第5章　拡散方程式

Fourier 級数，Fourier 変換の応用として拡散方程式を取り上げる．まず，拡散方程式の導出を行い，その解法に Fourier 変換を用いる．

5.1　拡散方程式の導出

本節では確率的な考え方から, 拡散方程式の導出を行う．　ここでは 2 次元空間を考える．

$a\times a$ の大きさを持った 2 次元正方格子を考え, 各格子上にはある物理量 $C(x, y, t)$ が割り当てられているものとする．ここで, $(x,\, y) = (m,\, n)a$, m, n は整数とする．いま, 時刻 t から $t+\Delta t$ の間に, 各格子上の物理量が隣の格子に確率的に飛び移ることを考える．（簡単化のため, 斜めの格子には飛び移らないとしておく.）

model 1: 飛び移りは等方的である．即ち, $(x,\, y)$ にあった物理量は Δt の間に, 1/4 の確率で $(x+a,\, y)$ に, 1/4 の確率で $(x-a,\, y)$ に, 1/4 の確率で $(x,\, y+a)$ に, 1/4 の確率で $(x,\, y-a)$ に飛び移るものとする．このとき $t+\Delta t$ における $(x,\, y)$ の格子上の物理量 $C(x,\, y,\, t+\Delta t)$ の期待値は

$$
\begin{aligned}
C(x,\, y,\, t+\Delta t) &= \frac{1}{4}C(x+a,\, y,\, t) \\
&\quad + \frac{1}{4}C(x-a,\, y,\, t) \\
&\quad + \frac{1}{4}C(x,\, y+a,\, t) \\
&\quad + \frac{1}{4}C(x,\, y-a,\, t), \qquad (5.1)
\end{aligned}
$$

と表現できる．ここで, 期待値 C の値もその期待値も同じ記号で示した. a, Δt が小さいとして, (5.1) を Taylor 展開すると,

$$
\frac{\partial C}{\partial t}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) = \frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right)a^2 + \mathcal{O}(a^3). \qquad (5.2)
$$

を得る．ここで $\mathcal{O}(\Delta t^2), \mathcal{O}(a^3)$ を無視し, (5.2) を整理すると, 2 次元の拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) C, \tag{5.3}$$

$$\kappa = \frac{a^2}{4\Delta t} > 0, \tag{5.4}$$

が得られる．正方格子を, 立方格子に変えて同じ議論を行えば, 3 次元の拡散方程式が得られる．

このような物理的考察によって, “微視的なゆらぎによって輸送される物理量の発展方程式” は拡散方程式に従う，ということが示された．[1]したがって輸送される物理量としては物質であっても, 温度（熱）, 運動量等, 何でもよい．つまり, 広範な現象に対して同様の方程式に従う現象が存在する．

Note: 拡散方程式の性質として, 現象を考える空間を $\mathcal{D}$ で表すと,

$$I = \int_{\mathcal{D}} C(x,\, y,\, t)\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y \tag{5.5}$$

の値が保存するという性質がある．上の物理的モデルで見たように, 各格子上の物理量は確率的に隣の格子に飛び移るが, 飛び移る際には値は変化しない．そこで上記の積分が時間と共に保存していることがこの微視的モデルでも満足されていることがわかる．

model 2: 飛び移りは等方的である．ただし, 同じ格子上に留まる確率を q とし, 隣の格子に飛び移る確率を p とする．したがって, $(x,\, y)$ にあった物理量は Δt の間に, $p/4$ の確率で $(x+a,\, y)$ に, $p/4$ の確率で $(x-a,\, y)$ に, $p/4$ の確率で $(x,\, y+a)$ に, $p/4$ の確率で $(x,\, y-a)$ に飛び移るものとする．$q+p=1$ に注意．前と同様に $t+\Delta t$ における $(x,\, y)$ の格子上の物理量 $C(x,\, y,\, t+\Delta t)$ の期待値は

$$\begin{aligned} C(x,\, y,\, t+\Delta t) \;\; = \;\; & \frac{p}{4} C(x+a,\, y,\, t) \\ & + \frac{p}{4} C(x-a,\, y,\, t) \\ & + \frac{p}{4} C(x,\, y+a,\, t) \\ & + \frac{p}{4} C(x,\, y-a,\, t), \\ & + q C(x,\, y,\, t) \end{aligned} \tag{5.6}$$

[1] そもそも ”拡散 ”現象の本質が微視的揺らぎによる輸送なのであるが.

