自然や生き物が作り出す形と数学

大阪公立大学大学院理学研究科
物部　治徳

1　はじめに

本稿は，2024 年度年会市民講演会（2024 年 3 月 16 日，大阪公立大学）の記録になります．一般の方々に興味を持っていただくために，粒子の動きや熱伝導に関連する「拡散現象」をテーマに，関連する研究の話を紹介させていただきました．専門用語はなるべく避けようと心掛けたつもりですが，数式がところどころ出てきます．ご容赦いただければ幸いです．

「拡散現象」とは，場所によって異なる濃度を持つ物質が，空間一様になろうと広がっていく現象などを示します．例えば，水の入ったコップの中に墨汁などをたらすと，時間が経つにつれて全体に広がっていく様子などに見られます．熱した鉄（フライパンなど）も時間が経つと均一の温度になろうとする様子も同様です．このように，拡散現象というのは自然界の秩序を理解する上で，重要なテーマであることが期待できます．

拡散現象の中で代表的なものとして，「ブラウン運動」というものがあります．実は，この運動の発見は「植物学」という，一見，粒子の動きとは関係性が無いような分野の実験がきっかけとなります．1800 年代にロバート・ブラウン（植物学者）が，花粉を水の中に入れて顕微鏡で観察していたところ，花粉からでた微粒子が不規則に動いていることに気づきました．その後，1900 年初頭，アルベルト・アインシュタイン（物理学者）によって，微粒子の不規則な運動は，周りの分子の運動が原因であることが理論的に示されました．その後，ジャン・ペラン（物理学者）が精密な実験を行い，アインシュタインの理論の正しさを実証しました．これをきっかけに，原子，分子の存在が世間で受けいれられるようになっていきました．

2　ランダムウォーク

それでは，拡散現象を数式で表すには，どのように考えればいいでしょうか？ 一旦，粒子が次のような条件で動く場合を考えてみましょう．

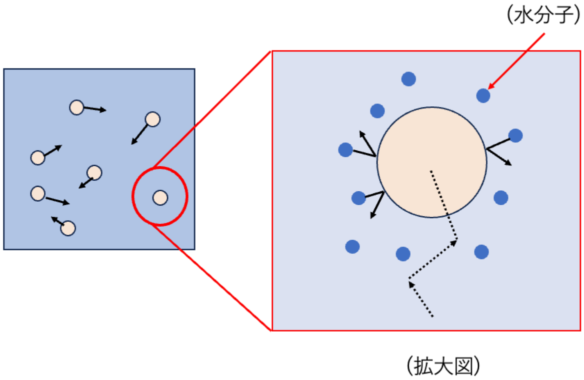

図 1: コロイド粒子の不規則な動きは，周りの水分子の動きが原因になる

- 粒子 P は直線上にある整数の点のみを移動する．原点 0 を最初の位置とする．
- 1 秒経過するごとに，粒子は 1/2 の確率で $+1$，同じく 1/2 の確率で -1 移動する．

このような動きを，ランダムウォーク（または酔歩）と言います（図 2）．例えば，この操作

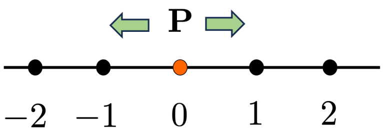

図 2: ランダムウォークのイメージ

を 100 回繰り返したとしましょう．すると，数値計算の結果から図 3 のようなグラフを得ることができます．ここで，横軸は時間の経過を表し，縦軸は粒子の場所を表しています (なお，見やすくするために，隣り合う点を直線で繋いでいます)．グラフを見ると，粒子の位置は 40 秒あたりまで増減しながらも段々と大きくなり，その後は，増減しながらも再び原点 0 を通過して，徐々に減っていくことが確認できます．当然，確率 1/2 で左右に移動しているので，粒子を再び原点 0 に戻して同じ操作をしたとしても異なるグラフが現れます．同じ操作をしても，異なるグラフが出現するので，一見，規則性がないように見えます．

