

非整数階微分による異常拡散のモデル化について（その 2）

東京大学大学院工学系研究科 島本憲夫(Norio SHIMAMOTO)

Graduate School of Engineering

The University of Tokyo

1. はじめに

不均質で複雑なマルチスケール構造を持った多孔質媒体の中を粒子が拡散するような問題では、拡散する粒子が媒体の表面に吸着・離脱したりする現象を伴ったり、媒体が持つ空間的な構造によって粒子の運動が制限を受けるような拡散となり、通常の拡散とは異なる拡散特性を示すことが予想される。このような拡散現象は、従来の拡散方程式ではうまくモデル化することができない場合があり、通常の拡散と対比して異常拡散として扱われる。

本稿では、複雑な媒体中を粒子が運動する過程を、時間的あるいは空間的なフラクタル性のある過程としてとらえ、非整数階微分を用いて現象を記述することによりモデル化する方法について考えていく。従来の拡散方程式において、時間および空間の微分に非整数階微分を導入した拡散方程式による異常拡散のモデルについて、いくつかの応用例を含めて紹介する。非整数階微分に関する事項については、「非整数階微分による異常拡散のモデル化について（その 1）」を参照願いたい。

2. 不均質透水性媒体中の拡散モデル（筑波大学 羽田野先生）

ここでは、異常拡散をモデル化する手法の一つである CTRW(Continuous Time Random Walk)法をベースにした吸着を伴う拡散モデルについて、実験による測定データとの比較により、モデルの有効性を検証した応用研究例を紹介する。ここで紹介する内容は、筑波大学 羽田野先生のご研究であり、詳細については文献 1,2 などをご覧頂きたい。

2. 1 従来モデル

土壌は、小さな砂粒から小石あるいは岩といった様々な粒度のものが含まれた不均質な媒体となっている。土壌中を地下水とともに物質が拡散していくような現象は、不均質透水性媒体中の拡散問題になっている。このような不均質透水性媒体中の物質移動を表現するモデルとして、従来から次のような移流分散方程式が用いられてきた。

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{R} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - \frac{v}{R} \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} + \delta(x)\delta(t) \quad (2.1)$$

不均質透水性媒体中における物質の拡散特性を測定する方法としてカラム実験がある。垂直においた鉄製のカラムの中に粉碎したカコウ岩を詰め、その上部から地下水のトレーサを含んだ低濃度溶液を定流速で流入する。長時間が経過した後にカラムを輪切りにして、トレーサの吸着量を測定することで拡散濃度分布を推定するものである（図 2.1 参照）。

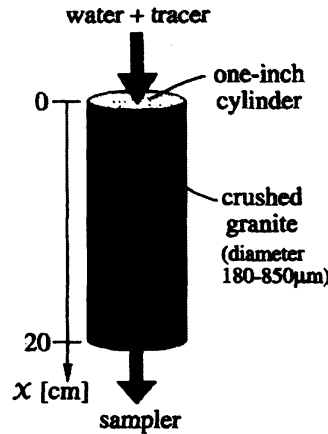


図 2.1. カラム試験 [文献 1 より引用]

近年のカラム試験による精密な濃度分布の測定においては、従来の移流分散方程式のモデルでは、パラメタを選んでも実験の測定値から得られる濃度分布をうまく再現できないことが指摘されている（図 2.2 参照）。これは、従来モデルが均質媒体で Fick の法則を前提としたモデルとなっていることに起因するものと考えられている。

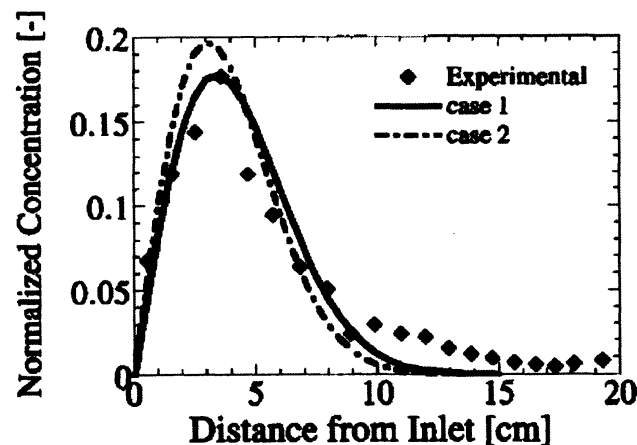


図 2.2. カラム試験での測定値と従来モデルとの比較 [文献 1 より引用]

実験の測定値から得られる濃度分布と従来の移流拡散方程式のモデルから得られる濃度分布との差異は、拡散距離が長い領域において顕著になっている。実験測定値から得られる濃度分布はロングテイルを示しており、これは異常拡散における特徴的な特性である。

2. 2 CTRW 法をベースにした拡散モデル

カラム内の粉碎したカコウ岩の表面には多くの吸着サイトがあり、トレーサはこれらのサイトに吸着・脱離を繰り返して運ばれる。従って、カラム内をトレーサが拡散していく過程を再現する場合には、吸着・脱離の過程を考慮した拡散モデルが必要になる。そこで、サイトにトレーサの吸着が発生する時間の確率分布関数を、次のような確率モデルとして表現することが Hatano らによって提案された[1]。

$$\psi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi_0 \tau}} - \frac{1}{t_0} e^{\tau/t_0} \text{Erfc}\left(\sqrt{\tau/t_0}\right) \quad (2.2)$$

この確率分布関数は、十分大きな τ に対しては、

$$\psi(\tau) \approx \tau^{-3/2} \quad (\tau \gg 1) \quad (2.3)$$

であり、時間に対して $-3/2$ のべき乗関数となる。異常拡散をモデル化する方法の一つである CTRW 法においては、拡散する粒子が移動する場合の待ち時間の確率分布を

$$\omega(t) \approx t^{-(1+\nu)} \quad (2.4)$$

のようなべき乗関数として考え、このとき異常拡散となる[3]。提案モデルは、CTRW 法において $\nu=1/2$ とした場合に相当した拡散モデルとして考えることができ、従って、提案モデルによる粒子の運動は異常拡散の特性を示すことになる。

図 2.3 は、提案された CTRW 法をベースにした拡散モデルを用いて、実験による測定値と比較した結果である。提案モデルは、ロングテイルとなる実験測定値の濃度分布との良好な一致を示していることがわかる。

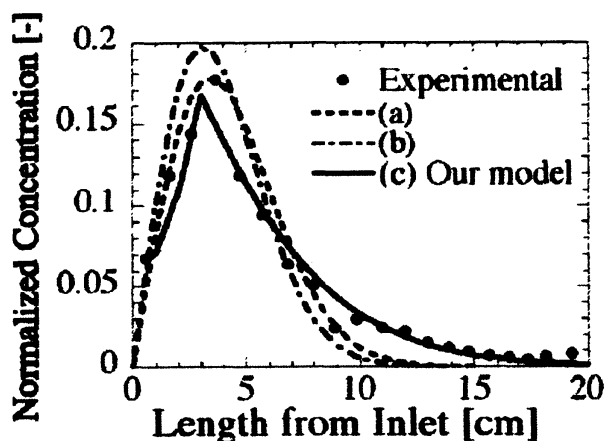


図 2.3. カラム試験での測定値と提案モデルとの比較 [文献 2 より引用]

2. 3 まとめ

筑波大学 羽田野先生の研究室では、ここで紹介したような不均質媒体中での異常拡散について、関連した様々な実験やモンテカルロ法による CTRW シミュレーションなどに取り組まれており、異常拡散モデルの検証についての多くの研究成果を報告されている。異常拡散モデルの応用や検証などを考える際には参考にして頂きたい。

3. 異常拡散における拡散係数の推定

生体の細胞内外での物質拡散においては、ある観測時間の領域で、拡散係数がべき乗的に減少する異常拡散と呼ばれる現象が観測されている。異常拡散をモデル化する方法の一つである CTRW 法は、時間微分を非整数階微分に拡張した拡散方程式に帰着し、このとき異常拡散となる場合の拡散係数の解析式を導出することができる。ここでは、CTRW 法に基づいて導出された拡散係数の解析式により推定した拡散係数値と、ヒアルロン酸水溶液中での 1 分子観測によって得られた拡散係数の実験報告例との比較評価により、非整数階微分モデルによる異常拡散現象の再現性について検証を行っていく。ここで紹介する内容は文献 10 に基づいている。

3. 1 細胞外マトリックス中の異常拡散現象

生体における細胞外マトリックス物質としてヒアルロン酸やコラーゲンなどがある。これらは高分子鎖による網目構造を作ることが知られており、タンパク質などの分子はその中をかいくぐって移動していくことになる。細胞外マトリックスとしてヒアルロン酸水溶液を用いて、拡散係数を測定した実験報告がある[4]。これは、ヒアルロン酸水溶液中に蛍光分子を入れて、蛍光相関分光法を改良した方法 (SVC-FCS : Sampling-Volume-Controlled Fluorescence Correlation Spectroscopy)

を用いて蛍光分子の拡散係数を測定したもので、ある距離や時間領域で拡散係数が減少していく現象が観測されている。この実験報告では、ヒアルロン酸水溶液の重量濃度 WT% との関係について観測しており、ヒアルロン酸水溶液の重量濃度 WT% が大きくなると、全体として拡散係数が小さくなる傾向が示されている。これは水溶液中におけるヒアルロン酸の重量濃度が大きくなると、それに伴い高分子鎖が作る網目構造が密となるため、蛍光分子が移動できる領域がより制限を受けることから拡散係数を減少させることとなるものと考えられる。

