解説

材料科学のための定性的な数学

Usage of the Qualitative Aspects of Mathematics in the Materials Science

北田韶彦 早稲田大学 理工学部 物質開発工学科 教授
Akihiko Kitada

1 はじめに

自己相似領域がどのような数学的条件のもとでデンドライトー局所連結な連続体がS^1(半径1の円の円周)と同相な部分を含まないとき、この位相空間をデンドライトと呼びます[1)]ーでありうるか[2,3)]というようなトポロジーの問題が議論されるなどして、近年、材料科学においても、幾何学や代数学など定性的な数学を積極的に利用しようという動きがみられます。そこで、ここでは拡散方程式を例にとって、それをコンピュータによって数値的に解くのではなく、それをより一般化して、その一般化された方程式の幾何学的性質を議論することによって、拡散方程式の理念的本質を探ってみたいと思います。そしてそれによって、定性的議論の意義と限界とを考えてみたいと思います。

2 問題

uを濃度とするとき、拡散方程式は

$$u_t=Du_{xx},\ -\infty<x<\infty,\ t>0$$

$$(u_t=\partial u/\partial t,\ u_{xx}=\partial^2 u/\partial x^2)$$

で表されます。Dは拡散係数であって、正の値をとります。そこでこの方程式の右辺をu_{xx}で微分しますと、Dとなりますから右辺をu_{xx}によって微分したとき、その導関数の値が正であるということがこの方程式のひとつの特徴であるように思われます。また、$u_{xx}=0$とおくと方程式の右辺がゼロになるということも、特徴のひとつであります。このふたつの性質をそなえていることを念頭において、拡散方程式を以下のように一般化しましょう(より数学的な議論に関しては文献4)をご覧ください)。

$$u_t=F(t,u,u_x,u_{xx}),-\infty<x<\infty,\ t>0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots(1)$$

$$F(t,u,p,q)\in C^1(E)$$

ⅰ) $F_q(t,u,p,q)>0$

ⅱ) $F(t,u,0,0)=0$

ここで$F\in C^1(E)$という記号は、4次元空間の領域Eの各点で4変数関数$F(t,u,p,q)$(ここでu_xをp,u_{xx}をqとおきました)の各偏導関数$F_t(=\partial F/\partial t)$, $F_u(=\partial F/\partial u)$, $F_p(=\partial F/\partial p)$, $F_q(=\partial F/\partial q)$がそれぞれ連続であることを意味します。これは後の議論で必要となる条件なのです。さて条件ⅰ)は拡散方程式の右辺をu_{xx}によって微分したとき、それが正となるという事実に対応します。また、条件ⅱ)は拡散方程式の右辺は$u_{xx}=0$のときゼロであるという事実の一般化であります。一般化された拡散方程式(1)の解は条件ⅰ),ⅱ)のもとでどのようなふるまいをするのでしょうか、この方程式(1)の解曲面$u(x,t)$の中に$t=t_0$において図1のような山と谷とが存在しているものとしましょう。これらの山と谷が時間とともにどのように変化するのかについて我々は興味があります。今、山項aのx,t平面内における軌跡を$x=g(t)$, $t\geq t_0$とします。この軌跡の上で解$u(x,t)$の値はどのように変化するのでしょうか。$u(g(t),t)$の時間変化を求めてみましょう[5,6,7)]。

$$\begin{aligned}\frac{du(g(t),t)}{dt}&=u_x(g(t),t)\frac{dg(t)}{dt}+u_t(g(t),t)\\&=F(t,u(g(t),t),u_x(g(t),t),u_{xx}(g(t),t))\end{aligned}$$

となりますが、山項が$u_x(g(t),t)=0, u_{xx}(g(t),t)<0$で特徴付けられるとすると、条件ⅱ)を考慮して、

$$\frac{du(g(t),t)}{dt}$$
$$=F(t,u(g(t),t),0,u_{xx}(g(t),t))-F(t,u(g(t),t),0,0)$$

となります。ここで平均値の定理を用いれば、結局

$$\frac{du(g(t),t)}{dt}=F_q(t,u(g(t),t),0,\zeta(t))u_{xx}(g(t),t),$$
$$0>\zeta(t)>u_{xx}(g(t),t)$$