そこで，視点を少し変えます．今度は粒子をたくさん用意してこの実験を行うことにします．ただし，スタート地点は全て原点 0 とします．例えば，粒子を 2000 個用意して同じ実験を行い，それぞれの粒子が描く軌道を重ね合わせると図 4 のようなグラフを得ることができます．すると，原点付近から徐々に上下に広がる，放物線のような形がうっすらと確認できると思います．更に，時間ステップごとの分布を調べてみます．適当な時間ステッ

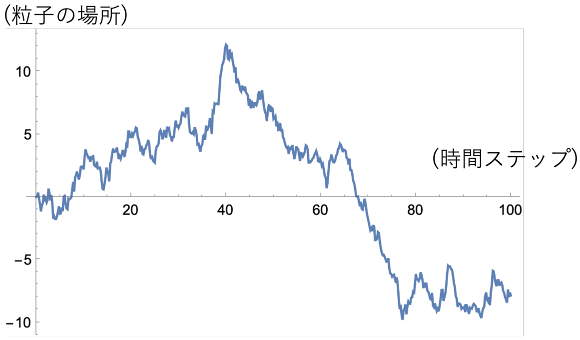

図 3: 100 秒経過する間の粒子の動き

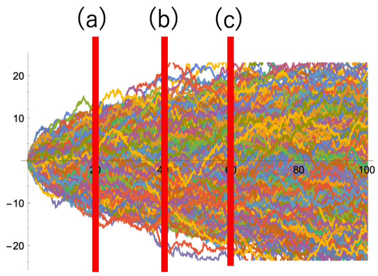

図 4: 2000 個の粒子の動きを重ね合わせたもの

プにおいて，粒子がどの点にどれだけいるかを調べてみましょう．ここでは，20 秒後 (図 4 の (a))，40 秒後 (図 4 の (b))，60 秒後 (図 4 の (c)) において，粒子がどのように分布しているか調べると，図 5, 6, 7 のようなグラフになることが確認できます．この結果から，原

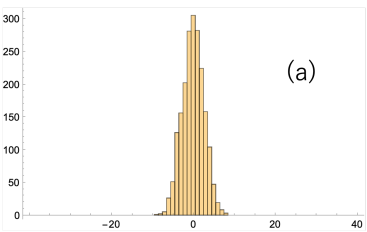

図 5: 20 秒の時の分布

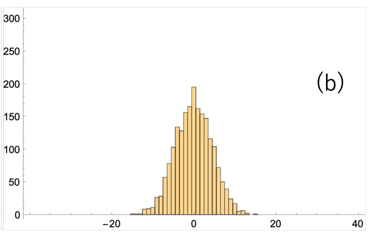

図 6: 40 秒の時の分布

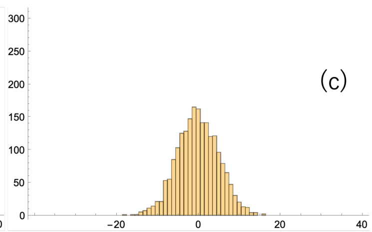

図 7: 60 秒の時の分布

点に集中していた 2000 個の粒子の分布が，段々と左右に広がって山が小さくなっていく様子を観察することができます．

3　拡散方程式

実は，ランダムウォークの動きを巨視的な視点で眺めることで，一つの形が見えてきます．これは，相対的に考えれば，格子の幅を 1 としていますが，この格子幅を 0.1, 0.01 というように細かくしていき，また時間幅も 1 秒毎でなく，0.1 秒毎，0.01 秒毎というように細かくしていくことと同じことになります．実は，どのように小さくしていくかにより，見えてくるものが変わるのですが，ここでは，格子幅の二乗と時間幅が一定の関係性を保ちながら小さくしていくとします．すると，上記のような粒子の振る舞いは，次の偏微分方程式を満たす解の振る舞いとして捉えることができます：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{1}$$

ただし，d はある正定数，$u = u(x, t)$ は空間変数 x，時間 t を変数に持つ関数を表し，粒子の数の近似を表します．方程式 (1) のことを「拡散方程式」と言います．この方程式の解の一つとして，