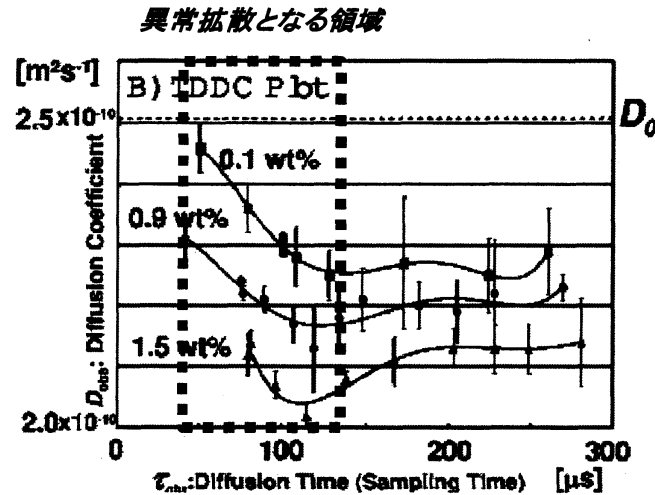


図 3.1. ヒアルロン酸水溶液中の拡散係数の測定 [文献 4 より引用]

実際の生体における細胞外マトリックスでは、様々な物質が混在しているため、全ての媒体の構造をモデル化して考えることは容易ではない。文献 4 による Masuda らの実験報告は、細胞外マトリックスの模擬としたヒアルロン酸水溶液中に蛍光分子を入れたシンプルな系になっているので、拡散モデルの検証には良い比較対象であると考えられる。

3. 2 CTRW 法から導出された解析式による拡散係数の推定方法

(1) 拡散係数の解析式

CTRW 法を用いてモデル化した拡散過程の濃度分布 $W_v(t, x)$ は、時間に関して v 階非整数階微分の拡散方程式に帰着する。

$$\frac{\partial^v}{(\partial t)^v} W_v(t, x) = D_v \frac{\partial}{\partial x^2} W_v(t, x), \quad (D_v = D_1 \tau^{1-v}) \quad (3.1)$$

ここで、 D_1 は通常拡散となる場合での拡散係数、 τ は平均待ち時間である。このとき、拡散係数

は次のような時間に関してべき乗関数となる解析式として導出することができる[3].

$$D(t) = \frac{D_1}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{t}{\tau} \right)^{\nu-1}, \quad (0 < \nu < 1) \quad (3.2)$$

$\Gamma(\cdot)$ はガンマ関数である.

(2) 時間微分階数の見積もり方法

拡散係数の解析式は, $\nu-1$ を指数に持ったべき乗関数になっており, 従って, 時間微分階数 ν が異常拡散の振る舞いを特徴づけることになる. ここで対象としている高分子鎖内での拡散における時間微分階数 ν について, 高分子鎖の隙間長と, 拡散する粒子径の比を用いて見積もる方法を考えていく.

時間微分階数 $\nu(0 < \nu < 1)$ は, 拡散粒子が高分子鎖に衝突することによってもたらされる移動の間欠性と関係するものと考えられる. つまり,

$$\begin{aligned} \text{時間微分階数} &= \text{粒子が停留しないで進める比率} \\ &= \text{粒子が高分子鎖の隙間を通過できる比率} \end{aligned}$$

のうように考えることができる. そこで, 時間微分階数 ν は, 高分子鎖の隙間長 (相関距離) ξ と, 拡散する粒子径 δ の比を用いて以下のように見積もることとする.

$$\nu = \frac{\xi - \delta}{\xi} = 1 - \frac{\delta}{\xi} \quad (3.3)$$

粒子の運動が高分子鎖の影響を受ける場合は, ν が 1 より小さくなるので, 異常拡散の状態を示すことになる. 重量濃度 WT%が大きくなると高分子鎖の割合が多くなり網目構造が密になる. そのとき ξ は小さくなるので ν も小さくなる. また, $\xi \gg \delta$ では $\nu \approx 1$ となり, これは高分子鎖の網目構造による阻害がない Brown 運動の状態とみなすことができる.

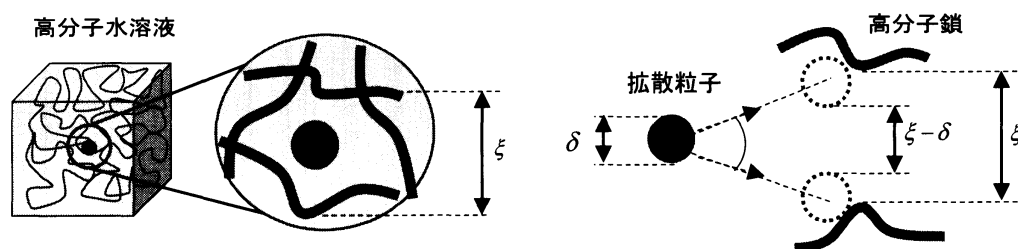


図 3.2. 高分子鎖構造と時間微分階数との関係性 [文献 10 より引用]

高分子溶液中に占める高分子鎖の体積比率の割合が大きくなると、高分子鎖の間の隙間長が小さくなることが予想される。立体に対する長さの比は体積比の 1/3 乗と考えることができるので、高分子の隙間長の比は体積比の 1/3 乗に反比例するものと考え、重量濃度は高分子溶液の重量に対する高分子の重量の%比であるから、溶液に高分子が占める割合だと考えると、重量濃度は体積濃度と正の相関があり、つまり重量濃度比が体積比に比例するものと考えることができる。

粒子径 δ の網目径 ξ に対する比率を疎密度 $\chi = \delta/\xi$ とおくことにする。この疎密度の比は、網目径の比に逆比例するので、結果として、疎密度の比は重量濃度の 1/3 乗に比例するものと仮定する。このことを、2つの重量濃度 WT_a と WT_b の場合について当てはめてみると、

$$\frac{\chi_b}{\chi_a} = \frac{1/\xi_b}{1/\xi_a} \approx \left(\frac{Vr_b}{Vr_a} \right)^{1/3} \approx \left(\frac{WT_b}{WT_a} \right)^{1/3} \quad (3.4)$$

このとき、時間微分階数 ν は次の関係式で見積もることにする。

$$\nu_b \cong 1 - \chi_b = 1 - \left(\frac{WT_b}{WT_a} \right)^{1/3} \chi_a \quad (3.5)$$

(3) 解析式と文献結果との比較

CTRW 法に基づいた拡散係数の解析式(3.2)と文献4で示されているヒアルロン酸水溶液中で測定された異常拡散時の拡散係数値との比較を行う。

各重量濃度に対する時間微分階数 ν は、先に示した見積もり方法を用いて、0.1WT%, 0.9WT%, 1.5WT%に対して、 $\nu=0.94$, $\nu=0.89$, $\nu=0.85$ の値を用いる。通常拡散 (Brown 運動) における拡散係数 D_1 は、文献4の中で示されている水中 (ヒアルロン酸濃度 0%) での拡散係数の値 $2.5 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{s}$ とした。また平均待ち時間 τ は、異常拡散となっていると考えられる領域である $50\mu\text{s}$ とした。

図3.3に、解析式(3.2)で推定した拡散係数と、文献4での実験報告値との比較結果を示している。プロット点は、実験報告にて示された各重量濃度 WT%での測定値であり、時間ともに拡散係数が減少し、異常拡散の現象を示している。線分は、拡散係数の解析式より計算した結果であり、各重量濃度 0.1WT%, 0.9WT%, 1.5WT%に対して、 $\nu=0.94$, $\nu=0.89$, $\nu=0.85$ が対応している。水中 (ヒアルロン酸濃度 0%) での拡散は通常拡散の場合であり、これは解析式での $\nu=1$ に対応している。解析式により推定した拡散係数は、各重量濃度に対して測定値との一致がみられ、拡散係数がべき乗的に減少していく異常拡散の現象が再現できているものと考えられる。

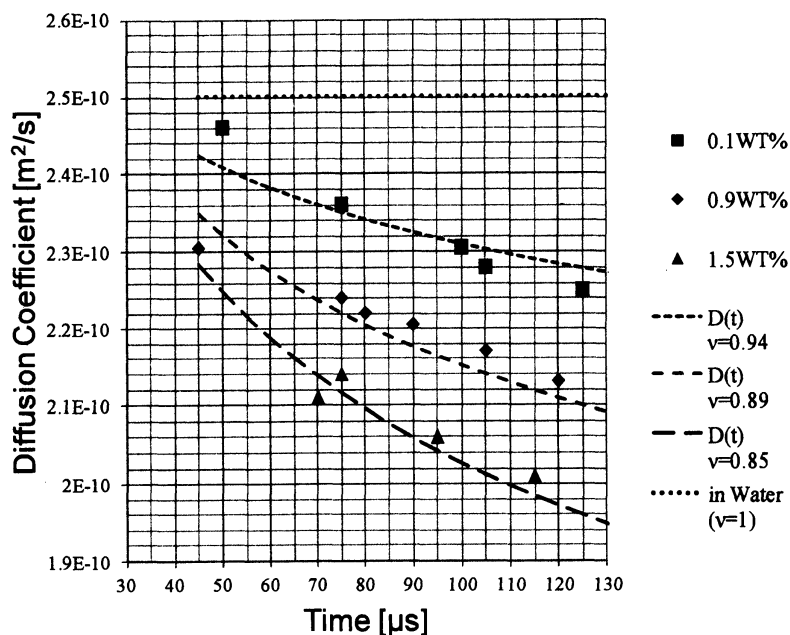


図 3.3. 解析式で推定した拡散係数と文献報告値との比較 [文献 10 より引用]

