「エネルギー消散を伴う非平衡系に適用可能な新しい変分法とその応用」

神戸大学大学院システム情報学研究科　　　赤木　剛朗

１　研究の背景と目的

幾何光学，古典力学，熱力学，電磁気学，量子力学をはじめ，物理学のほとんどが変分原理（対象とする現象がある関数の極値問題の解として表現されるという原理）によって定式化されている．その理論的視点が多くの発展をもたらしていることは周知の事実であろう．そのため，関数の極値問題を理論的および数値的に解析する様々な数学的手法が開発され，変分法は物理学的にも数学的にも非常に強力な解析ツールとして知られている．一方，非平衡系の物理（熱現象や拡散現象など）を記述する発展方程式は自由エネルギーの消散構造（自由エネルギーを最小化するように状態が発展していく構造）を持ち，変分構造を有するような平衡現象への過渡的過程を記述するものとして理解されている．一方，非平衡系自体に対して変分構造を模索する試みはあまりない．そのため，非平衡系の解析には変分法が適用できない．

本研究では，非平衡系の時間発展を記述するエネルギー消散構造を持った発展方程式に対する変分原理を模索し，対応する汎関数を解析することで発展方程式の解の定性的・定量的な性質を理論的および数値的に明らかにする新しい変分法の開発を目的とする．さらに発展方程式に対する変分的視点を応用することで，既に変分構造が知られ研究されている諸問題に対して新しい視点を与える．ここでは近年欧州で提案された WED 汎関数を用いた非平衡系の変分原理に着目し，様々な非平衡現象を記述する発展方程式の解析を行う．

非平衡系は変分構造を有する平衡系への過渡的過程であるという認識がこれまでの常識であり，本研究が目指すように非平衡系自体を変分的な枠組みでとらえるという試みは，それから乖離している．また，本研究が提案するような「非平衡系に対する変分法」の研究は，世界的に見てもここ数年に始まり，欧州を中心に今後新しいパラダイムを開くことが期待されている分野である．実際，報告者が 2009 年にイタリアへ渡航した際は，前年に論文発表された初めての試みが多くの注目を集めており，それを機に報告者も調査研究を開始した．しかし研究計画申請当時，国内にはまだその機運がなく，欧州から最先端の研究情報の収集，国内における情報発信，さらには国内研究者による同研究分野への取り組みを早急に強化する必要があった．

２　研究方法・研究内容

本研究では，非平衡系に現れるエネルギー消散構造をもった発展方程式（勾配系）の変分的定式化を行った．ここでは特に，WED (Weighted Energy-Dissipation) 汎関数と呼ばれる軌道ごとに値を取る凸汎関数を導入し，WED 汎関数の最小化問題として勾配系を定式化した．WED 汎関数は材料科学の熱力学的な研究に由来し，Energy 汎関数と Dissipation 汎関数（熱力学では力学的エネルギーから熱エネルギーへの転換率に由来する）の和に重みをつけた形で定義される．さらに形式的には WED 汎関数の Euler-Lagrange 方程式がターゲットの方程式を近似することに着目し，勾配系に対する変分法を構築した．勾配系に変分原理を与えることは形式論として意味があるばかりでなく，変分法の研究の蓄積を勾配系の解析に応用できる点，特に最小化問題として解析できるという大きな利点がある．最小化問題に対する理論解析・数値解析の蓄積は豊かであり，また非凸汎関数の鞍点を捉えるのに比べると凸汎関数の最小点を求めることは理論的にも数値的にも容易である．

また，拡散方程式の数値解析では時間軸方向に差分近似を適用しているが，時空間大域的に定義された WED 汎関数の最小化問題では時空間を柔軟に有限差分もしくは要素分解することが可能であり，時間によって変化する空間領域上の問題や局所的に変化の激しい現象を扱う際に力を発揮する．