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4dt}\right)$$

を得ることができます (図 8 参照)．なお，拡散方程式には別の一面があります．それは，拡

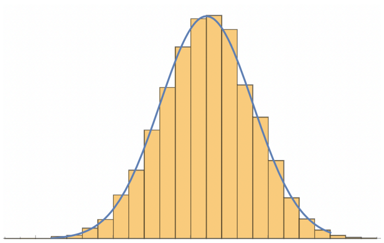

図 8: ランダムウォークと対応する拡散方程式の解 $u(x,t)$ を重ね合わせたもの

散方程式は「固体の物質の中を熱が伝わる様子を表す数理モデル」としても出現するということです．方程式は一緒なのですが，「熱伝導方程式」または発見者のジョセフ・フーリエに因んで「フーリエの熱伝導方程式」などと呼ばれます．

さて，それでは導出された数式 (1) は，どのような性質を持っているでしょうか？ まず，左辺にある $\dfrac{\partial u}{\partial t}$ は，時間 t に関する 1 階の偏微分を表し，「点 x，時刻 t における粒子数の変化率」を表します．$\dfrac{\partial u}{\partial t} > 0$ であれば，u は増加して，$\dfrac{\partial u}{\partial t} < 0$ であれば，u は減少します．一方，右辺にある $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ は，空間 x に関する 2 階の偏微分を表し，「点 x，時刻 t における粒子の空間分布の凹凸の情報」を表します．方程式 (1) が意味することは，おおよそ

- 関数 $u(x,t)$ の形は，時刻が進むにつれて段々と凹凸がなくなるように動く

と理解することができます．このような性質を「平滑化効果」と言います（図 9 参照)．また，拡散方程式にはもう一つ大事な性質として，

- 初期 $(t=0)$ において，$u(x,0)=0$ となる点 x が存在したとしても，時間が少しでも経過すれば，全ての点 x において $u(x,t)>0$ となる

という性質があります．実際には，粒子は離散的に分布するため，この性質は巨視的な見方をしたために現れた方程式の特殊な性質と言えます．このような性質を「無限伝搬性」といいます（図 10 参照)．

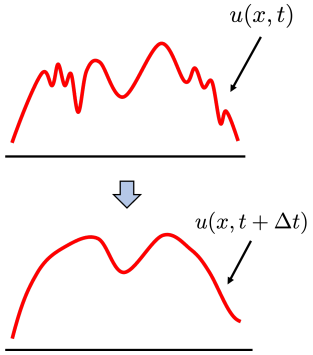

図 9: 平滑化効果

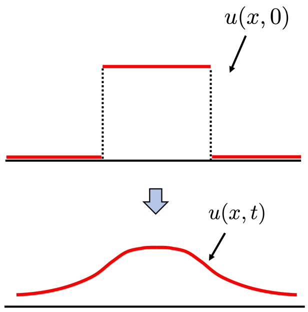

図 10: 無限伝搬性

さて，これまでは直線上 (1 次元) のランダムウォークを考察したわけですが，このアイデアは，容易に格子点上 (2 次元) のランダムウォークに拡張することができます．例えば，先程の直線上のルールを次のように変えます (図 11 参照)：

- 粒子 P は格子点上の点 (n,m) のみを移動する．ただし, n,m は整数とする．原点 $(0,0)$ を P の最初の位置とする．

- 1 秒経過するごとに，粒子は上下左右にそれぞれ 1/4 の確率で移動する．このステップを繰り返す．

先程同様に，格子の幅や時間の幅を適当な規則のもとで小さくしていくことで次のような方程式を得ることができます：

$$\frac{\partial u}{\partial t}=d\Delta u=d\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)$$

ここで，右辺にある $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ は，空間変数 x に関する 2 階の偏微分，空間変数 y に関する 2 階の偏微分を表します． これが，2 次元の拡散方程式になります．こちらも 1 次元の

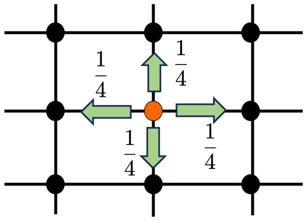

図 11: 2 次元格子

時と同様に数値計算をすると，拡散方程式の解はいい近似をしてるように見えます（図 12, 13 参照）.