3. 3 まとめ

生体内における細胞近傍での分子の拡散は、組織を構成する高分子鎖という障壁を伴った拡散となっており、通常の Brown 運動による拡散ではない異常拡散の特性を示すことが知られている。このような異常拡散について、CTRW 法を用いた拡散モデルとして考えると、拡散係数の解析式を導出することができる。この解析式を用いて推定した拡散係数値は、文献での実験報告が示す拡散係数値と良好な一致を示しており、非整数階微分による拡散モデルによって異常拡散の現象を再現できることが示された。

4. 非整数階微分を導入した Langevin 方程式による異常拡散モデル

粒子の拡散運動を記述する方法としては、変位や速度の確率遷移の時間発展として拡散方程式の形で記述する方法と、粒子に作用する力学的な運動論による Langevin 方程式の形で記述する方法がある。ここでは、Langevin 方程式による粒子の拡散運動の記述において、時間に関して非整数階微分を導入した Fractional Langevin 方程式を考える。時間に関して非整数階微分を導入することは、履歴性を持った粘性抵抗力和時間に関して相関を持つ揺動力を粒子に作用されることになる。この Fractional Langevin 方程式を解析的に解くことによって、この方程式で記述される粒子の運動が異常拡散となることを示す。ここで紹介する内容は文献 7,10 に基づいている。

4. 1 Langevin 方程式に基づく粒子運動の記述

粘性を持った媒体の中を，球形の粒子が運動する場合を考える．粒子が受ける力としては，媒体の粘性がもたらす粘性抵抗力，媒体の分子が粒子に衝突することによって生じる揺動力，および，ポテンシャル等によって生じる外力が考えられる．質量 m の粒子に，粘性抵抗力 $F_v(t)$ ，揺動力 $F_r(t)$ ，および外力 $F_e(t)$ が作用するとき，この粒子についての Newton 力学的な運動方程式は，一次元の問題で考えて，時刻 t における粒子の変位を $x(t)$ ，速度を $v(t)$ とすると，

$$m \frac{d^2}{dt^2} x(t) = F_v(t) + F_r(t) + F_e(t) \quad (4.1)$$

として記述される．一般に，揺動力は確率分布を持った関数として扱われることが多いため確率微分方程式となり，このような粒子運動の方程式は Langevin 方程式と呼ばれている[5]．ここでは，外力が作用しない場合（すなわち $F_e(t)=0$ ）の粒子の運動を対象にして考えることにする．

（１）Brown 運動の Langevin 方程式

粒子に作用する粘性抵抗力について Stokes の法則が適用できるものとする．媒体の粘性抵抗を η としたとき，速度に比例する抵抗力となり $F_v(t)=-\eta v$ である．また揺動力については，時間に無相関な Gaussian Noise の確率的な力 $f(t)$ が作用するのとして $F_r(t)=f(t)$ とする．揺動力のアンサンブル平均は $\langle f(t) \rangle = 0$ であり，時間相関は $\langle f(t_1)f(t_2) \rangle = 2M\delta(t_1-t_2)$ である．このとき，粒子運動の Langevin 方程式は以下である．

$$\begin{cases} m \frac{d}{dt} v(t) = -\eta v(t) + f(t) \\ \frac{d}{dt} x(t) = v(t) \end{cases} \quad (4.2)$$

この場合は，Brown 運動を記述する最も基本的な Langevin 方程式である[5]．

（２）非整数階微分を導入した Fractional Langevin 方程式

式(4.2)に示されるような Langevin 方程式は，時間についての微分方程式であるが，時間微分について非整数階微分を導入した Langevin 方程式が考えられている[6]．時間微分に非整数階微分を適用することは，粒子に作用する力に対して時間に関する記憶性の効果を入れることになり，このことにより履歴性のある粘性抵抗力と時間相関のある揺動力を伴った粒子の運動を考えることになる．

時間に対して非整数階微分を適用した Langevin 方程式は次のようになる．

$$\begin{cases} \frac{d^\alpha}{(dt)^\alpha} [v(t)] = -\lambda v(t) + \frac{f(t)}{m} \\ \frac{d^\beta}{(dt)^\beta} [x(t)] = v(t) \end{cases}, \quad (\lambda \equiv \eta/m, 0 < \alpha, \beta < 1) \quad (4.3)$$

ここで用いる非整数階微分は Caputo 定義によるものとし, α は速度 $v(t)$ に対する微分階数, β は変位 $x(t)$ に対する微分階数である.

時間微分を非整数階微分に拡張したことによるスケーリングを行っておく. 時間に関するスケーリングのパラメタとして $1/\lambda$ をとる. これは, 時間次元におけるフラクタル性の単位長さに相当する量として考えることができる. 非整数階の時間微分による実質的な時間の変化量を dT とすると, フラクタルにおけるスケーリングの関係から $dT = (1/\lambda)^{1-\alpha} (dt)^\alpha$ として評価することになるので, 速度と変位のそれぞれの微分において,

$$\frac{1}{(1/\lambda)^{1-\alpha}} \cdot \frac{d^\alpha}{(dt)^\alpha} v(t) = -\lambda v(t) + \frac{f(t)}{m} \quad (4.4)$$

および,

$$\frac{1}{(1/\lambda)^{1-\beta}} \cdot \frac{d^\beta}{(dt)^\beta} x(t) = v(t) \quad (4.5)$$

となるから, 式(4.3)について非整数階微分によるスケーリングを考慮した式は,

$$\begin{cases} \frac{d^\alpha}{(dt)^\alpha} v(t) = -\lambda^\alpha v(t) + \lambda^{(\alpha-1)} \frac{f(t)}{m} \\ \frac{d^\beta}{(dt)^\beta} x(t) = \lambda^{(\beta-1)} v(t) \end{cases}, \quad (\lambda \equiv \eta/m, 0 < \alpha, \beta < 1) \quad (4.6)$$

となる. 本稿ではこれを Fractional Langevin 方程式と呼ぶこととし, この方程式に基づいた粒子の運動を Fractional Brown 運動と呼ぶことにする. $\alpha=1$, $\beta=1$ のときは, Brown 運動の Langevin 方程式(4.2)に帰着することがわかる. 初期条件などの諸条件は以下とする.

$$\begin{cases} x(0) = x_0, \quad v(0) = v_0 \\ m \langle v_0^2 \rangle = k_B T \\ \langle f(t) \rangle = 0, \quad \langle f(t) f(0) \rangle = 2m\lambda k_B T \delta(t) \end{cases} \quad (4.7)$$

以降では、この Fractional Langevin 方程式を解析的に解いて、速度、変位、平均二乗距離、拡散係数についての解析解を導出し、この方程式に従う粒子運動の拡散特性を調べていくことにする。

4. 2 Fractional Langevin 方程式の解析

ここでは Laplace 変換による解法を用いることにする。Caputo 定義に基づく非整数階微分の Laplace 変換（演算子 L 、変数 s ）は次で与えられる。

$$L\left[\frac{d^\alpha}{(dt)^\alpha}F(t)\right] = s^\alpha \hat{F}(s) - s^{\alpha-1}F(0), \quad (0 < \alpha < 1) \quad (4.8)$$

このことを用いて、Fractional Langevin 方程式(4.6)について Laplace 変換を行って代数的に整理すると、

$$\begin{cases} \hat{v}(s) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + \lambda^\alpha} v_0 + \lambda^{(\alpha-1)} \frac{1}{s^\alpha + \lambda^\alpha} \frac{\hat{f}(s)}{m} \\ \hat{x}(s) = \frac{x_0}{s} + \lambda^{(\beta-1)} \frac{s^{\alpha-(\beta+1)}}{s^\alpha + \lambda^\alpha} v_0 + \lambda^{(\alpha+\beta-2)} \frac{s^{-\beta}}{s^\alpha + \lambda^\alpha} \frac{\hat{f}(s)}{m} \end{cases} \quad (4.9)$$

となる。次にこれを逆 Laplace 変換する。ここで、非整数のべき乗となる Laplace 変数を含んだ分数式についての逆 Laplace 変換は、Mittag-Leffler 関数

$$E_{\eta,\mu}[t] \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(\eta n + \mu)}, \quad (\eta > 0, \mu > 0) \quad (4.10)$$

を用いると、次のような関係で記述することができる[8].

$$L[t^{b-1}E_{a,b}[\pm At^a]] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pm A)^n}{\Gamma(an+b)} L[t^{an+b-1}] = \frac{1}{s^b} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\pm A}{s^a}\right)^n = \frac{s^{a-b}}{s^a \mp A} \quad (4.11)$$

従って、

$$\begin{aligned} L^{-1}\left[\frac{s^{a-b}}{s^a \mp A}\right] &= t^{b-1}E_{a,b}[\pm At^a] \\ (cf.) \quad a=b=1 &\Rightarrow L^{-1}\left[\frac{1}{s \mp A}\right] = E_{1,1}[\pm At] = \exp[\pm At] \end{aligned} \quad (4.12)$$

この関係を用いて、式(4.9)の逆 Laplace 変換を行うと、速度と変位の解析解は次のように得られる。

$$v(t) = v_0 E_{\alpha,1}[-(\lambda t)^\alpha] + \frac{1}{m} \int_0^t \{\lambda(t-t_1)\}^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}[-\{\lambda(t-t_1)\}^\alpha] f(t_1) dt_1 \quad (4.13)$$

$$x(t) = x_0 + v_0 \frac{1}{\lambda} (\lambda t)^\beta E_{\alpha,(\beta+1)}[-(\lambda t)^\alpha] + \frac{1}{m\lambda} \int_0^t \{\lambda(t-t_1)\}^{(\alpha+\beta-1)} E_{\alpha,(\alpha+\beta)}[-\{\lambda(t-t_1)\}^\alpha] f(t_1) dt_1 \quad (4.14)$$

この変位から、平均二乗変位と拡散係数の解析解を導出することができるが、ここでは結果のみを示しておく。(導出方法については文献7を参照頂きたい.)