と表現でき, Taylor 展開を行い, (5.6) を整理すると拡散方程式 (5.3) を得る. ただしこのときの拡散係数 κ は

$$\kappa = \frac{a^2}{4\Delta t}p, \tag{5.7}$$

となる. $0 < p < 1$ なので, case 2 の拡散係数は case 1 の拡散係数よりも小さい.

このモデルによって, 拡散係数の値は物理量の輸送される, もしくは散らばっていく, 速さを表すパラメターであることがわかる. (拡散係数の値が大きいと, 物理量が速く散らばっていく.)

5.2 Fourier 変換を用いた拡散方程式の解法

簡単化のために 1 次元の拡散方程式を解くことを考える:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \tag{5.8}$$

ここで, κ は正の定数, 考察する領域は, $-\infty < x < \infty$ でとする. 拡散方程式 (5.8) は時間に関して 1 階, 空間に関して 2 階の偏微分方程式であるので, これを解いて解を決定するにはある時刻における C に関する条件（通常は初期条件）が 1 個, 空間のある点における C に関する条件（通常は境界条件）が 2 個必要である. 初期条件は $C(x,0) = C_0(x)$, 境界条件は

$$C(x,t)e^{-ikx}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0, \qquad \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}e^{-ikx}\Bigg|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

とする. [2], [3]

[2]物理学の問題では境界が $\pm\infty$ にある場合には, 境界に近づくにつれて物理量はすみやかに 0 になるものとして問題を解くことが極めて多い.

[3]以下の導出の方法では, 上記の境界条件がどこで使用されているか判然としない. もし, (5.8) に e^{-ikx} を乗じて x について $-\infty \sim \infty$ で積分すると, 上記の条件が必要なことがただちにわかる. なお, 上記の条件は $C(x,t)$ が Fourier 変換で表現されるとしたときに, それが x について 2 階微分可能であるための必要条件である. 実際に, (5.12) が成り立つとき

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} ik\hat{C}(k,t)e^{ikx}\,\mathrm{d}k$$

となる. Fourier 変換を行って,

$$ik\hat{C}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}e^{-ikx}\,\mathrm{d}x \tag{5.9}$$

偏微分方程式を解く方法で代表的なものは, 変数分離法である. 変数分離法を用いてもこの問題を解くことはできるが, ここでは Fourier 変換を直接利用して解く方法を紹介する.

考察する領域は, $-\infty < x < \infty$ であることから, 物理量 $C(x,t)$ は Fourier 変換を用いて,

$$C(x,\,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{C}(k,\,t) e^{ikx} \mathrm{d}k, \tag{5.12}$$

と表現できる．ここで (5.12) は，物理量の空間依存性に対しては波 e^{ikx} による分解し，波数 k, もしくは波長 $2\pi/k$ を持った波の振幅 $\hat{C}(k,\,t)$ が時間と共に変動していくことを表している．

(5.12) を (5.8) に代入して整理する:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\mathrm{d}\hat{C}}{\mathrm{d}t} + \kappa\, k^2 \hat{C} \right\} e^{ikx}\, \mathrm{d}k = 0.$$

任意の x について上式が成り立つためには, 被積分関数が 0 でなければならない. そこで,

$$\frac{\mathrm{d}\hat{C}}{\mathrm{d}t} + \kappa\, k^2 \hat{C} = 0, \tag{5.13}$$

を得る．すなわち，拡散方程式を満足する C の Fourier 変換 $\hat{C}$ は (5.13) を満足する．この式はさまざまな k の値に対して成り立つ. k は実数なのでしたがって (5.13) は非加算無限個の方程式になっている. つまり, 偏微分方程式 (5.8) は Foureir 変換を用いると無限個の常微分方程式に書き直すことができる.