を得ます。ここで条件ⅰ)$F_q>0$を考慮すれば

$$\frac{du(g(t),t)}{dt}<0$$

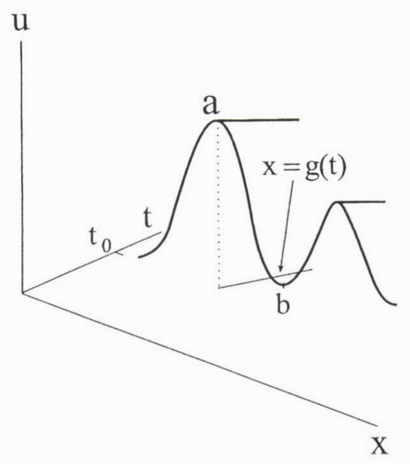

図1　x = g(t), $t_0 \leq t$ は山頂 a の軌跡

となって、山頂は時間とともに低くなっていくことがわかります。さらに谷底 b のx,t平面内における軌跡を$x=\bar{g}(t)$とすると、谷底を特徴付ける条件$u_x(\bar{g}(t),t)=0, u_{xx}(\bar{g}(t),t)>0$を用いて、同様の手順によって、関係

$$\frac{du(\bar{g}(t),t)}{dt}>0$$

を得ます。すなわち、山頂と反対に谷底は時間とともに上昇し、谷が浅くなっていくことがわかります。すなわち、全体として平滑になろうとするわけです。これは正に我々が拡散現象として思い描いている状況であります。すなわち、条件ｉ), ii)こそが、いわゆる拡散現象を特徴付けていた条件であったことがわかりました。このふたつの条件を満足する方程式としては、例えば係数Dが濃度uに依存するところの以下のような方程式が考えられます。

$$u_t=(D(u)u_x)_x=D(u)u_{xx}+D'(u)u_x^2,\ D(u)>0 \cdots (2)$$

ところでこのふたつの条件のうち、ひとつの条件だけを課したならば、どのようなことになるのでしょう。今、条件i)だけ残して、条件ii)を要求しないことにしましょう。例えば以下のような反応項$h(u)$をもつ方程式(3)がそれに対応します。

$$u_t=(D(u)u_x)_x+h(u) \cdots\cdots (3)$$

この方程式について定性的に言えることはどんなことでしょうか。それを検討するために、以下で最大値原理とよばれる定理を用意します。

3 最大値原理[8,9,10]

簡単のために空間一次元の場合について述べます。
以下のような線形偏微分方程式の古典解[9]について考えましょう。

$$u_t-a(x,t)u_{xx}+b(x,t)u_x+c(x,t)u=f(x,t),$$
$$a(x,t)>0,\ -\infty<x<\infty,\ t>0 \cdots\cdots (4)$$

今、x, t平面内の一点(ξ,τ)を固定し、図2のように点(ξ,τ)を含むところの開線分（両端を含まない線分）lをx軸に平行に引きます。$\gamma=\gamma_1\cup\gamma_2$と$l$とに囲まれた領域を$\Omega$とします。$l$は$\Omega$に含まれるものとし、$\Omega$の境界の一部$\gamma$は$\Omega$には含まれないものとします。すなわち、$\Omega$の全ての境界を$\Omega$に付けた領域$\overline{\Omega}$（$\Omega$の閉包）は$\Omega\cup\gamma=\Omega\cup\gamma_1\cup\gamma_2$として与えられます。ここで(4)式の係数$c(x,t)$は$\Omega$上で下に有界であると仮定します。すなわち、$\lambda\geq 0$があって

$$\inf_{(x,t)\in\Omega} c(x,t)>-\lambda$$

となっているものとします。記号$\inf_{(x,t)\in\Omega} c(x,t)$は$\Omega$における係数$c(x,t)$の下限（すなわち、この値よりは小さくならないというぎりぎりの値）を意味します。このとき、方程式(4)の解$u(x,t)$の点(ξ,τ)における値$u(\xi,\tau)$に対する下からの評価として、以下の(5a)が成り立つことを証明することができます。

$$u(\xi,\tau)\geq\min\left\{\inf_{(x,t)\in\Omega}\frac{f(x,t)e^{\lambda(\tau-t)}}{c(x,t)+\lambda},\ \inf_{(x,t)\in\gamma}u(x,t)e^{\lambda(\tau-t)}\right\} \cdots\cdots (5a)$$

ここで$\min\{\alpha,\beta\}$なる記号はαとβとの小さい方を意味します。同様に上からの評価として以下の(5b)が成り立ちます。

$$u(\xi,\tau)\leq\max\left\{\sup_{(x,t)\in\Omega}\frac{f(x,t)e^{\lambda(\tau-t)}}{c(x,t)+\lambda},\ \sup_{(x,t)\in\gamma}u(x,t)e^{\lambda(\tau-t)}\right\} \cdots\cdots (5b)$$