得られる平均二乗変位は、

$$\begin{aligned} \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle &= \frac{k_B T}{m\lambda^2} \left\{ (\lambda t)^\beta E_{\alpha,(\beta+1)}[-(\lambda t)^\alpha] \right\}^2 \\ &\quad + \frac{2k_B T}{m\lambda} \int_0^t \left\{ (\lambda t_1)^{(\alpha+\beta-1)} E_{\alpha,(\alpha+\beta)}[-(\lambda t_1)^\alpha] \right\}^2 dt_1 \end{aligned} \quad (4.15)$$

であり、この平均二乗変位を時間微分することで、拡散係数は次のように計算できる。

$$\begin{aligned} D(\lambda t) &= \frac{k_B T}{m\lambda} \left[(\lambda t)^{2\beta-1} \left\{ E_{\alpha,(\beta+1)}[-(\lambda t)^\alpha] \right\} \left\{ E_{\alpha,\beta}[-(\lambda t)^\alpha] \right\} \right. \\ &\quad \left. + \left\{ (\lambda t)^{(\alpha+\beta-1)} E_{\alpha,(\alpha+\beta)}[-(\lambda t)^\alpha] \right\}^2 \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

ここで得られた変位、速度、平均二乗変位、拡散係数のそれぞれの解析解において、 $\alpha=1$, $\beta=1$ とした場合には、Brown運動の解析解と一致することは容易に確かめられる。

4. 3 Fractional Langevin 方程式が示す拡散特性

Fractional Langevin 方程式で記述される粒子の運動 (Fractional Brown 運動) が示す拡散特性について考察する。具体的には、得られた拡散係数の解析式(4.16)の挙動を調べる。以降では、Fractional Brown 運動での拡散係数は FBM(α, β)で表し、Brown 運動での拡散係数は BM で表すことにする。また、拡散係数の式(4.16)を無次元化するため $D_0 = k_B T / m\lambda$ とおく。

(1) 拡散係数の挙動

図 4.1 は、微分階数 α , β をパラメタとして、それぞれを 1.0 から 0.8 まで 0.05 毎に変化させた場合の FBM(α, β)の挙動を示した結果である。Brown 運動の拡散係数は、初期段階で立ち上がり増加し、時間が経過するにしたがって一定値に収束していく。Fractional Brown 運動について見てみ

ると、 $\alpha=\beta=1$ では BM に一致し、 $\alpha=\beta<1$ の場合には、初期の時間経過で立ち上がり増加した後、時間経過とともに拡散係数が減少していく。このような時間経過とともに拡散係数が減少していく現象は異常拡散が示す特徴的な挙動である。

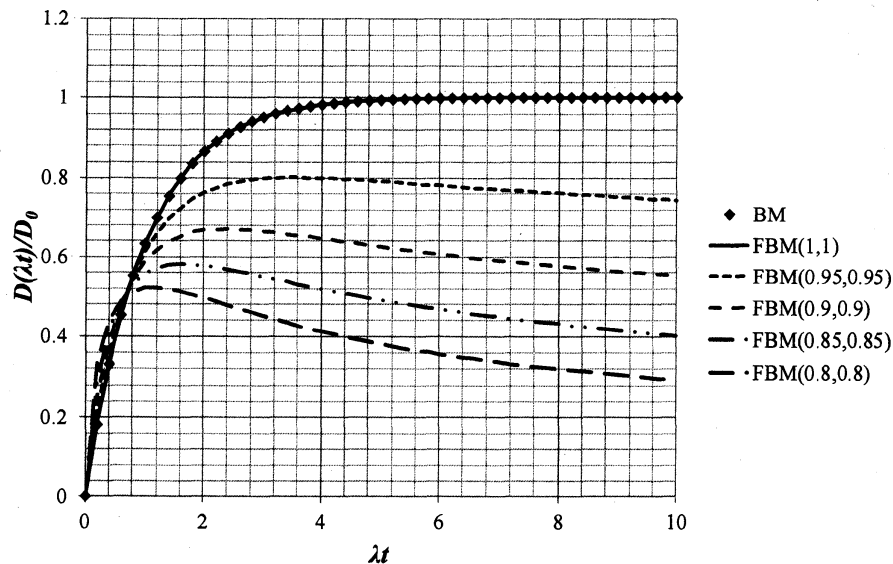


図 4.1. Fractional Brown 運動における拡散係数の挙動 [文献 7 より引用]

次に、非整数階の微分階数 α, β が拡散係数の挙動にどのように関係しているかについて調べる。図 4.2 は、微分階数 $\beta=1$ として固定し、微分階数 α を 1 から 0.8 まで 0.05 毎に変化させた場合の結果を示している。 $\alpha=1$ では BM に一致し、 α の値が小さくなっていくと、時間経過の初期段階では Brown 運動の値から減少する傾向を示すが、時間経過とともに Brown 運動の拡散係数の値に収束していく。このことから、微分階数 α は異常拡散となる過程には影響を与えないことがわかる。

同様に、図 4.3 は、微分階数 $\alpha=1$ として固定し、微分階数 β を 1 から 0.8 まで 0.05 毎に変化させた場合の結果を示している。 $\beta=1$ では BM に一致し、 $\beta<1$ の場合においては、時間経過とともに Brown 運動の値から減少していく異常拡散の振る舞いを示しており、 β の値が小さくなるにつれて、減少する量が大きくなっている。このことから、 β が異常拡散となる振る舞いについて支配的であることがわかる。

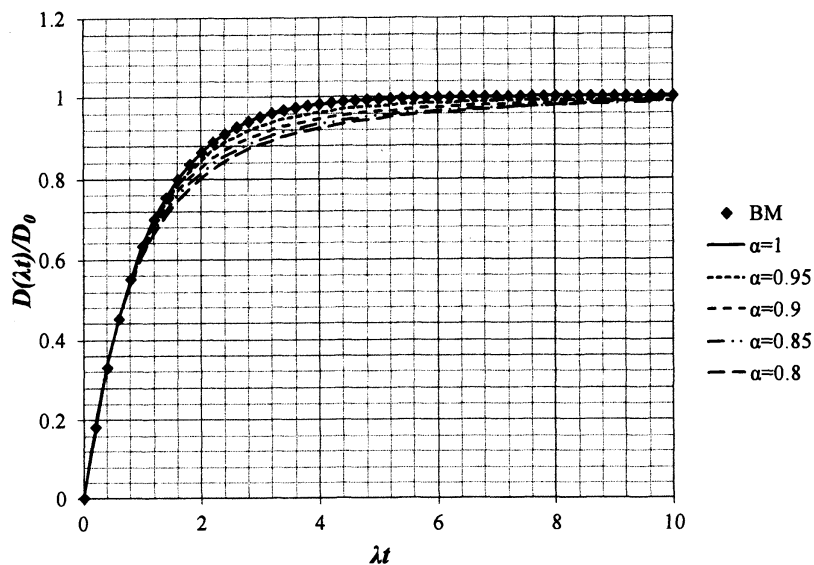


図 4.2. 拡散係数における微分階数 α の依存性 [文献 7 より引用]

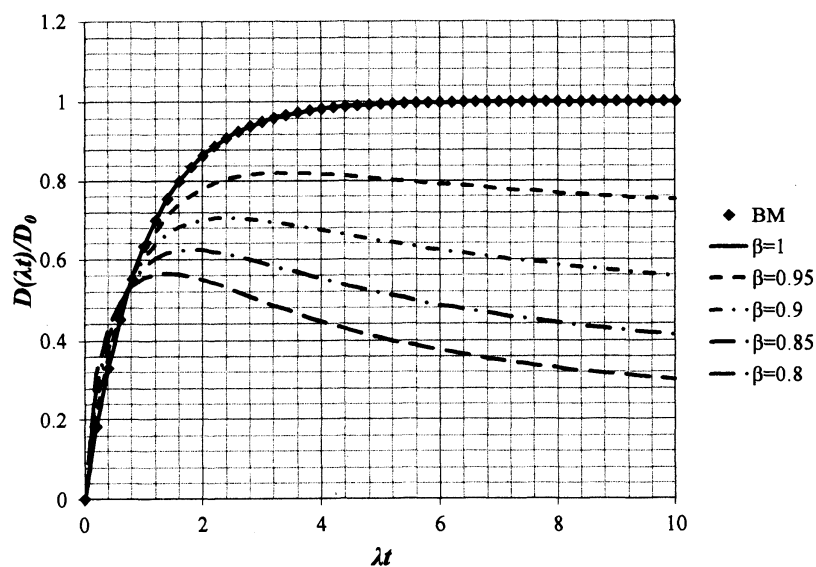


図 4.3. 拡散係数における微分階数 β の依存性 [文献 7 より引用]

