

第 6 章

拡散方程式

これまで扱ってきた Fourier 級数は拡散方程式とは密接な関係がある。拡散方程式を解くために Fourier は Fourier 級数の概念を導入したといわれている。一方、拡散方程式は波動方程式と並んで地球惑星科学における様々な現象の素過程を記述する方程式の代表的なものである。本章では 1 次元空間の拡散方程式を取り上げ、その導出や拡散方程式が持つ性質、Fourier 級数・Fourier 変換の応用としての拡散方程式の解法を解説する。

6.1 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。

1 次元空間を Δx の間隔で離散化し、各格子点上にはある物理量 $C(x, t)$ が割り当てられているものとする。ここで、 $x = m\Delta x$ (m は整数) である。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。

飛び移りは等方的であるとする。即ち、 x にあった物理量は Δt の間に、 $1/2$ の確率で $x + \Delta x$ に、 $1/2$ の確率で $x - \Delta x$ に飛び移るものとする。このとき $t + \Delta t$ における格子 x 上の物理量 $C(x, t + \Delta t)$ の期待値は、

$$C(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2}C(x + \Delta x, t) + \frac{1}{2}C(x - \Delta x, t), \quad (6.1)$$

と表現できる。(6.1) の右辺第 1 項は、時刻 t において注目している格子点 x の右隣の格子点に存在していた C が確率 $1/2$ で時刻 $t + \Delta t$ に x に飛び移ってくることを表し、一方、右辺第 2 項は、時刻 t において注目している格子点 x の左隣の格子点に存在していた C が確率 $1/2$ で時刻 $t + \Delta t$ に x に飛び移ってくることを表している。ここで、物理量 C の値もその期待値も同じ記号で示した。 $\Delta x, \Delta t$ が小さいとして、(6.1) の各項を Taylor

展開し、整理すると、

$$\frac{\partial C}{\partial t} \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} (\Delta x)^2 + \mathcal{O}((\Delta x)^3) \quad (6.2)$$

を得る。ここで $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$, $\mathcal{O}((\Delta x)^3)$ を無視し、(6.2) を整理すると、1次元の拡散方程式、

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (6.3)$$

$$\kappa = \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} > 0, \quad (6.4)$$

が得られる。(6.3) が空間次元が1の場合の拡散方程式である。一般に拡散方程式は

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa \nabla^2 C, \quad (6.5)$$

と書かれる。1次元格子を、正方格子や立方格子に変えて同じ議論を行えば、それぞれ2次元、3次元の拡散方程式が得られる。

上で述べた物理的考察は、“確率的な揺らぎ（微視的なゆらぎ）によって近傍に輸送される物理量の発展方程式は拡散方程式に従う”，ことを示している。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。

上の確率的な飛び移りのモデルを少し変更して次のようなモデルを考えてみる。飛び移りは等方的であるが、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 にあった物理量は Δt の間に、 $p/2$ の確率で $x + \Delta x$ に、 $p/2$ の確率で $x - \Delta x$ に飛び移るものとする。（ここで $q + p = 1$ に注意。）前と同様に $t + \Delta t$ における格子 x 上の物理量 $C(x, t + \Delta t)$ の期待値は

$$C(x, t + \Delta t) = \frac{p}{2} C(x + \Delta x, t) + \frac{p}{2} C(x - \Delta x, t) + q C(x, t) \quad (6.6)$$

と表現でき、Taylor 展開を行い、(6.6) を整理すると再び拡散方程式 (6.3) を得る。ただしこのときの拡散係数 κ は

$$\kappa = \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} p, \quad (6.7)$$

となる。 $0 < p < 1$ なので、ここで考えたモデルの拡散係数は先に考えたモデルの拡散係数よりも小さい。このモデルでは物理量 C は注目する点に留まることができ、先のモデルに比べると物理量の散らりかたは遅くなっていることが直感的に分かる。このことから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、速さを特徴付ける指標であることがわかる。^{*1}(拡散係数の値が大きいと、物理量が速く散らばっていく。)

