

論文の内容の要旨

論文題目 Mathematical analysis and numerical methods for phase transformation and anomalous diffusion
(相転移と特異拡散に対する数学解析と数値解法について)

氏 名 劉 逸侃 (Yikan LIU)

近年、産業界や環境保全などに現れる問題に関して、偏微分方程式などによる数学モデルが構築され、その数学解析が行われ、数値解析手法が提案され多くの成果を収めるようになってきている。

実際の見地からの課題は、例えばシステムの制御や大規模プラントの操業状態のモニタリングや最適な性質を持つ製品の生産のための制御や物性の推定などであり、しばしば逆問題としてとらえることができる。

本論文の研究対象は、次の二種類の偏微分方程式である。

- 相転移現象を記述する多重双曲型方程式。
- 特異拡散現象を記述する複数列の非整数階時間微分項を持つ拡散方程式。

第一の方程式は、著者によりはじめて導出されたものである。一方、第二の方程式は古典的な放物型方程式と関連しており、応用上の重要性にも関わらず数学解析や関連する数値解法がいまだ十分でない。

本研究は、理論上の考察だけでなく、現実の問題への応用も含んでいる。相転移に対する研究は、材料特性の最適設計や製造過程の制御の基礎であり、ここで提案された数値手法は、簡便かつ高速であり、産業現場における適用・実践が進められている。また、特異拡散に対する研究は、汚染メカニズムの解明及び汚染源の特定やそれを踏まえた、より合理的な汚染予測や対策のための理論的基礎を与えることを目指している。

さらに、第一の方程式は、物質の溶解や凝集現象にも関連しており、第二の偏微分方程式と組み合わせることにより、不均質媒質における汚染物の溶解・拡散・凝集などの一連の現象を統一的に記述でき、環境問題などにおいて有効な対策の指針を与えることが可能になると期待できる。

以下、初期値・境界値問題などの解の存在や定性的な性質という順問題ならびに逆問題を含む数学解析および数値解析手法に関し、本研究で得られた結果を方程式ごとに説明する。

第一部

相転移とは、様々なプロセスで普遍的に発生する現象であり、考えている材料の特性を最終的に支配するものである。第一部において、Cahn による下記の time cone モデルを基礎にして導出された双曲型方程式について考察した。

$$u(x, t) = \int_{\Omega_\rho(x, t)} \Psi(y, s) dy ds \quad (x \in \mathbb{R}^d, t \geq 0), \quad \text{ただし} \quad (1)$$

$$\Omega_\rho(x, t) := \{(y, s); 0 < s < t, |y - x| < R(t) - R(s)\}, \quad R(t) := \int_0^t \rho(s) ds. \quad (2)$$

ここで u, ρ, Ψ はそれぞれ転移の期待値、成長速度、核生成率を記述する。第一章から第四章において、数学解析と数値解析双方の見地から、順問題ならびに ρ, Ψ を再構成する逆問題について論じた。

第一章

モデル (1) は多重積分を含むため、数学や数値手法が困難になる。第一章では、全ての奇数空間次元において (1) と同値な定式化を確立した。

定理 1. 空間次元は $d = 2m + 1$ ($m = 0, 1, \dots$) とし、 $u(x, t)$ は (1) を満たすとする。 $u(x, t), \Psi(x, t), \rho(t)$ ($x \in \mathbb{R}^d, t \geq 0$) は十分滑らかと仮定し、 $\rho(t)$ ($t \geq 0$) は真に正值とする。このとき、 $u(x, t)$ は次

の多重双曲型方程式の解である:

$$\begin{cases} \mathcal{H}_\rho^{m+1}u(x, t) = (2m)!! 2^{m+1} \pi^m \Psi(x, t)/\rho(t) & (x \in \mathbb{R}^d, t > 0), \\ \partial_t^\ell u(x, 0) = 0, \quad \ell = 0, 1, \dots, d & (x \in \mathbb{R}^d), \end{cases} \quad \text{ただし} \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_\rho w(x, t) := \frac{1}{\rho(t)} \partial_t \left(\frac{\partial_t w(x, t)}{\rho(t)} \right) - \Delta w(x, t).$$

(3) は, time cone モデルの解析にとって極めて重要である. $d = 1, 3$ の場合の順問題の数値解法として, 交互方向的な陰解法を用いて, 十分な精度を持つ効率的な数値シミュレーションを行った. これは, もとの time cone モデルを (3) に帰着させたことによりはじめて可能となったものである.