(2) 拡散係数の漸近特性

緩和時間程度の短い時間経過の段階では、粒子は慣性力の影響を強く受け直線的に運動するが、時間経過とともに慣性力が減衰し、粘性抵抗力和揺動力との釣り合いの運動に移行していくものと考えられる。Brown 運動の長時間過程では、粘性抵抗力和揺動力との釣り合い $\eta v(t) = f(t)$ となり、このときの拡散係数は、 $D_0 = k_B T / m\lambda$ の一定値となる。

同様に, Fractional Brown 運動の長時間過程について考えてみる. Fractional Langevin 方程式(4.6)において, 慣性力が減衰(省略)して, 粘性抵抗力と揺動力とが釣り合った状態は,

$$\frac{d^\beta}{(dt)^\beta} [x(t)] = \lambda^{(\beta-2)} \frac{f(t)}{m}, \quad (\lambda = \eta/m, x(0) = x_0) \quad (4.17)$$

となり, このときは微分階数 β の非整数階微分方程式で記述されることになる. これを前で行った解析と同様に, Laplace 変換法を用いて解いていくと, 変位は,

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{m\lambda} \int_0^t \frac{\{\lambda(t-t_1)\}^{(\beta-1)}}{\Gamma(\beta)} f(t_1) dt_1 \quad (4.18)$$

となり, これから平均二乗変位は,

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \left\langle \left(\frac{1}{m\lambda} \int_0^t \frac{\{\lambda(t-t_1)\}^{(\beta-1)}}{\Gamma(\beta)} f(t_1) dt_1 \right)^2 \right\rangle = \frac{2k_B T}{m\lambda} \int_0^t \left(\frac{(\lambda t_1)^{(\beta-1)}}{\Gamma(\beta)} \right)^2 dt_1 \quad (4.19)$$

として得られる. また拡散係数は,

$$D(t) = D_0 \frac{(\lambda t)^{2(\beta-1)}}{\Gamma(\beta)^2} \quad (4.20)$$

と求めることができる. これは拡散係数が時間に関して $2(\beta-1)$ のべき乗関数となっており, $0 < \beta < 1$ であるから, 拡散係数は時間経過に対して減少することになる. 従って, Fractional Brown 運動における拡散は異常拡散になることを示している.

4. 4 まとめ

非整数階微分は過去からの履歴を積算する演算になっていることから, 粒子の運動を記述する方程式の時間微分に対して非整数階微分を導入することは, 履歴性のある力が作用する粒子の運動を記述することになる. 時間に関して非整数階微分を導入した Fractional Langevin 方程式による粒子の運動を考えて, そこから拡散係数の解析解を導出した. 得られた拡散係数は, 非整数階の微分階数を指数に持った時間のべき乗関数となることから, Fractional Langevin 方程式に基づく粒子の運動は異常拡散となる.

5. 空間非整数階微分の拡散方程式

フラクタル構造を持った不均質な媒体中での拡散においては、粒子の運動は媒体の幾何学的な構造の影響を受けて、連続的な媒体の場合とは異なった拡散特性を示すものと考えられる。ここでは、非定常一次元の拡散問題を取り上げ、通常の微分を用いた拡散方程式と空間に非整数階微分を導入した拡散方程式を数値的に解くことによって、連続的な均質媒体での拡散とフラクタル構造の不均質媒体での拡散特性の違いについて比較を行う。ここで紹介する内容は文献 9 を参考にしている。

5. 1 空間非整数階微分を導入した拡散方程式によるモデル化

拡散による輸送は、濃度等の物理量について、時間的な変化量と空間的な変化量との釣り合いとして定式化され、これは時間についての一階微分、空間についての二階微分による拡散方程式としてモデル化される。連続的な均質媒体中の拡散においては、時刻 t 、変位 x での濃度分布を $C(t, x)$ 、拡散係数を D としたとき、次の拡散方程式で記述することができる。

$$\frac{\partial}{\partial t} C(t, x) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(t, x) \quad (5.1)$$

これに対して、媒体としてフラクタル構造を持った不均質な媒体中での拡散を考える。連続的な均質媒体での物理量に関する空間の変化率は、その物理量の変化量についての距離の変化量に対する比の連続極限である微分として計算される。しかし、フラクタル構造を持った不均質な媒体中での距離に対する物理量の変化量は、媒体が有するフラクタル次元に関係してべき乗的に変化すると考えられるため、フラクタル構造体での物理量の変化率を計算する場合には、これまでの微分形式をそのまま用いることはできない。そこで、フラクタル構造体上での物理量の変化率の評価方法について、構造体が有するフラクタル次元に基づいた階数で微分を行う非整数階微分の考え方を導入する。

ここでは、次のような空間の微分に非整数階微分を導入した拡散方程式のモデル化を考える。

$$\frac{\partial}{\partial t} C(t, x) = D \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} C(t, x), \quad (1 < \alpha < 2) \quad (5.2)$$

ここでの微分階数 α は、不均質媒体のフラクタル次元に相当するものと考えられる。

5. 2 非定常一次元の空間非整数階微分拡散方程式の数値計算

空間非整数階微分の拡散方程式がどのような拡散特性を示すかについて、数値計算を用いて調べることにする。

(1) 非整数階微分の差分式

空間についての非整数階微分を数値的に解く場合の差分式は、以下の Grünwald-Letnikov の定義に基づいた記述を用いることにする。

$$d_x^\alpha C(t, x) = \frac{1}{(\Delta x)^\alpha} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\Gamma(i-\alpha)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(i+1)} C(t, x-i \cdot \Delta x) \quad (5.3)$$

ここで、 $\Delta x = x/N$ の空間の差分幅としている。空間の非整数階微分についての計算はこの関係式(5.3)を用い、時間については通常の微分であるので、時間の差分幅を Δt として、前進差分法を用いることにすると、濃度 $C(t, x)$ についての時間発展は次式で計算することができる。

$$C(t + \Delta t, x) = C(t, x) + D \cdot (\Delta t) \cdot \left[d_x^\alpha C(t, x) \right] \quad (5.4)$$

(2) 数値計算の条件

数値計算における、時間、空間、拡散係数の各条件は表 5.1 のようにとる。

表 5.1. 数値計算の条件

時間 t	$t=0 \sim 0.5$	$\Delta t=0.025$
空間 x	$x=0 \sim 20$	$\Delta x=0.5$
拡散係数 D	$D=1$	

ここでの初期条件は以下とする。

$$C(0, x) = \begin{cases} 1 & (x=1) \\ 0 & (otherwise) \end{cases} \quad (5.5)$$

5. 3 数値計算の結果

通常微分の拡散方程式に基づく拡散を通常拡散とし、非整数階微分を導入した拡散方程式に基づく拡散をフラクタル拡散と呼ぶことにする。

図 5.1 に通常拡散について、図 5.2 から図 5.4 に微分階数 α を変えた条件でのフラクタル拡散について、 x 方向の濃度分布の時間推移 ($t=0.1$ から 0.5 までについて 0.1 毎) を両対数軸で示している。また図 5.5 には、 $t=0.5$ のときの、通常拡散($\alpha=2$ に相当)とフラクタル拡散について微分階数 α を 1.8 から 1.4 までについて 0.2 毎に変化させた場合の濃度分布を示している。

(1) 通常拡散とフラクタル拡散の比較

図 5.1 で示した通常拡散と、図 5.2 で示したフラクタル拡散 ($\alpha=1.8$) の場合について比較して

みる。通常拡散は、一般に知られているように Gauss 過程で拡散が進むので、濃度分布は指数関数的な拡散の特性を示している。これに対してフラクタル拡散の濃度分布は、両対数軸において直線的な分布となっている。これはフラクタル拡散の濃度分布がべき乗的な分布になっていることを示しており、 x 方向にすそ野が広がったロングテイルの特性を持った拡散過程になっていることがわかる。

(2) 微分階数の違いによるフラクタル拡散の比較

図 5.2 から図 5.4 では、フラクタル拡散における微分階数 α の違いによる濃度分布の時間推移が示されており、何れの場合にもべき乗的な分布を示している。

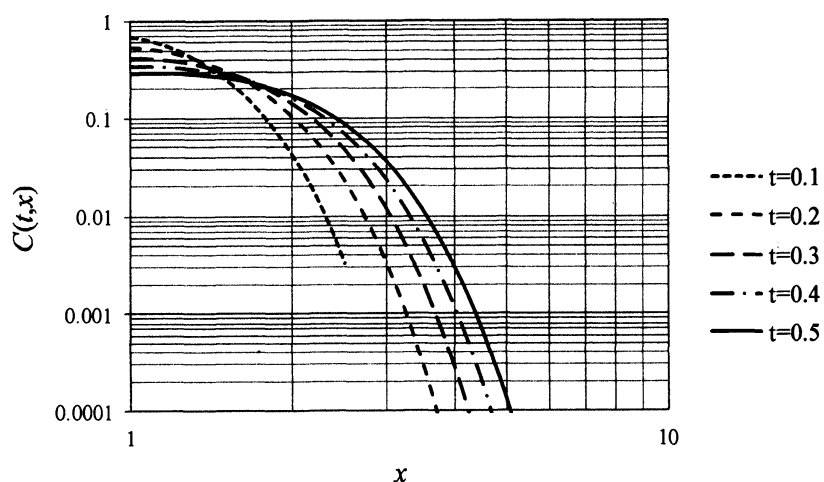


図 5.1. 通常拡散での濃度分布 ($\alpha=2.0$ に相当) [文献 9 より引用]