^{*1} 拡散係数は速さ × 長さの次元を持つので、物質の輸送される「速さ」ではないことに注意。

現象を考える空間の全領域を D で表すと,

$$I = \int_D C(x, t) dx \quad (6.8)$$

の値が保存するという性質を拡散方程式は持つ。この証明は実際に後で行うが、上の物理的モデルからもこのような保存量が存在することが直感でわかる。上のモデルでは、各格子上の物理量は確率的に隣の格子に飛び移るが、飛び移る際にはその値は保存されている。そこで上記の積分が時間と共に保存していることが、この微視的モデルからも理解できる。

6.2 拡散方程式の解法

6.2.1 問題設定

1 次元の拡散方程式を解くことを考える:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (6.9)$$

ここで、 κ は正の定数、考察する領域は、 $-\infty < x < \infty$ とする。拡散方程式 (6.9) 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

$$C(x, 0) = C_0(x) \quad (6.10)$$

ここで $C_0(x)$ は既知関数、と設定する。なお、境界条件は、 $x \rightarrow \pm\infty$ において全ての物理量が速やかにゼロになる、を設定する。^{*2}

6.2.2 保存則

前節で述べた保存則をここで証明しておく。拡散方程式の両辺を x について、 $-\infty \sim \infty$ の区間で積分する:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial C}{\partial t} dx &= \kappa \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx \\ &= \kappa \left[\frac{\partial C}{\partial x} \right]_{-\infty}^{\infty}. \end{aligned}$$

^{*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。

ここで境界条件 ($x \rightarrow \pm\infty$ において全ての物理量が速やかにゼロになる) を用いると, 先に述べた保存則,

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} C dx = 0$$

が得られる。(ここで時間の偏微分と空間積分は独立なので, 演算の順番を置き換えてもいいことを用いている.)

6.2.3 Fourier 変換を用いた拡散方程式の解法

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現在の問題を解くことはできるが, ここでは Fourier 変換を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,

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{C}(k, t) e^{ikx} dk, \quad (6.11)$$

と表現できる. ここで (6.11) は, 物理量の空間依存性に対しては波 e^{ikx} によって分解し, 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.

(6.11) を (6.9) に代入して整理する:

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

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,

$$\frac{d\hat{C}}{dt} + \kappa k^2 \hat{C} = 0, \quad (6.12)$$

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 (6.12) 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 (6.12) は非加算無限個の方程式系を表していることになる. つまり, 偏微分方程式 (6.9) は Fourier 変換を用いると無限個の常微分方程式系に書き直すことができる. なお, 各 $\hat{C}(k)$ の方程式の間には関係はなく, 互いに独立で連立方程式系にはなっていない. これは拡散方程式が線型の微分方程式であるからで, もし非線形の微分方程式であれば, 様々な \hat{C} が相互作用する無限連立常微分方程式系となる.*³

*³ 流体力学の基礎方程式 (Euler 方程式もしくは Navier-Stokes 方程式) はその代表例である.

(6.12) の解は,

$$\hat{C}(k, t) = A(k)e^{-\kappa k^2 t} \quad (6.13)$$

で与えられる. ここで, 時間に依存しない任意定数 A は各 k の値ごとに違ってよいことを考慮して, $A(k)$ とした. (6.13) を (6.11) に代入して

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{ikx - \kappa k^2 t} dk, \quad (6.14)$$

を得る. 次に初期条件を考慮する:

$$C(x, 0) = C_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{ikx} dk. \quad (6.15)$$

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

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C_0(x)e^{-ikx} dx \quad (6.16)$$

となるのがわかる. ((6.16) の両辺に e^{-ikx} をかけて x について $-\infty \sim \infty$ の区間の積分を行う.) したがって, (6.14) は

$$C(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx' C_0(x') e^{ik(x-x') - \kappa k^2 t} \quad (6.17)$$

となる. (6.17) を整理すると,

$$C(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' C_0(x') e^{-\frac{(x-x')^2}{4\kappa t}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\kappa t \left\{ k - \frac{i(x-x')}{2\kappa t} \right\}^2} \right] \quad (6.18)$$

を得る.