第二章

第二章では, 1 次元 time cone モデルにおける成長速度 $\rho(t)$ を最終時刻の観測データから決定する逆問題を考察した. Dirichlet 境界条件を課すことで, この逆問題を $d = 1$ のときの双曲型方程式 (3) に関する下記の係数決定逆問題に帰着させることに成功した:

問題 1. $L > 0, T > 0$ とし, u は次を満たすとする.

$$\begin{cases} \mathcal{H}_\rho u(x, t) = 2 \Psi(x, t)/\rho(t) & (0 < x < L, 0 < t \leq T), \\ u(x, 0) = \partial_t u(x, 0) = 0 & (0 < x < L), \\ u(0, t) = u(L, t) = 0 & (0 < t \leq T). \end{cases} \quad (4)$$

核生成率 Ψ が既知のとき, 成長速度 ρ を, 最終時刻の値 $u(\cdot, T)$ によって決定せよ.

微分作用素 $-\Delta$ の固有系を用いて, $u(\cdot, T)$ を (2) で定義された $R(t)$ によって表現することができる. $\rho(t) = R'(t)$ により, 次の二段階の再構成を考えた:

1. 固有系による解は無限級数で表示されるが, それを適切な有限項までの和で打ち切り, Tikhonov 型の正則化を適用し, その変分方程式をスペクトル法により解いて $R(t)$ を求めた.

2. R から ρ を求めるために, 数値微分ではなく, 正則化法を適用した.

さらに提案した手法の有効性を数値例によって検証した.

第三章

相転移を表す多重双曲型方程式 (3) により, 核生成率 $\Psi(x, t)$ の再構成は波動源決定逆問題に帰着された. しかしながら, そのような逆問題に特化した最適な数値解法はなかった. 第三章では, 以下のような逆問題に対する反復法を開発した:

問題 2. $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) は滑らかな境界を持つ有界領域とし, $\omega \subset \Omega, T > 0$ を適切に与え, $u(f)$ は次を満たすとする:

$$u(f) \begin{cases} \partial_t^2 u(x, t) - \Delta u(x, t) = f(x) h(x, t) & (x \in \Omega, 0 < t \leq T), \\ u(x, 0) = \partial_t u(x, 0) = 0 & (x \in \Omega), \\ \partial_\nu u(x, t) = 0 & (x \in \partial\Omega, 0 < t \leq T). \end{cases}$$

このとき, h が既知のとき, f を部分内部測定 $u(f)|_{\omega \times (0, T)}$ によって決定せよ.

ω と T がある条件を満たすとして, f を内部測定値で評価する上記の逆問題において Ω 全体で Lipschitz 安定性を証明した. 数値解析の定式化として, 次の最小化問題を考えた:

$$\min_{f \in L^2(\Omega)} J(f), \quad J(f) := \|u(f) - u^\delta\|_{L^2(\omega \times (0, T))}^2 + \alpha \|f\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad (5)$$

ただし $\alpha > 0$ を正則化パラメータ, u^δ を観測誤差を含むデータとする. 最小化関数が満たすべき変分方程式を調べることで, 下記の反復法を提案した:

$$f_{m+1} = \frac{K}{K + \alpha} f_m - \frac{1}{K + \alpha} \int_0^T h z(f_m) dt \quad (K > 0, m = 0, 1, \dots), \quad (6)$$

ただし, $z(f_m)$ は共役系の解とする. スキーム (6) の精度と効率を, 多くの数値実験によって実証した.

第四章

第四章では、3次元 time cone モデルにおいて、部分内部観測データから核生成率 Ψ の再構成について、理論上の安定性及び数値解法を、(3) に関する波動源決定逆問題の枠組みで確立した。 $\Psi(x, t) = f(x)g(x, t)$ と仮定し、Neumann 境界条件を課すことで、問題を次のように定式化した：

問題 3. $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ は滑らかな境界を持つ有界領域とし、 $\omega \subset \Omega$, $T > 0$ を適切に与え、 $u(f)$ は次を満たすとする。

$$u(f) \begin{cases} \mathcal{H}_\rho^2 u(x, t) = f(x) h(x, t) & (x \in \Omega, 0 < t \leq T), \\ \partial_t^\ell u(x, 0) = 0 & (x \in \Omega, \ell = 0, 1, 2, 3), \quad \text{ただし } h(x, t) := \frac{8\pi g(x, t)}{\rho(t)}. \\ \partial_\nu u(x, t) = \partial_\nu \Delta u(x, t) = 0 & (x \in \partial\Omega, 0 < t \leq T), \end{cases} \quad (7)$$