WED 汎関数による変分的定式化は勾配系以外にも適用が可能である．例えば，波動方程式や Lagrange 系など既に非凸汎関数の変分問題として定式化されている問題を，凸汎関数の最小化問題として再定式化することができる．このように WED 汎関数を用いた変分法は，非平衡系に限らず非常に広い対象に適用することが可能である．

本研究の遂行にあたって，WED 汎関数による勾配系の変分的定式化，数値解析法，異常拡散モデルの３分野における知識の獲得と最新の研究情報の収集を行った．特に WED 汎関数の研究は数年前に欧州で始まったばかりであり，国内では情報収集が困難である．そのため WED 汎関数の研究をリードしている研究者を招聘し国内の研究会等で WED 汎関数の理論について情報発信する機会を持った．一方，数値解析法や異常拡散モデルに関しては国内でも多くの情報を収集することができるため，セミナー・研究会の開催（計６回）および参加，また関連研究者の招聘（計６名）および訪問を行った．特に，異常拡散モデルの研究に関しては，環境工学や物質工学など工学の現場からの情報を収集し，実用的な問題への適用が可能な手法の構築の参考になった．更に近年大きな展開があった生物モデルに由来する非平衡系に関する情報収集を行うため，豪州の研究者を訪問し議論を行った．

３　研究成果

（１）　非線形拡散系に対する変分原理

ここでは多孔質媒体中のガスや液体の拡散現象を記述する多孔質媒体方程式や核融合実験炉内のプラズマの特異拡散モデルに由来する fast diffusion 方程式，また自由境界問題として知られるステファン問題などの非線形拡散方程式に適応した WED 汎関数を導入し，変分的定式化を行った．ただしこれらの非線形拡散方程式は二重非線形問題と呼ばれるクラスに分類され，高い非線形性から定式化が困難である．更にこれらの二重非線形問題は WED 汎関数を用いた変分的定式化と相性が悪く，これまで実現は難しいとされていた．本研究の試みでは，これらの二重非線形問題に対して凸解析の理論を用いた同値変形を行い，WED 汎関数が導入できる問題へと変形することで突破口を見出した．その結果，通常のエネルギー空間の共役空間上に定義されるある凸汎関数を WED 汎関数として定義し，その最小点の極限として非線形拡散方程式の解が得られることを数学的に証明した．

最小点の収束の証明では，WED 汎関数の最小点がある Euler-Lagrange 方程式の解になることを示し，Euler-Lagrange 方程式の解の一様有界性を証明することで，最小点の相対コンパクト性（収束部分列の存在）を得ている．WED 汎関数の最小化問題では，初期条件に由来する条件が付くため，Euler-Lagrange 方程式の表現を得ることが難しく，最小点が Euler-Lagrange 方程式の解になることを直接示すことは困難である．そこで，先に Euler-Lagrange 方程式の解を構成して，その解が WED 汎関数の最小点になることを示す論法を取るのだが，二重非線形問題の場合，この Euler-Lagrange 方程式の解の構成がそもそも困難になる．また仮に Euler-Lagrange 方程式の解を構成できたとしても，それは WED 汎関数の最小点の一つに過ぎず，任意の最小点が Euler-Lagrange 方程式の解になるかは分からない．本研究では，凸解析の理論で知られた条件付き最小化問題の近似法とペナルティ法を用いることで，指定した WED 汎関数の最小点に収束するような Euler-Lagrange 方程式の近似解を構成し，指定した最小点に対する一様有界性評価を得た．

これらの結果は Ulisse Stefanelli 氏（IMATI-CNR，イタリア）との共著論文として現在とりまとめている．

（２）　アレン・カーン系に対する変分原理

水の状態変化，結晶成長や合金の生成過程など様々な相転移現象の記述に，エネルギー汎関数の勾配系として記述されるアレン・カーン方程式が用いられる．ここではそのようなアレン・カーン方程式に対する変分的定式化を試みた．ただし，複数の安定な相が存在する場合，考えるエネルギー汎関数が多峰構造を持つため，エネルギー汎関数は凸になら