(5.13) の解は,

$$\hat{C}(k,t) = A(k) e^{-\kappa k^2 t} \tag{5.14}$$

が得られる．一方，(5.12) の逆変換

$$\hat{C}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(x,t) e^{-ikx}\, \mathrm{d}x \tag{5.10}$$

を部分積分して整理すると

$$ik\hat{C}(k,t) = \left\{ -\, C(x,t) e^{-ikx} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} e^{-ikx}\, \mathrm{d}x \right\} \tag{5.11}$$

となる．(5.9) と (5.11) が等しくなるためには，$C(x,t)e^{-ikx}\big|_{-\infty}^{\infty} = 0$ が必要である．同様にして 2 階微分について考えると，$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} e^{-ikx}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$ が得られる．

で与えられる. ここで, 任意定数 A は各 k について任意定数が違うであろうことを考慮して, $A(k)$ とした. (5.14) を (5.12) に代入して

$$C(x,\, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx-\kappa\, k^2 t} \mathrm{d}k, \tag{5.15}$$

を得る. 次に初期条件を考慮する.

$$C(x,\, 0) = C_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} \mathrm{d}k, \tag{5.16}$$

(5.16) を満足する $A(k)$ は Fourier 変換（逆変換）の知識から,

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C_0(x) e^{-ikx} \mathrm{d}x \tag{5.17}$$

となることがわかる. したがって, (5.15) は

$$C(x,\, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\, C_0(x') e^{ik(x-x')-\kappa\, k^2 t} \tag{5.18}$$

となる. (5.18) を整理すると,

$$C(x,\, t) \;=\; \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\, C_0(x') e^{-\frac{(x-x')^2}{4\kappa t}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, e^{-\kappa t \left\{ k - \frac{i(x-x')}{2\kappa t} \right\}^2} \right] \tag{5.19}$$

を得る.

ここで複素関数論と Gauss 積分の知識を用いると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa t \left\{ k - \frac{i(x-x')}{2\kappa t} \right\}^2} \mathrm{d}k = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa t x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\kappa t}}. \tag{5.20}$$

そこで (5.19) は

$$C(x,\, t) \;=\; \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\, C_0(x') e^{-\frac{(x-x')^2}{4\kappa t}} \tag{5.21}$$

と書き換えられる. これが任意の初期条件 $C_0(x)$ に対する拡散方程式の解である.

初期条件として場 $C_0(x)$ が δ 関数で与えられる場合を考える:

$$C_0(x) = \delta(x). \tag{5.22}$$

このとき, δ 関数の性質

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \delta(x') f(x-x') = f(x) \tag{5.23}$$

を用いると, (5.21) は次のようになる.

$$C(x,\,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}}\,e^{-\frac{x^2}{4\kappa t}} \tag{5.24}$$

この解は，初期に $x=0$ に局在していた C の分布が時間と共に拡がって行き，$t\to\infty$ ではいたるところで 0 になることを示している．ただし，先に注意したように初期に存在していた C の総量は変化しない．このことは Gauss 積分 (5.20) を再び用いて，(5.24) を x について $-\infty\sim\infty$ で積分する．

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x,t)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}} \times \sqrt{4\pi\kappa t} = 1. \tag{5.25}$$

すなわち，時刻に関係なく $C(x,t)$ の総量は 1 である．また，初期時刻においても

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{5.26}$$

であり，無矛盾である．天下り的に与えた積分 (5.20)，について引き続く節で解説する．

5.3　Gauss 積分

Gauss 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \alpha > 0 \tag{5.27}$$

の公式の証明を紹介する. この積分や, これに関連する積分は極めて多くの分野で登場する. 例えば, 正規分布に従う確率過程では確率密度関数は

$$p(x) = Ae^{-\alpha x^2} \tag{5.28}$$

の形で表される. A の値は事象の全確率が 1 であるという条件 $\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\,\mathrm{d}x = 1$ から決まる. これはまさに Gauss 積分である. また, このような分布に従う確率変数の n 次のモーメント $M_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2\,p(x)\,\mathrm{d}x$ の計算にも Gauss 積分が利用される. なお, 2 次のモーメント $\sigma = M_n$ を使って α を表現することができる.