このとき、 g, ρ が既知のとき、 f を部分内部測定 $u(f)|_{\omega \times (0, T)}$ によって決定せよ。

双曲型方程式の解に対する、大きなパラメータを含む重み付き L^2 -型不等式である Carleman 評価を用いて、次の大域的な Lipschitz 安定性を証明した。

定理 2. $\partial\Omega$ を C^3 級とし、 u を (7) の解とする。ただし、 $f \in L^2(\Omega)$ とし、 g と ρ がある条件を満たすとする。更に、観測領域 ω と観測時間 T についても、適切な条件を仮定する。このとき、ある定数 $C = C(\Omega, \omega, T, g, \rho) > 0$ が存在して、次が成立する：

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} \leq C \left(\|\partial_t^4 u - \rho^2 \partial_t^2 \Delta u\|_{L^2(\omega \times (0, T))} + \|\partial_t u\|_{L^2(0, T; H^2(\omega))} + \sum_{k=2}^3 \|\partial_t^k u\|_{L^2(\omega \times (0, T))} \right).$$

数値計算については、前章の準備を踏まえ、(5) と同様な最小化問題を調べることで、(6) と類似の反復法を導いた。3次元までの数値実験を行い、計算性能を詳しく分析した。

第二部

不均質媒質における拡散について、古典的な拡散方程式が実験データをうまく再現しない場合があることが知られている。そのような拡散現象は特異拡散現象とよばれ、モデルの候補として、次のような非整数階時間微分項を持つ拡散方程式が注目を浴びている： $\partial_t^\alpha u + \mathcal{A}u = F$, ただし $\partial_t^\alpha u$ ($0 < \alpha < 1$) は Caputo 微分を表し、 \mathcal{A} は対称な楕円型作用素とする。モデリングの精度を高めるため、上の式の時間微分項を複数個の階数の微分の線型結合に置き換えた方程式の初期値・境界値問題を考える。

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^m q_j \partial_t^{\alpha_j} u(x, t) + \mathcal{A}u(x, t) = F(x, t) & (x \in \Omega, 0 < t \leq T), \\ u(x, 0) = a(x) & (x \in \Omega), \\ u(x, t) = 0 & (x \in \partial\Omega, 0 < t \leq T), \end{cases} \quad (8)$$

ただし $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ は滑らかな境界を持つ有界領域とし、 α_j, q_j ($j = 1, \dots, m$) は正の定数で、 $1 > \alpha_1 > \dots > \alpha_m > 0$ かつ $q_1 = 1$ とする。このような非整数階拡散方程式が、古典的な拡散方程式が満たす特徴的な性質をどの程度満足するのか、また、どのような点で決定的に異なるのかを調べるのが理論上の一つの焦点である。第五章において、古典的な拡散方程式の重要な性質である強最大値原理が微修正の上で成り立つことを $m = 1$ の場合に証明し、その逆問題への応用を論じた。第六章と第七章において、 $m \geq 2$ の場合に順問題などの適切性と数値解法を論じた。

第五章

第五章では、 $m = 1$ に限り、(8) に対する強最大値原理を、既存の弱最大値原理に基いて確立した。

定理 3. $a \in L^2(\Omega)$ が $a \geq 0, \neq 0$ であって、 $F = 0$, $m = 1$ とし、 u を (8) の解とする。このとき、任意の $x \in \Omega$ に対し、 $\{t > 0; u(x, t) \leq 0\}$ は高々可算集合であり、可能な集積点は ∞ に限る。

上の定理の応用として、汚染源を決定する次のソース決定逆問題に関する一意性を証明した。

問題 4. $x_0 \in \Omega$, $T > 0$ を任意に与え、 $a = 0$, $F(x, t) = \rho(t)g(x)$, $m = 1$ とし、 u を (8) の解とする。ただし、 $\rho \in C^1[0, T]$, $g \in C_0^\infty(\Omega)$ とする。 g が既知で非負で恒等的に零でないとき、 $\rho(t)$ ($0 \leq t \leq T$) を、一点での測定 $u(x_0, t)$ ($0 \leq t \leq T$) で決定せよ。