ここで$\max\{\alpha,\beta\}$はαとβとの大きい方を指します。また$\sup_{(x,t)\in\Omega}$はΩにおける上限（すなわち、この値よりは大きくならないというぎりぎりの値）を意味します。さて、このふたつの関係(5a), (5b)を用いて、条件ii)を考慮しない場合の方程式(1)の解の性質について考えたいと思います。

4 $u_x(\xi,\tau)$ の評価

今、(1)式の解$u(x,t)$が図3の$t=t_0$におけるような山をもち、その山が時間の経過とともに1点pからふたつの山に分岐したとしましょう。そのとき新たに出現した谷の谷底p_1の軌跡は図2のγ_1を、一方、新たに出現した山の山頂p_2の軌跡は図2のγ_2をそれぞれ描くことになるでしょう。さて(1)式をxで微分すると

$$u_{xt}-F_q(t,u(x,t),\ u_x(x,t),\ u_{xx}(x,t))u_{xxx}$$

$$-F_p(t,u(x,t),\ u_x(x,t),\ u_{xx}(x,t))u_{xx}$$
$$-F_u(t,u(x,t),\ u_x(x,t),\ u_{xx}(x,t))u_x=0 \quad \cdots\cdots\cdots(6)$$

となります。これはu_xに関する線形方程式です。条件i)から

$$F_q(t,u(x,t),\ u_x(x,t),\ u_{xx}(x,t))>0$$

でありますから、(4)式の係数$a(x,t)$の符号に関する条件を満足していることになります。また、$F \in C^1$なる条件は関数$-F_u(t,u(x,t),\ u_x(x,t),\ u_{xx}(x,t))$のΩにおける有界性を保証しますから、(4)式の係数$c(x,t)$の有界性に関する条件も満たされていることになります。すなわち、なんらかの値$\lambda \geq 0$によって、$\inf_{(x,t)\in\Omega} -F_u(t,u(x,t),\ u_x(x,t),\ u_{xx}(x,t)) > -\lambda$となっています。したがって(6)式を$u_x$に関する線形方程式とみることによって、これに最大値原理を適用することができて、この場合(5a), (5b)はそれぞれ以下の(5a'), (5b')となります。

$$u_x(\xi,\tau) \geq \min\left\{ \inf_{(x,t)\in\Omega} \frac{f(x,t)e^{\lambda(\tau-t)}}{-F_u(t,u(x,t),u_x(x,t),u_{xx}(x,t))+\lambda},\ \inf_{(x,t)\in\gamma} u_x(x,t)e^{\lambda(\tau-t)} \right\}$$

$$=\min\left\{ \inf_{(x,t)\in\Omega} \frac{0\cdot e^{\lambda(\tau-t)}}{-F_u(t,u(x,t),u_x(x,t),u_{xx}(x,t))+\lambda},\ \inf_{(x,t)\in\gamma} 0\cdot e^{\lambda(\tau-t)} \right\}$$

$$=\min\{0,0\}=0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(5a')$$

$$u_x(\xi,\tau) \leq \max\left\{ \sup_{(x,t)\in\Omega} \frac{f(x,t)e^{\lambda(\tau-t)}}{-F_u(t,u(x,t),u_x(x,t),u_{xx}(x,t))+\lambda},\ \sup_{(x,t)\in\gamma} u_x(x,t)e^{\lambda(\tau-t)} \right\}$$

$$=\max\left\{ \sup_{(x,t)\in\Omega} \frac{0\cdot e^{\lambda(\tau-t)}}{-F_u(t,u(x,t),u_x(x,t),u_{xx}(x,t))+\lambda},\ \sup_{(x,t)\in\gamma} 0\cdot e^{\lambda(\tau-t)} \right\}$$

$$=\max\{0,0\}=0 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(5b')$$

実際、図2におけるγ_1, γ_2はそれぞれ$u_x(x,t)=0$, $(x,t)\in\gamma_1\cup\gamma_2=\gamma$によって特徴付けられるからです。また、(6)式の右辺はゼロ、すなわち、$f(x,t)=0$であるからです。(5a'), (5b')とが、すなわち$0\leq u_x(\xi,\tau)$と$u_x(\xi,\tau)\leq 0$とが同時に成り立つためには$u_x(\xi,\tau)=0$でなければなりません。ところが図3から明らかなように$u_x(\xi,\tau)>0$でありますからこれは矛盾であります。すなわち図3に示されたような分岐は決して起こらないことになります。これが(1)式の右辺に対して条件i)だけを要求した場合の解の特徴的な性質であります。条件i)とii)がそろった場合には谷が埋まってふたつの山の合体が促され、また、山の高さも低くなることから、全体として平滑化していくことが確認されました。これに対して条件i)だけの場合には、ひとつの山がふたつに分岐するというような平滑化と逆のプロセスは少なくとも起こらないことがわかりました。したがって(3)式において、反応項$h(u)$がどのようなものであっても、少なくともより不均一な方向に状況が変化することはないということは言えるとおもいます。