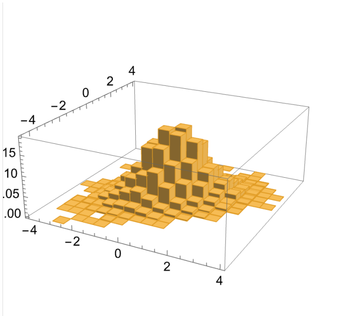

図 12: 2 次元ランダムウォーク

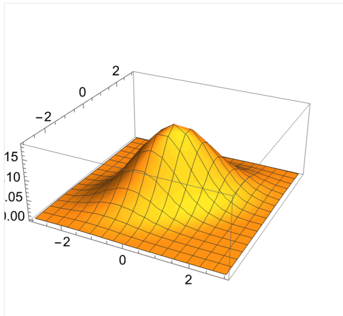

図 13: 対応する拡散方程式の解

少し話を戻すと，水の中にインクを垂らす様子を考慮すると，粒子は離散的に格子上をとびとびで動くというよりは，連続的に動いていると考えるのが望ましいですし，また時刻も離散的に考えるよりも連続的に変化していると考えるのが望ましいと言えます．従って，現象の視点においても，巨視的な視点で現象を眺めること（格子の幅を小さくしていくこと）は，決して不自然な操作ではないと言えます．また，ここでは粒子同士の衝突に関する影響を考慮していませんので，現実の運動とは多少異なるという点にも注意しておきます．上記では左右に等確率 (1/2 ずつ) または前後左右に等確率 (1/4 ずつ) で移動するモデルを考えましたが，非等確率で移動するモデルなど色々な問題を考えることができます．

4　拡散方程式と特異極限法

粒子の動きや，熱伝導を考えると，拡散方程式（熱伝導方程式）が現れることを確認しました．それでは，他の現象はどうでしょうか？ 次に，「時間が刻々と経過するにつれて，形状が変化する現象」に着目していきます．我々が日頃見る自然の形には，そのようなも

のが数多く存在します．例えば，細胞など生物の多くは細胞膜や皮膚などを境界と捉えれば，形状が変化する現象と言えます．また，氷の形や木の形，雲の形なども，境界そのものがあるわけではありませんが（必要であれば，仮想的に境界があるとみなして），形状が変化する現象と言えます．このような複雑な現象を数学の道具を用いて捉えるにはどうしたらいいでしょうか？ このような問題を考える場合，

- 境界を挟んだ，内側，外側での時間発展方程式
- 境界そのものの時間発展方程式

を考えて数式を立てることがしばしばあります (図 14 参照).

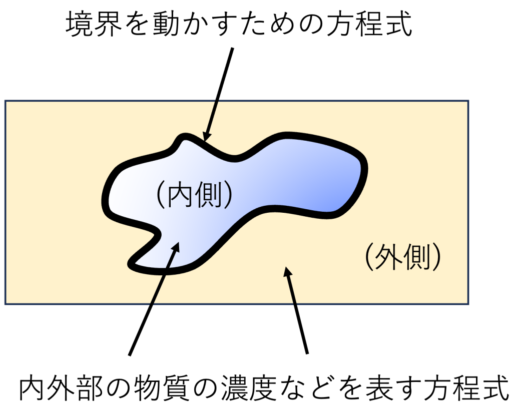

図 14: 内側，外側および境界のイメージ

しかしながら，この手の問題における数理モデルの構築や解析は容易ではありません．例えば，

- 内部，外部，境界それぞれの発展方程式を同時に考える必要がある
- 形が変化する（くっついたり，ちぎれたりする）可能性がある

ため，解析が非常に困難になります．

そこで，方程式を直接解いたり解析することは一旦横に置いて，このような問題をどのようにコンピュータを用いて計算をするか？ という点に着目することにします．基本的には，複雑な現象は情報が過多になることが予想されるため，具体的な解を求めることは難しく，定理等の主張も弱くなってしまう傾向にあります．それに対して，コンピュータは人間では一生かけても出来ない計算を一瞬で実行してくれるので，具体的に解を求めなくて