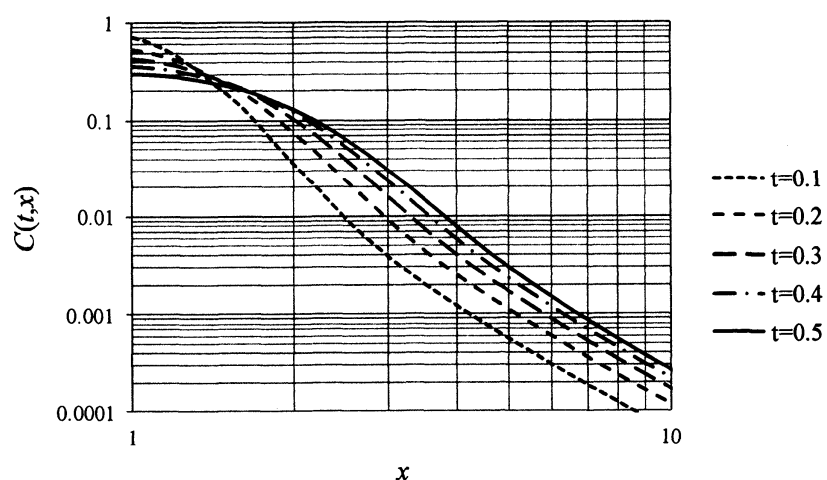


図 5.2. フラクタル拡散での濃度分布 ($\alpha=1.8$) [文献 9 より引用]

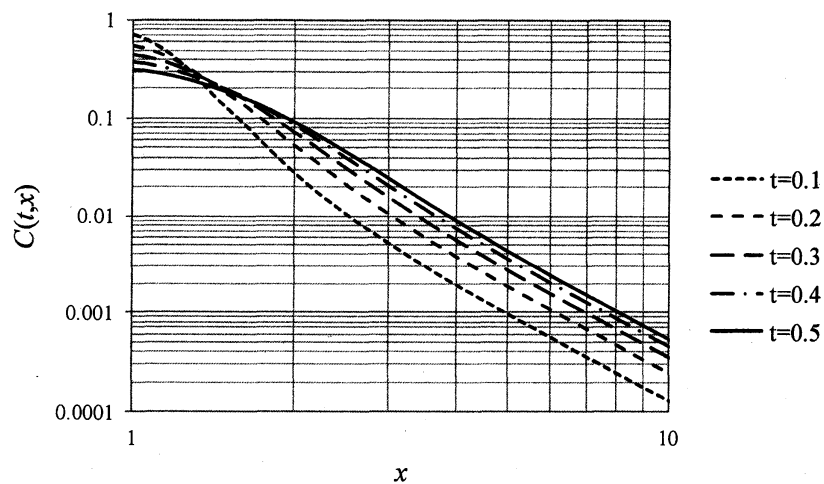


図 5.3. フラクタル拡散での濃度分布 ($\alpha=1.6$)

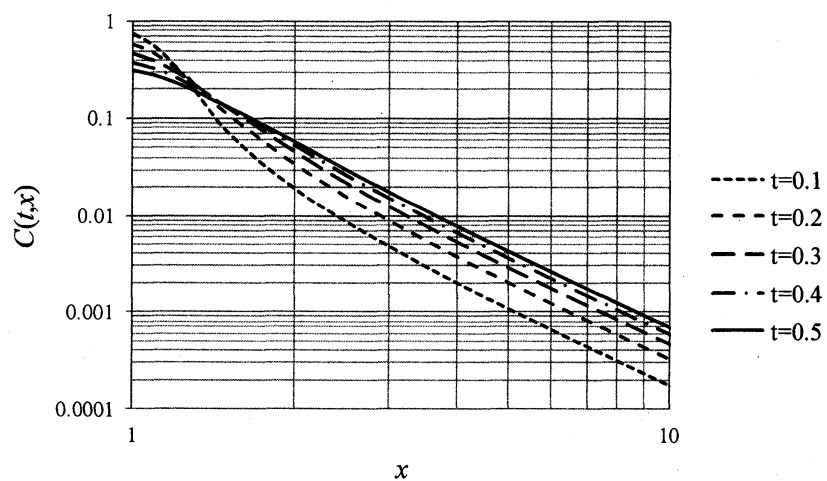


図 5.4. フラクタル拡散での濃度分布 ($\alpha=1.4$)

図 5.5 は、時刻 $t=0.5$ において、フラクタル拡散での微分階数の違いによる濃度分布を示しており、これから微分階数 α が拡散分布に及ぼす影響を見ることができる。通常拡散に近い (α が 2.0 に近い) $\alpha=1.8$ の場合では、 x が小さい領域では通常拡散に近い分布を示し、 x が大きくなるに従ってべき乗分布に推移していくが、 α が小さくなるにつれて、 x が小さい領域からべき乗分布を示していることがわかる。

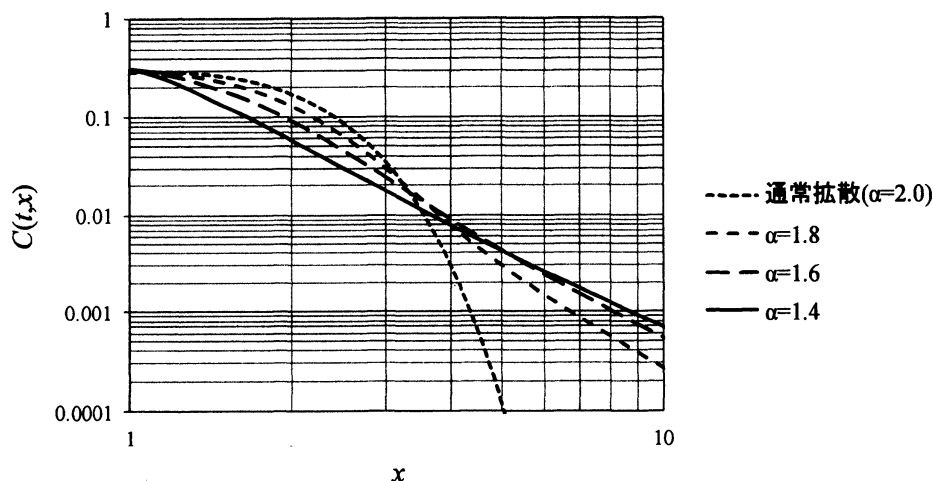


図 5.5. フラクタル拡散での微分階数に違いによる濃度分布の比較 ($t=0.5$)

5. 4 まとめ

フラクタル構造を持った不均質な媒体中での粒子の拡散においては、媒体の構造的な影響を受けることから、連続的な均質媒体の場合とは異なった拡散特性を示す。ここでは、 x 方向にフラクタル性を有するような媒体を想定し、非定常次元の空間非整数階微分による拡散方程式のモデルを考えた。これを数値的に解いて、濃度分布の時間推移からフラクタル拡散と通常拡散との拡散特性の違いについて考察した。通常拡散が示す指数関数に基づいた拡散過程とは異なり、フラクタル拡散はべき乗的な分布を示す拡散特性を持つことが示された。

6. フラクタル構造をもった媒体中の拡散

濃度拡散の問題は、Fick の法則に基づいた流束についての輸送量の関係式から、時間的な変化量と空間的な変化量との釣り合いから拡散方程式として定式化される。Fick の法則は、距離に対する濃度勾配と拡散係数との積として計算されるが、媒体がフラクタル性を持った不均質な構造体の場合には、フラクタル性が示すスケーリングの特性をうまく扱えるモデルを考える必要がある。

ここでは、フラクタル構造体における Fick の法則での流束の計算方法として、媒体の持つフラクタル次元によってスケーリングされた実効拡散係数を用いる方法と、フラクタル構造体での濃度勾配をフラクタル次元に基づいた非整数階微分を導入する方法について考える。定常次元拡散の濃度分布を計算する問題を取り上げ、その場合は 2 つの方法が等価であることを解析的に示す。ここで紹介する内容は文献 10 に基づいている。

6. 1 フラクタル構造体の定常次元拡散

ここでは、厚さ L の無限平板の定常一次元拡散の濃度分布 $C(x)$ を求める問題を考える。境界条件を $C(0)=C_0$, $C(L)=C_1$ とし、媒体が連続体の場合の拡散係数を D_0 とする。媒体が連続体の場合の濃度分布の解は容易に計算できて、

$$C(x) = \left(\frac{x}{L}\right)(C_1 - C_0) + C_0 \quad (6.1)$$

として得られるが、媒体がフラクタル次元 α となるようなフラクタル構造体の場合にはどのようなようになるかについて考えていく。

この拡散問題を解くにあたり、拡散の流束について考えてみる。媒体が連続体の場合の流束 q_x は、Fick の法則から、

$$q_x = -D_0 \cdot \frac{d}{dx} C(x) \quad (6.2)$$

となる。ここでは定常問題として考えているので流束は一定となる。媒体がフラクタル構造体の場合において、Fick の法則での流束をどのように計算するかについて、ここでは、次の2つのモデルを対比して考えていくことにする。