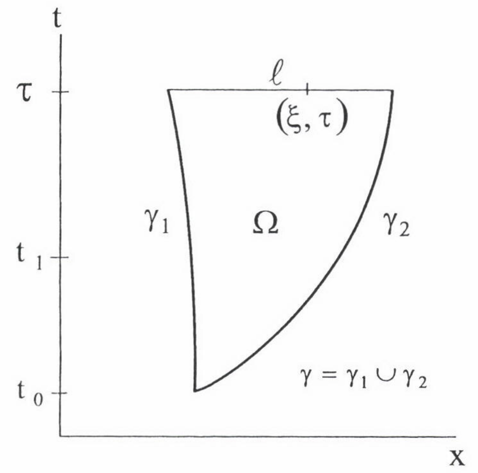

図2　$\overline{\Omega}$(Ωの閉包)$=\Omega\cup\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\gamma}_1\cup\boldsymbol{\gamma}_2$

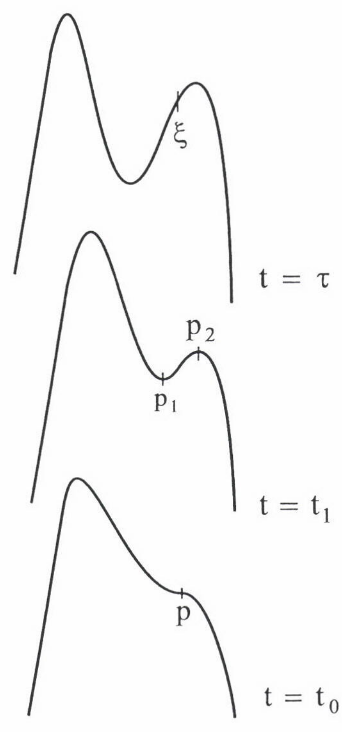

図3　山の分岐、$u_x(p)=0$, 谷底p_1の軌跡が$\boldsymbol{\gamma}_1$(図2)に、山頂p_2の軌跡が$\boldsymbol{\gamma}_2$(図2)にそれぞれ対応する

5 おわりに

方程式を具体的に解くことなしに、一定の定性的な議論を通して解の性質をある程度把握することができることを

示しました。特に方程式の形に対する制限をゆるめて、できる限り一般化した形の方程式を考えて、その解に関して何かを主張しようとするとき、たとえ積極的に“解は性質Aをもつ”と断言することはできなくとも、消極的ながら“解は少なくとも性質Bをもたない”ということを断言することは可能であろうということを具体的に示しました。数値計算などにもとづく解の定量的解析からは“起こりうる状況”は予測できても、“起こりえない状況”を特定することはむつかしいように思われます。ここで述べたような定性的議論もその意味では新材料開発のための予算と思考の節約に幾分かは役立つのではないかと思います。

6 謝辞

本報をまとめるにあたり、御協力をいただいた新日本製鐵(株)久保田猛博士ならびに早大大学院生本庄稔氏に深甚なる謝意を表します。

参考文献

1) G. T. Whyburn: Analytic Topology, AMS, (1942), 88.
2) M. Hata: Japan Journal of Applied Mathematics, 2 (1985), 381.
3) 北田韶彦：日本数学会2000年度年会応用数学分科講演アブストラクト, 82.
4) 剣持信幸：日本数学会2000年度年会総合講演企画特別講演アブストラクト, 118.
(関数解析にもとづく偏微分方程式論の材料科学への応用に関する最新の結果が載っています。)
5) A. Kitada and H. Umehara: Journal of Mathematical Physics, 32 (1991), 1478.
6) A. Kitada and S. Nakamura: Journal of the Physical Society of Japan, 67 (1998), 693.
7) A. Kitada, S. Nakamura and K.Ito: Journal of the Physical Society of Japan, 67 (1998), 2149.
8) T. Konishi, A. Kitda, Y. Saito and K. Ito: Journal of the Physical Society of Japan, 68 (1999), 4045.
9) 藤田宏, 池部晃生, 犬井鉄郎, 高見穎郎：数理物理に現れる偏微分方程式Ｉ, 岩波講座, 基礎数学, 解析学 (II) iv, (1977), 11.
10) 北田韶彦：応用物理, 62 (1993), 322.

(2000年4月26日受付)