も，おおよその動きを追うことができます．では，上記のような形状が変化する問題をコンピュータで扱うことは容易でしょうか？ 残念ながら，このような問題をコンピュータで扱ったとしても，境界が動いてしまうので複雑なアルゴリズムを構築する必要があります．この問題を解決する一つの方法として，複雑な方程式を直接取り扱わずに，何らかの方法で扱いやすい形（コンピュータが得意な形，または既に解析が十分進んでいる方程式の形）で近似する，というアイデアがあります．ここでは，複雑な方程式を解析しやすい方程式の形で近似するために「特異極限」という方法に着目していきます．

5　氷の融解と特異極限

氷の融解現象を考えることにします．例えば，ゴムホースの中の一部に，氷が詰まっていて，その氷の両端に水がある状況などを考えることにします．簡単のためにホースの太さは十分小さいものとみなして，氷と水の領域は 1 次元の線分とみなすことにします．以下のような仮定を置きます：

1. 水の領域を外部 $\Omega_1(t) := [0, s_1(t)) \cup (s_2(t), 1]$，氷の領域を内部 $\Omega_2(t) := [s_1(t), s_2(t)]$ とする．ただし，$s_1(t)$ と $s_2(t)$ は変数 t の未知関数を表し，$s_1(t) < s_2(t)$ を満たすとします．また，考えている領域全体を $\Omega = [0, 1]$ と表すことにします．

2. 水の領域では，温度はフーリエの熱伝導方程式に従って拡散する．一方，氷は常に 0 度として仮定する：
$$\frac{\partial u}{\partial t} = d\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\text{水の領域 } \Omega_1(t) \text{ で}), \qquad u = 0 \quad (\text{氷の領域 } \Omega_2(t) \text{ で})$$

3. 氷と水の境界の温度は，常に 0 度とする．

4. 周りのゴムからは熱の出入りが無いとする．

これらの仮定では，水の温度変化は考慮されていますが，氷がどのように融解するか？ という情報が入っていません．従って，何らかの時間発展方程式を作る必要があります．ここでは，次のような条件で氷が融解するとします：

5. 氷が融解する速度 ($\dot{s}_1(t)$ と $\dot{s}_2(t)$) は，その点における温度勾配に従う：
$$\ell\dot{s}_1(t) = -\frac{\partial u}{\partial x}(s_1(t), t), \quad \ell\dot{s}_2(t) = -\frac{\partial u}{\partial x}(s_2(t), t)$$
ただし，ℓ は潜熱を表す正定数とします．

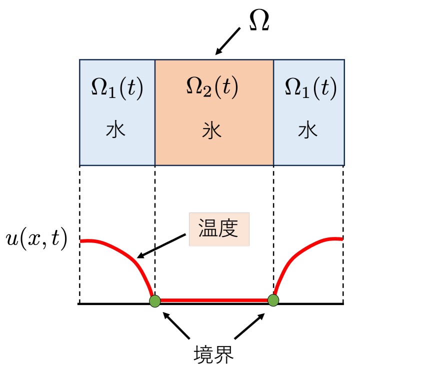

図 15: ステファン問題の解 $u(x,t)$ の例

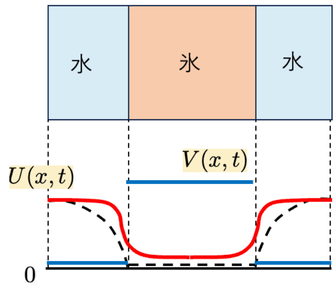

図 16: 近似解 $U(x,t), V(x,t)$ の例

この境界に対する時間発展方程式を，「ステファン条件」と言います．また，1~5 を合わせて「一相ステファン問題」と言います．

さて，このような境界の形が変化する問題に対する数値計算は，容易ではありませんが，実は外部 $(\Omega_1(t))$ と内部 $(\Omega_2(t))$，境界を分けてそれぞれの発展方程式を考えずに，領域全体 (Ω) で次の偏微分方程式を解くことだけで近似解を計算することができます：

$$(P_k)\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} = d\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2} - kUV & (\text{領域全体}\ \Omega\ \text{で}) \\ \dfrac{\partial V}{\partial t} = -kUV & (\text{領域全体}\ \Omega\ \text{で}) \end{cases}$$

