190.