(i) 実効拡散係数モデル

フラクタル構造を持った媒体が示す特有の実効拡散係数を考え、濃度勾配は通常微分に従い流束を計算する。

(ii) 非整数階微分モデル

媒体のフラクタル次元に対応した濃度勾配の変化率として非整数階微分を用いて流束を計算する。

以降では、この2つのモデルを用いて、先に示したフラクタル構造体の定常一次元拡散の問題を考えていく。

6. 2 実効拡散係数モデル

Fick の法則は濃度勾配と拡散係数との積として計算されるが、連続体のような均質媒体での拡散においては、拡散係数は定数として扱われる。これに対して、フラクタル構造体での拡散の場合には、媒体のフラクタル構造からもたらされるスケーリング特性から、拡散係数を定数とすることができない。そのため、フラクタル構造体の場合には、流束が通過する断面積や拡散距離をフラクタル次元に基づいた実質的な計量にスケーリングして、実効的な拡散係数を考えることで、フラクタル構造体での拡散問題を考える。つまり、フラクタル構造体における Fick の法則での流

束の計算方法として、濃度分布を $C(x)$ 、フラクタル構造体の実効拡散係数を D_x^F としたとき、この場合の流束 q_x は、

$$q_x = -D_x^F \cdot \frac{d}{dx} C(x) \quad (6.3)$$

である。

(1) 実効拡散係数

ここでのフラクタル構造体は、フラクタル性が満たされる単位長さを l としたとき、一辺 l の立方体の集合体として考えることにする。立体構成として、フラクタル断面を持った断片が直列に並んだ構造体として考え、構造体の x - y - z 方向についての長さは L_x , L_y , L_z とする。構造体におけるフラクタル性は等方的であるものとする (図 6.1 を参照)。

このフラクタル構造体での x 方向の拡散について考える。連続体の場合、流束は、 x 方向に垂直な y - z 面の断面積 $A_{yz}(=L_y L_z)$ を持つ断面を、 x 方向に距離 L_x だけ輸送されることになる。フラクタル構造体の場合の流束は、 x 方向に垂直な y - z 面の断面積 A_{yz}^F を持つフラクタル断面を、 x 方向に実効的な拡散距離 L_x^F だけ輸送されるものと考え、伝熱工学などで知られている直列平板の有効熱伝導率を計算する方法のアナロジーから、もとの媒体の拡散係数を D_0 とすると、

$$\frac{L_x}{A_{yz} \cdot D_x^F} = \frac{L_x^F}{A_{yz}^F \cdot D_0} \quad (6.4)$$

という関係が得られ、このとき、 x 方向の実効拡散係数 D_x^F は、

$$D_x^F = D_0 \frac{A_{yz}^F}{A_{yz}} \frac{L_x}{L_x^F} \quad (6.5)$$

として考えることができる。 A_{yz}^F/A_{yz} は連続体からの媒体構造の空隙性の比率を、 L_x/L_x^F は連続体から拡散経路が媒体の構造によって歪曲される比率を示しており、これらの比率は、対象とするフラクタル構造体の幾何学的な条件から決まる。実効拡散係数は、これらの比率によって、連続体での拡散係数 D_0 からの減衰度合いが決まることになる。

ここで、実質的な x 方向の拡散距離 L_x^F と断面積 A_{yz}^F について、フラクタル性が示すスケーリングの関係から考えてみる。フラクタル次元 α を持つフラクタル曲線の実質的な長さ X は、フラクタル曲線の差し渡しの代表長さを L 、単位長さ l でフラクタル曲線を被覆するとき、 $X = L^\alpha l^{1-\alpha} = (L/l)^\alpha l$ という関係になる。このスケール関係を、実質的な拡散距離 L_x^F の場合に当てはめて考えてみると、 x 方向のフラクタル次元を α_x として、差し渡しの代表長さは L_x であるから、

$$L_x^F = \left(\frac{L_x}{l} \right)^{\alpha_x} l \quad (6.6)$$

として見積もることになる。フラクタルにおけるこのようなスケール関係は、長さを面積とよみかえても同様の関係が成り立つ。実質的な断面積 A_{yz}^F について、単位面積 l^2 に対して、 y - z 断面のフラクタル次元を α_{yz} とすると、

$$A_{yz}^F = \left(\frac{L_{yz}}{l} \right)^{\alpha_{yz}} l^2, \quad L_{yz} = \sqrt{L_y L_z} \quad (6.7)$$

ここで L_{yz} は、 $L_y \neq L_z$ となる場合において、 A_{yz} 断面の断面積と等しくなるような見かけの正方形の一边を表している。式(6.6)と式(6.7)を式(6.5)に代入して整理すると、 x 方向の実効拡散係数は、

$$D_x^F = D_0 \left(\frac{L_{yz}}{l} \right)^{\alpha_{yz}-2} \left(\frac{L_x}{l} \right)^{1-\alpha_x} \quad (6.8)$$

となる。連続体の場合は $\alpha_{yz}=2$ 、 $\alpha_x=1$ であるから、 $D_x^F=D_0$ となる。

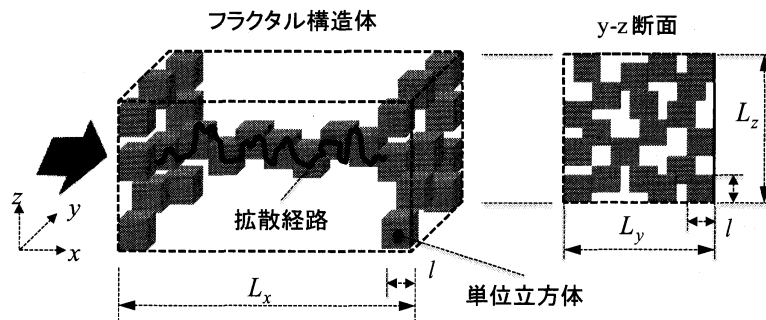


図 6.1 フラクタル構造を持った媒体のモデル [文献 10 より一部引用]

(2) 実効拡散係数に基づいた拡散方程式

長さ x のフラクタル構造体について、単位長さ l (フラクタルでのセグメント長)、フラクタル次元を α としたとき、式(6.8)で示した結果から実効拡散係数 D_x^F は、

$$D_x^F = D_0 \frac{A_{yz}^F}{A_{yz}} \left(\frac{x}{l} \right)^{1-\alpha} \quad (6.9)$$

となり、これは x のべき乗関数になっていることがわかる。コントロールボリュームとして考える断面積はバルクの断面積の A_{yz} であるから、このときの拡散流量 Q_x は、

$$Q_x = A_{yz} \cdot D_x^F \frac{d}{dx} C(x) = A_{yz}^F \cdot D_0 \left(\frac{x}{l} \right)^{1-\alpha} \frac{d}{dx} C(x) \quad (6.10)$$

となる。従って、フラクタル断面積あたりの流束 q_x は、

$$q_x = \frac{Q_x}{A_{yz}^F} = D_0 \left(\frac{x}{l} \right)^{1-\alpha} \frac{d}{dx} C(x) \quad (6.11)$$

である。流束一定の条件から A を定数として、境界条件 $C(0)=C_0$ を考慮すると、解くべき拡散方程式は、

$$D^F \frac{d}{dx} [C(x) - C_0] = D_0 \left(\frac{x}{l} \right)^{1-\alpha} \frac{d}{dx} [C(x) - C_0] = A \quad (6.12)$$

であり、これは実効拡散係数を用いた通常微分の拡散方程式になる。この式を x について積分して、境界条件 $C(L)=C_1$ を用いると、求める濃度分布の解は、

$$C(x) = \left(\frac{x}{L} \right)^\alpha (C_1 - C_0) + C_0 \quad (6.13)$$

となり、 x のべき乗関数となっている。連続体の場合は $\alpha=1$ として、良く知られた一次関数の解になる。

6. 3 非整数階微分モデル

フラクタル構造を持った系の上での濃度勾配を考える場合、距離がフラクタル次元に関してべき乗的に変化することを考えなくてはならない。そこで、フラクタル構造体における Fick の法則での流束において、フラクタル長さに対応した濃度勾配を計算する方法として、非整数階微分を用いることにする。濃度分布を $C(x)$ 、もとの媒体の拡散係数を D_0 、 x 方向のフラクタル次元を α としたとき、この場合の流束 q_x は、非整数階微分を用いて、

$$q_x = -D_0 \cdot \frac{d^\alpha}{(dx)^\alpha} C(x) \quad (6.14)$$

として評価する。

(1) 非整数階微分に基づいた拡散方程式

まず流束の計算に非整数階微分を導入することによって生じるスケーリングについて考えておく。通常の空間微分における空間変化量は dx であるが、非整数階の空間微分では、空間変化量がフラクタル次元に基づいた微分階数によってべき乗的にスケーリングされることになる。フラクタル次元（微分階数） α 、代表長さが dx としたとき、空間に関する単位長さを l にとり、非整数階の空間微分による実質的な空間変化量を dX とすると、フラクタルのスケーリングの関係から $dX=l^{1-\alpha}(dx)^\alpha$ として評価することになる。このスケールを用いて、コントロールボリュームで考える断面積はフラクタル断面積 A_{yz}^F であるから、このときの流量 Q_x は、

$$Q_x = A_{yz}^F \cdot D_0 \cdot \frac{d^\alpha}{l^{1-\alpha} (dx)^\alpha} C(x) \quad (6.15)$$