ここで，k は十分大きい正のパラメータを表します．この方程式系 (P_k) は，$U = U(x,t)$ が一相ステファン問題の水の温度 $u(x,t)$ の近似解に対応しています．一方で，$V = V(x,t)$ というのは，氷が融解するために必要な熱量（潜熱）の近似に対応しており，$V > 0$ となる領域が，氷の領域に対応しています．

前述のように，(P_k) には拡散項 $(\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2})$ があるため「平滑化効果」と「無限伝搬性」という性質を持ち，U は Ω 全体で正値をとります．内部 $\Omega_1(t)$ と外部 $\Omega_2(t)$，境界を分けて考えていないことに注意します．また，$-kUV$ という効果があるので，氷の領域では U は 0 に近い値を取ります（図 16 参照）．(P_k) の下の式は，逆に拡散効果がない形をしており，単調に V が減っていくことがわかります．実は，$k \to \infty$ とすることで，U がステファン問題の解 u に収束します ([1])．このように，偏微分方程式内に含まれるパラメータを 0 または ∞ にすることを「特異極限」といいます．特に，反応項 kUV にパラメータ k がついていることから，反応が急速に進むという意味で「急速反応極限」とも言われます．ここで，最も注目すべき点は，

- (P_k) には境界に対する運動方程式が，どこにも表れていない

ということです．このお陰で，数値計算は境界に関するアルゴリズムをわざわざ考える必要が無く，簡単に氷の融解現象の数理モデルの数値計算をすることができます．

実は，一相ステファン問題の近似方法は上記のもの以外にもいくつか存在します．例えば，上記の関数 V の代わりに特性関数を用いたペナルティー法（[2]）や，フェーズフィールド法というものもあります ([3])．特にフェーズフィールド法は，より複雑な氷の結晶化などに対応できる，非常に汎用性の高いものになっています．中でも，次の方程式が重要な役割を果たします：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + ku(1-u)(u-a), \qquad (0 < a < 1)$$

この方程式は，材料化学の分野ではアレン=カーン方程式，また情報工学の分野では南雲方程式と呼ばれることがあります（[4]）．この方程式の特徴は，パラメータ k を大きくすると内部でおおよそ $u = 1$，外部でおおよそ $u = 0$（またはその逆）となります．この関数は，内部，外部のように異なる相の領域を表現するのに適しているため，「秩序変数」とも言われます．

6 おわりに

本講演では，「拡散現象」をテーマにランダムウォークや拡散方程式に触れました．粒子の動きや熱伝導は異なる現象ですが，巨視的な視点だと同じ拡散方程式が出現するのは，非常に興味深く，数学の面白いところだと言えます．後半は，氷の融解に関連する数理モデルを扱い，特異極限を用いた近似方法を紹介しました．講演内では説明できませんでしたが，その他にもこの拡散の性質を使った応用はいくつか存在します．例えば，画像処理（ノイズ除去）などをあげることができます．このように，拡散の性質を用いた近似方法は様々なところで用いられ，現在も盛んに研究されています．

参考文献

[1] D. Hilhorst, R. van der Hout, L. A. Peletier, The fast reaction limit for a reaction-diffusion system, J. Math. Anal. Appl. 199 (1996) 349–373.

[2] 河原田秀夫, 自由境界問題, 東京大学出版会, 1989.

[3] 西浦廉政, 非平衡ダイナミクスの数理, 岩波書店, 2009.

[4] 柳田英二, 反応拡散方程式, 東京大学出版会, 2015.