ない．この点がこれまでの WED 汎関数による変分的定式化の対象との大きな違いとなる．この場合，対応する WED 汎関数も凸にならないため，最小点の存在は非自明な問題となるばかりか，仮に存在したとしても大域的最小点と局所的最小点が複数存在することが予想されるため，既存の枠組みとは大きく異なる．しかしアレン・カーン方程式は勾配系の最も重要な例の一つであり，これを WED 汎関数による変分原理の枠組みに組み入れることは大きな達成目標となっていた．

ここでは WED 汎関数を凸汎関数と凹関数の和に分解し，凸解析の理論を用いて凹関数の部分を滑らかな汎関数に近似することで得られる近似 WED 汎関数の最小点を求め，それらが Euler-Lagrange 方程式の近似解になることを証明した．更に指定した WED 汎関数の最小点について議論ができるよう，（１）よりも更に改良を加えたペナルティ法を導入し，最終的には指定した WED 汎関数の最小点が Euler-Lagrange 方程式を満たすことを証明することで，最小点の一様評価を得た．これにより最小点が収束部分列を含むことが示され，更にその極限が元のアレン・カーン方程式の解になることが分かる．ここで WED 汎関数の大域的最小点ばかりでなく局所的最小点に対しても同じ結論を導くことができることに注意しておく．この点は非常に重要である．実際，数値解析を行う場合，多峰型の関数に対して常に大域的最小点を求めることは困難であり，しばしば局所的最小点が捕まる場合がある．しかしここでの結果は，そのような局所的最小点であっても WED 汎関数による変分原理が成立することを保証する．

またなるべく一般的な枠組みを構築するため，非凸なエネルギー汎関数に対する抽象的勾配系を考え，それに対する WED 汎関数の最小点の収束性と極限が元の勾配系の解になることを証明した．

これらの結果は Ulisse Stefanelli 氏（IMATI-CNR，イタリア）との共著論文として現在取りまとめている．

（３） 様々な拡散系，勾配系への応用に向けて

その他，これらの試みの拡張として様々な拡散系や勾配系に対する応用について調査・研究を行った．特に近年，環境工学や細胞生物学などの分野で異常拡散と呼ばれる古典的な拡散モデルから逸脱するような現象が注目されており，その数理解析が重要な研究テーマとなっている．特にマクロな解析は環境工学に現れるスケールの大きな現象の解析には重要であり，多くの研究がなされている． Giulio Schimperna 氏（Pavia 大，イタリア）とは,空間的に非一様性を持った非線形拡散系を記述する発展方程式について研究を行い，解の存在など幾つかの成果を得た．これらは現在，共著論文として取りまとめている最中である．また，異常拡散の原因の一つとして知られている媒質のフラクタル構造をマクロスコピックに記述する非整数回微分を取り入れたカーン・ヒリャード系（勾配系の一種）に対しても，解の存在や微分回数と解の関係，また解の長時間挙動などを解析し，一定の成果が出ている．本件は Giulio Schimperna 氏および Antonio Segatti 氏（Pavia 大，イタリア）との共同研究である．これらの成果は（１），（２）で述べたような変分的定式化へ向けた基盤研究として位置づけられる．

（４）数値解析や制御問題への応用

WED 汎関数による変分的定式化に基づき,WED 汎関数の最小点を数値的に求めることで元の勾配系の数値解を求める試みを行った．この手法では特に，二重非線形問題などの高い非線形性を有する問題への適応性，また境界が移動するような問題への適応性が高いことが確認された．数値解析例を図１に示す．現在の数値解析では，WED 汎関数の最小点を Euler-Lagrange 方程式の解を求めることで得ており，直接的に最小点を求めているわけではない．直接的に最小点を求めることでどのような効果が表れるか今後検証したい．また Euler-Lagrange 方程式の解を求める場合，時間と空間変数を別個のものとして見ていた勾

配系の視点から離れ，ある意味で時間と空間変数を同様に扱うことになる．これが時間と共に変化する境界を持つ問題への高い適応性の原因となっていると思われる．数値解析への応用に関しては，今後更に計算例を増やしていくことで考察を行いたい．