証明:

$$I_0(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x, \tag{5.29}$$

と定義する.

$$
\begin{aligned}
I_0(\alpha)^2 &= \left\{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x\right\} \times \left\{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2}\mathrm{d}y\right\} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\, e^{-\alpha(x^2+y^2)}
\end{aligned}
$$

極座標 (r,θ) を用いて積分変数を変換する.

$$
\begin{aligned}
I_0(\alpha)^2 &= \int_0^{\infty} r\mathrm{d}r \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\, e^{-\alpha r^2} \\
&= 2\pi\int_0^{\infty} r\mathrm{d}r\, e^{-\alpha r^2}
\end{aligned}
$$

さらに $r^2 \to \xi$ と変数変換すると,

$$
I_0(\alpha)^2 = \pi\int_0^{\infty}\mathrm{d}\xi\, e^{-\alpha\xi} = \frac{\pi}{\alpha}.
$$

したがって, $I_0(\alpha) = \sqrt{\dfrac{\pi}{\alpha}}$.

Gauss 積分を利用して, 次のような積分を実行することができる.

$$
I_n(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x. \tag{5.30}
$$

$$
\frac{\partial I_0(\alpha)}{\partial\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} -x^2\, e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x
$$

なので,

$$
I_1(\alpha) = -\frac{\partial I_0(\alpha)}{\partial\alpha}. \tag{5.31}
$$

以下, 系統的に

$$
I_n(\alpha) = -\frac{\partial I_{n-1}(\alpha)}{\partial\alpha}. \tag{5.32}
$$

5.4　複素関数の積分

Gauss 積分に似た積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(x+i\beta)^2}\,\mathrm{d}x, \quad \alpha > 0 \tag{5.33}$$

は，複素関数の知識を用いて実行することができる．ここで β は実数であるとする．複素変数 $z \equiv x + i\beta$ を導入すると (5.33) は

$$\int_{-\infty+i\beta}^{\infty+i\beta} e^{-\alpha z^2}\,\mathrm{d}z \tag{5.34}$$

と書ける．なお，複素関数論によれば，正則な関数 $f(z)$ を複素平面内で周回積分するとゼロになることが知られている．そこで $(-L, 0) \to (L, 0) \to (L, i\beta) \to (-L, i\beta) \to (-L, 0)$ という矩形領域 C で周回積分を行うと，この領域内で (5.34) の被積分関数は正則であるから

$$\begin{aligned}\oint_C e^{-\alpha z^2}\,\mathrm{d}z = \quad & \int_{-L}^{L} e^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x + i\int_0^{\beta} e^{-\alpha(L+iy)^2}\,\mathrm{d}y \\ & + \int_{L+i\beta}^{-L+i\beta} e^{-\alpha z^2}\,\mathrm{d}z + i\int_{\beta}^{0} e^{-\alpha(-L+iy)^2}\,\mathrm{d}y = 0.\end{aligned} \tag{5.35}$$

(5.35) の左辺第 2 項および左辺第 4 項の被積分関数は $e^{-\alpha L^2}$ に比例するので $L \to \infty$ でこれらの項はゼロに収束する．そこで，左辺第 1 項および左辺第 3 項のみが残る．これを整理すると

$$\int_{-\infty+i\beta}^{\infty+i\beta} e^{-\alpha z^2}\,\mathrm{d}z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x \tag{5.36}$$

が得られる．前節と本節の結果より (5.20) が証明された．