となる。従って、フラクタル断面積あたりの流束 q_x は、

$$q_x = \frac{Q_x}{A_{yz}^F} = \frac{D_0}{l^{1-\alpha}} \cdot \frac{d^\alpha}{(dx)^\alpha} C(x) \quad (6.16)$$

である。流束一定の条件から A は定数として、境界条件 $C(0)=C_0$ を考慮すると、解くべき拡散方程式は、

$$\frac{D_0}{l^{1-\alpha}} \cdot \frac{d^\alpha}{(dx)^\alpha} [C(x) - C_0] = A \quad (6.17)$$

であり、これは非整数階微分を用いた α 階微分の拡散方程式である。変数 x に関する非整数階積分は、R-L 定義に基づいて計算を行っていくと、

$$\frac{d^{-\alpha}}{(dx)^{-\alpha}} [A] = \frac{A}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x-u)^{\alpha-1} du = \frac{-A}{\alpha\Gamma(\alpha)} \left[(x-u)^\alpha \right]_0^x = \frac{A}{\Gamma(\alpha+1)} \cdot x^\alpha \quad (6.18)$$

であるから、この結果を用いて式(6.17)について計算を行うと、

$$C(x) - C_0 = \frac{l^{\alpha-1}}{D_0} \cdot \frac{d^{-\alpha}}{(dx)^{-\alpha}} [A] = A \cdot \frac{l^{1-\alpha} x^\alpha}{D_0 \Gamma(\alpha+1)} \quad (6.19)$$

となる。境界条件 $C(L)=C_1$ から、積分定数は、

$$A = \frac{D_0 \Gamma(\alpha+1) (C_1 - C_0)}{l^{1-\alpha} L^\alpha} \quad (6.20)$$

となる。従って、これらの結果から、求める濃度分布の解は以下となる。

$$C(x) = \left(\frac{x}{L}\right)^\alpha (C_1 - C_0) + C_0 \quad (6.21)$$

結果からわかるように、ここで得られた解は、先に示した実効拡散係数モデルに基づいた拡散方程式から得られた解の式(6.13)と一致しており、このことは実効拡散係数モデルと非整数階微分モデルはこの問題において等価であることを示している。従って、非整数階微分を用いたモデルは、フラクタル構造体での拡散問題の解法になっていると考えることができる。

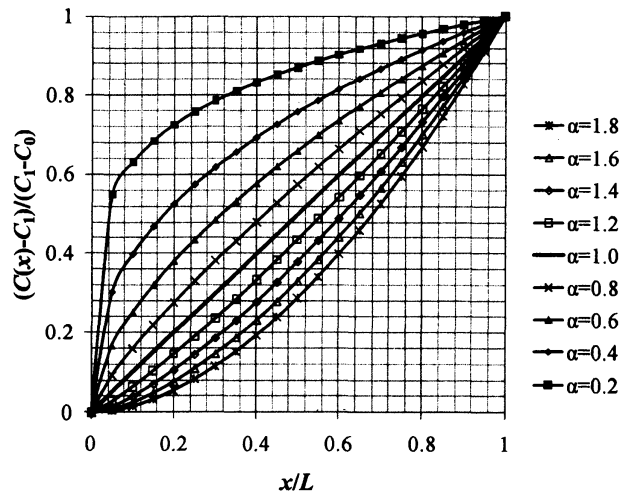


図 6.2 濃度分布とフラクタル次元との関係 [文献 10 より引用]

(2) 2つのモデルの関係

非整数階微分モデルでの拡散流量は、フラクタル系上での実質的な長さの微分を dX とすると、この場合の拡散流が通過する断面積は A_{yz}^F であるから、

$$Q_x = -A_{yz}^F \cdot D_0 \cdot \frac{d}{dX} C(x) \quad (6.22)$$

である。このとき、フラクタルのスケール関係から、 $dX = l^{1-\alpha} (dx)^\alpha$ である。フラクタル系での変化率は、 ΔC に対する ΔX の比として考えることができるので、 ΔX についてのスケール関係に留意すると、

$$A_{yz}^F \cdot D_0 \cdot \frac{\Delta C}{\Delta X} = A_{yz}^F \cdot D_0 \cdot \frac{\Delta C}{l^{1-\alpha} (\Delta x)^\alpha} = A_{yz}^F \cdot D_0 \cdot \left(\frac{\Delta x}{l}\right)^{1-\alpha} \frac{\Delta C}{\Delta x} \quad (6.23)$$

のように変形することができる。他方、実効拡散係数モデルでの拡散流量は、実効拡散係数 D_x^F を用いて、この場合の拡散流が通過する断面積は A_{yz} であるから、

$$Q_x = -A_{yz} \cdot D_x^F \cdot \frac{d}{dx} C(x) \quad (6.24)$$

である。同様に、連続系での変化率は、 ΔC に対する Δx の比として考えることができるので、

$$A_{yz} \cdot D_x^F \cdot \frac{\Delta C}{\Delta x} \quad (6.25)$$

である。ここで2つのモデルの拡散流量が等しいとすると、

$$A_{yz}^F \cdot D_0 \cdot \left(\frac{\Delta x}{l}\right)^{1-\alpha} \frac{\Delta C}{\Delta x} = A_{yz} \cdot D_x^F \cdot \frac{\Delta C}{\Delta x} \quad (6.26)$$

となる。これを D_x^F について解いて、 $\Delta x \rightarrow x$ とすると、実効拡散係数 D_x^F は、

$$D_x^F = D_0 \frac{A_{yz}^F}{A_{yz}} \left(\frac{x}{l}\right)^{1-\alpha} \quad (6.27)$$

となり、これは、式(6.9)で示したフラクタル構造体モデルから導いた結果と一致している。つまり、2つのモデルが等しいならば実効拡散係数は式(6.9)のように決まり、逆に、実効拡散係数を式(6.9)のように取るならば2つのモデルは等しくなる。

6. 4 まとめ

フラクタル性を持った不均質な媒体中での拡散問題に対して、ここではフラクタル特性を考慮した Fick の法則の評価方法として、媒体の持つフラクタル次元によってスケーリングされた実効拡散係数を用いる方法と、フラクタル構造体での濃度勾配をフラクタル次元に基づいた非整数階微分を導入する方法について考えた。対象として定常一次元拡散といったシンプルな問題ではあるが、双方の解析解を求めることで、2つの方法が等価であることを示し、非整数階微分モデルがフラクタル構造体での拡散問題の解法になっていることを示した。

7. おわりに

従来の拡散方程式において、時間発展におけるフラクタル性については時間微分に非整数階微分を導入することで、また拡散する媒体が幾何学的なフラクタル性を持つような場合には空間微分に非整数階微分を導入することで、異常拡散をモデル化する方法について紹介した。時間・空

間で非整数階微分を導入した拡散方程式と、拡散媒体の構造（フラクタル性）との関係性についてはまだ明確になっていないことが多く、また整数階微積分の体系自体においても、数学的に整備されていない点も残されている。しかしながら、このような非整数階微分による拡散過程のモデル化は、複雑なマルチスケール構造を持った媒体中の拡散問題を数学的に扱うための一つのアプローチとしてとらえることができる。今後、様々な具体的な事例について応用されて、画像情報等を用いた媒体の構造特性の解析や、観測される拡散特性との関係性が調べられていくことで、異常拡散の発生メカニズムの解明が進められるとともに、非整数階微分による拡散モデルの適用可能性が広がっていくことが期待される。

参考文献

- [1] Y. Hatano and N. Hatano, “Dispersive transport of ions in column experiments: An explanation of long-tailed profiles,” WATER RESOURCES RESEARCH, VOL.34, NO.5, PAGES 1027-1033, MAY 1998.
- [2] 羽田野, カラム試験における異常拡散現象とモデリング, 土木学会水理委員会水文部会・地中環境水文学研究グループ 2000 年夏の研究集会, 2000.
- [3] Ralf METZLER and Joseph KLAFTER, “THE RANDOM WALKS GUIDE TO ANOMALOUS DIFFUSION: A FRACTIONAL DYNAMICS APPROACH,” Physics Reports 339, pp.1-77, 2000.
- [4] Akiko Masuda et al. , “Direct observation of spatiotemporal dependence of anomalous diffusion in inhomogeneous fluid by sampling-volume-controlled fluorescence correlation spectroscopy,” Physical Review E, vol.72, pp.060101-1-4, 2005.
- [5] 湯川秀樹監修, 戸田盛和・久保亮五編集, 現代物理学の基礎[第 2 版] 5 統計物理学, 岩波書店, 1978.
- [6] V. Kobelev and E. Romanov, “Fractional Langevin equation to describe anomalous diffusion,” Prog. Theor. Phys. Supp. 139, pp.470-476, 2000.
- [7] 島本憲夫, “非整数階微分ランジュバン方程式における拡散特性の解析,” 信学論 Vol.94-A, No.12, pp.932-940, 2011.
- [8] Bruce J. West, Mauro Bologna, Paolo Grigolini, Physics of Fractal Operators, Springer, 2003.
- [9] 島本憲夫, “不均質媒質における拡散現象の非整数階微分方程式によるモデル化, シミュレーション,” 数学セミナー, vol.12, pp.60-64, 2011.
- [10] 島本憲夫, 非整数階微分によるフラクタル構造体の輸送特性のモデリング, 博士論文(東京大学), 2011.