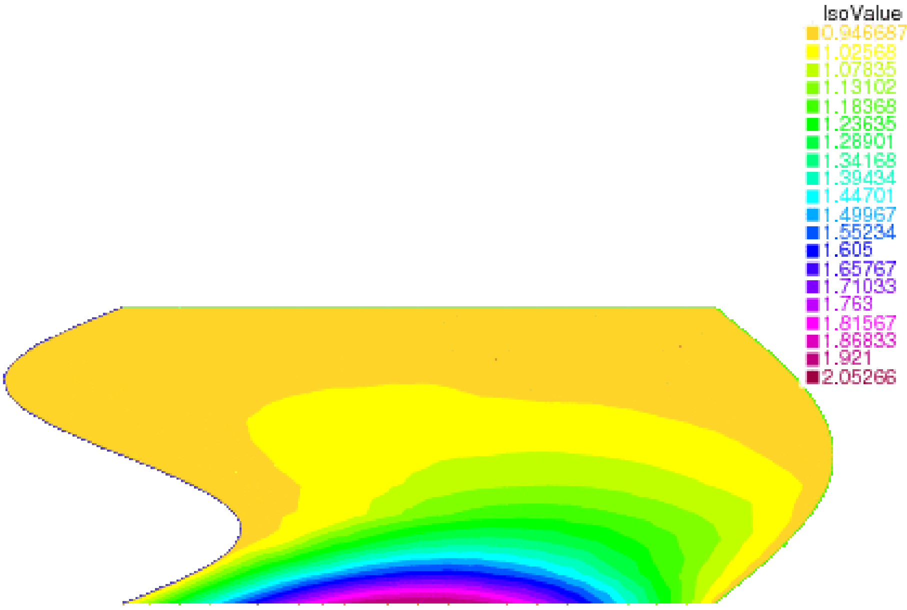

図1．境界が時間と共に移動する一次元領域における拡散方程式の初期値境界値問題の解．横方向が空間方向，縦方向が時間軸となる．領域の時間変化によって拡散が影響を受けていることが分かる

その他，境界制御問題などへの応用も期待される．R. Rattes と J.L. Lions は１９６９年に Quasi-Reversibility Method と呼ばれる偏微分方程式の制御問題に関する手法を発表しており，特に境界制御問題は本研究で用いている Euler-Lagrange 方程式と非常に近い問題を用いている．Rattes-Lions の書籍では線形問題が主に取り扱われており，非線形問題への適応はなされていない．本研究の手法を更に改良することで，非線形版 Quasi-Reversibility Method の構築が期待される．

４　研究がもたらす効果および波及効果

非平衡系の代表例として拡散現象があげられるが，拡散現象は熱現象を含め，我々の日常生活にありふれている．環境工学では以前から，大気中や地中の汚染物質の拡散現象を解析する上では古典的なモデルに限界があることが知られており，それを改善するための新しいモデルが提案されてきた．このような正常拡散モデルの修正は物理学や工学においても多数なされており，ここ３０年で新しい拡散モデルが多数出現した．一方，それらを理論的・数値的に解析する手法はどれも十分ではなく，より高い精度で多様な情報を知ることができる手法の開発が多くの分野にとって共通の課題となっている．

本研究によって非平衡系が変分問題として定式化されたことは，これまで極値問題，最小化問題，最適化問題などに対して構築されてきた膨大な数の解析手法が非平衡系の解析にも適用できるようになることを意味する．特に最小化問題に対して開発された数値解析法の蓄積は豊かであり，それらを非平衡系の解析に直接適用できるようになる．本研究の試みによって拡散現象を含む非平衡系の解析手法の幅が大きく広がることは明らかであり，その効果が環境工学をはじめとする工学分野へ波及していくことが期待される．

また本研究を通して，制御問題など新しい応用分野も見つかっている．今後の研究を通して，更に広い分野の研究者と連携を取って当該分野の発展に貢献したい．