第六章

第六章では、 $m \geq 2$ の場合の (8) の初期値・境界値問題の適切性および $t \rightarrow \infty$ での漸近挙動を考察した。第一に、厳密解は多項式的な Mittag-Leffler 関数で記述されるので、その特殊関数の性質を調べ、解についての様々の評価を得た。

定理 4. $\gamma \geq 0$ に対して、分数べき \mathcal{A}^γ を定義し、 $\mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma)$ をその定義域とする。 $C > 0$ を定数とする。

(1) $F = 0$, $a \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma)$ ($\gamma \in [0, 1]$) とする。このとき、(8) の解は一意的に存在し、次が成立する：

$$\|u(\cdot, t)\|_{H^2(\Omega)} \leq C\|a\|_{\mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma)} t^{\alpha_1(\gamma-1)}, \quad \|\partial_t u(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|a\|_{\mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma)} t^{\alpha_1\gamma-1} \quad (0 < t \leq T).$$

(2) $a = 0$, $F \in L^p(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma))$ ($p \in [1, \infty]$, $\gamma \in [0, 1]$) とする。このとき、(8) の解は一意的に存在し、次が成立する：

$$\begin{aligned} p = 2 \text{ の場合は, } \|u\|_{L^2(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}^{\gamma+1}))} &\leq C\|F\|_{L^2(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma))}, \\ p \neq 2 \text{ の場合は, 任意の } \varepsilon \in (0, 1] \text{ に対して, } \|u\|_{L^p(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}^{\gamma+1-\varepsilon}))} &\leq \frac{C}{\varepsilon} \|F\|_{L^p(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma))}. \end{aligned}$$

上の定理に基づいて、(8) の解の $(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ や (q_1, \dots, q_m) などに関する連続依存性も示した。

第二に、Laplace 変換を用いて、解の $t \rightarrow \infty$ での減衰率が最小の階数 α_m によって与えられることを証明し、漸近挙動を求めた。

第七章

第七章では、前章の結果を踏まえ、問題 (8) で $\mathcal{A} = -\Delta$ の場合に半離散ならびに全離散 Galerkin 有限要素法 (FEM) を構築し、誤差評価を導いた。

X_h を最大半径 $h > 0$ を持つ有限要素空間とする。問題 (8) に対する半離散 Galerkin 有限要素法とは、次を満たす $\{u_h(t)\}_{0 \leq t \leq T} \subset X_h$ を求めることである：

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^m q_j (\partial_t^{\alpha_j} u_h(t), v_h) + (\nabla u_h(t), \nabla v_h) = (F_h(t), v_h) & (\forall v_h \in X_h, 0 < t \leq T), \\ u_h(0) = a_h, \end{cases} \quad (9)$$

ただし a_h, F_h は a, F の適切な近似とする。前章で得られた評価の離散版を用いて、スキーム (9) に対するほぼ最適な誤差評価を以下のように導き出した：

定理 5. u と u_h をそれぞれ (8) と (9) の解とする。 $C > 0$ を定数とする。

(1) $F = 0$, $a \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ ($\gamma \in (-1/2, 1/2] \cup \{1\}$) としたとき、次が成立する：

$$\begin{aligned} &\|u_h(t) - u(t)\|_{L^2(\Omega)} + h\|\nabla(u_h(t) - u(t))\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \begin{cases} Ch^2\|a\|_{\mathcal{D}(\mathcal{A})}, & \gamma = 1, \\ Ch^{2(1+\min(\gamma, 0))} |\ln h| \|a\|_{\mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma)} t^{\alpha_1(\max(\gamma, 0)-1)}, & -1/2 < \gamma \leq 1/2. \end{cases} \end{aligned}$$

(2) $a = 0$, $F \in L^\infty(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma))$ ($\gamma \in (-1/2, 0]$) としたとき、次が成立する：

$$\|u_h(t) - u(t)\|_{L^2(\Omega)} + h\|\nabla(u_h(t) - u(t))\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^{2(1+\gamma)} |\ln h|^2 \|F\|_{L^\infty(0, t; \mathcal{D}(\mathcal{A}^\gamma))}.$$

全離散 Galerkin 有限要素法とは、(9) に含まれる Caputo 微分を時間ステップ $\tau > 0$ で離散化したものである。厳密解が十分滑らかな場合に限り、誤差を h と τ で評価した。

最後に、証明した半離散と全離散スキームの収束率を、空間 2 次元までの数値実験で確認した。