ここで複素関数論と Gauss 積分の知識を用いると,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa t \left\{ k - \frac{i(x-x')}{2\kappa t} \right\}^2} dk = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa t x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\kappa t}}. \quad (6.19)$$

そこで (6.18) は

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} C_0(x') e^{-\frac{(x-x')^2}{4\kappa t}} dx' \quad (6.20)$$

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.

6.2.4 基本解

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:

$$C_0(x) = \delta(x). \quad (6.21)$$

このような初期条件に対する拡散方程式の解は基本解と呼ばれる。ここでは、基本解を $C_b(x, t)$ で表すことにする。

δ 関数の性質

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x') f(x - x') = f(x) \quad (6.22)$$

を用いると、(6.20) は次のようになる。

$$C_b(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}} e^{-\frac{x^2}{4\kappa t}} \quad (6.23)$$

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、 $t \rightarrow \infty$ 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 (6.23) を x について $-\infty \sim \infty$ で積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}} \times \sqrt{4\pi\kappa t} = 1, \quad (6.24)$$

ここで、Gauss 積分 (6.19) を再び用いている。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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (6.25)$$

であり、無矛盾である。

δ 関数を用いると拡散方程式の任意の初期条件 (6.10) は

$$C_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(x') \delta(x' - x) dx' \quad (6.26)$$

で与えられ、一方、それに対する解は、基本解 C_b を用いて

$$C(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C_0(x') C_b(x - x', t) dx' \quad (6.27)$$

と表すことが出来る。即ち、任意の初期条件に対する拡散方程式の解は、基本解と C の初期分布の畳み込み積分として表現できるのである。

6.3 Gauss 積分

Gauss 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \alpha > 0 \quad (6.28)$$

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

$$p(x) = A e^{-\alpha x^2} \quad (6.29)$$

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 $\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1$ 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 $M_n \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} p(x) dx$ の計算にも Gauss 積分が利用される。なお、2 次のモーメント $\sigma = M_2$ を使って α を表現することができる。

(6.28) の証明:

$$I_0(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx, \quad (6.30)$$

と定義する。

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

極座標 (r, θ) を用いて積分変数を変換する。

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

さらに $r^2 \rightarrow \xi$ と変数変換すると、

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

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

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。

$$I_n(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx. \quad (6.31)$$

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

なので、

$$I_1(\alpha) = -\frac{\partial I_0(\alpha)}{\partial \alpha}. \quad (6.32)$$

以下、系統的に

$$I_n(\alpha) = -\frac{\partial I_{n-1}(\alpha)}{\partial \alpha}. \quad (6.33)$$

6.4 複素関数の積分

Gauss 積分に似た積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(x+i\beta)^2} dx, \quad \alpha > 0 \quad (6.34)$$

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 (6.34) は

$$\int_{-\infty+i\beta}^{\infty+i\beta} e^{-\alpha z^2} dz \quad (6.35)$$

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 $(-L, 0) \rightarrow (L, 0) \rightarrow (L, i\beta) \rightarrow (-L, i\beta) \rightarrow (-L, 0)$ という矩形領域 C で周回積分を行うと、この領域内で (6.35) の被積分関数は正則であるから

$$\begin{aligned} \oint_C e^{-\alpha z^2} dz &= \int_{-L}^L e^{-\alpha x^2} dx + i \int_0^\beta e^{-\alpha(L+iy)^2} dy \\ &\quad + \int_{L+i\beta}^{-L+i\beta} e^{-\alpha z^2} dz + i \int_\beta^0 e^{-\alpha(-L+iy)^2} dy = 0. \end{aligned} \quad (6.36)$$

(6.36) 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 $L \rightarrow \infty$ 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

$$\int_{-\infty+i\beta}^{\infty+i\beta} e^{-\alpha z^2} dz = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \quad (6.37)$$

が得られる．前節と本節の結果より (6.19) が証明された．