1版

様　式　Ｆ－１９－２

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　６ 月　３ 日現在

機関番号：１２６０１

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化）

研究期間：2018～2018

課題番号：１７ＫＫ００８６

研究課題名（和文）数理生物学に現れるモデル方程式に対する分岐理論の視点からの定性的研究

研究課題名（英文）Qualitative study on model equations arising in mathematical biology from a viewpoint of the bifurcation theory

研究代表者

宮本　安人（Miyamoto, Yasuhito）

東京大学・大学院数理科学研究科・准教授

研究者番号：９０３７４７４３

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　4,600,000円

渡航期間：　　６ヶ月

研究成果の概要（和文）：金属の腐食のメカニズムを解明するために，数理モデル（放物型偏微分方程式系）を構築し，その数値シミュレーションによって解の定性的性質の研究を行った．また，それを簡単化した偏微分方程式系に対して，数学的な解析を行った．
具体的には，現実の現象を全て考慮した数理モデルを構築し，数値シミュレーションを行った．そして，その数理モデルは複雑で解析的に取り扱うことが非常に困難であることから，まず，簡単化された数理モデルを1次元領域の上で考え，その数学的な解析を行った．
簡単化された数理モデルに対しては，実質的に1層ステファン問題と同じとなることから解の存在と一意性が従い，漸近挙動について詳細に調べた．

研究成果の学術的意義や社会的意義
金属の腐食現象のメカニズムを解明することによって，材料の劣化に対抗し，適切な材料の保護の方法を確立する手助けとなることが期待される．そして，それは使用済みの放射性廃棄物を詰めた容器の腐食の問題などに，応用が可能であると期待される．
また，数学的には，長い研究の歴史がある1層ステファン問題に対して，新しい結果（解の漸近挙動）を数学的に証明したこととなり，解の挙動に関して新たな視点を与えた．

研究成果の概要（英文）：We propose a mathematical model, which is a system of partial differential equations, in order to clarify the mechanism of corrosion of a material, and study qualitative properties of a solution by numerical simulation. We also study a simplified model mathematically.
Specifically, we construct a full model and do numerical simulations. Since the full model is difficult to analyze mathematically, we start to study a one-dimensional problem of a simplified equation and give a proof of mathematical properties.
The simplified model is equivalent to the classical one-phase Stefan problem, and hence the existence and uniqueness of solution hold. We also study an asymptotic behavior of the solution.

研究分野：偏微分方程式

キーワード：楕円型偏微分方程式　放物型偏微分方程式　分岐理論　自由境界問題　一層ステファン問題

様　式　Ｆ－１９－２

１．研究開始当初の背景

渡航前は，数理生物学に現れるモデル方程式の研究を予定していたが，諸事情により，金属の腐食現象を再現するモデル方程式の研究を行うこととなった．

使用済みの放射性廃棄物を詰めた容器などの腐食の進行度合いの長期的な予測は、腐食が物理的、化学的，物理的な複数の現象の組み合わせが原因で起こるために，一般的には非常に困難である．腐食の中で，孔食(pitting corrosion)と呼ばれる腐食がある．それは，材料に穴を生じさせたり，材料の内部に空洞を生じさせたりする局部的な腐食現象である．孔食は，材料に最もダメージを与える腐食現象の一つである．この腐食の現象を理解することは，材料の劣化のメカニズムを知ることに繋がる．また，そのメカニズムを知ることにより，材料の劣化に対抗し，適切な材料の保護の方法を確立する手助けとなることが期待される．

金属構造の長期的な性質の変化を知るために用いられるアプローチの一つとして，決定論的な数理モデルを利用したアプローチがある．その数理モデルとは，物理学的や化学的現象を基礎とする偏微分方程式系で，金属と外部環境の相互作用を記述する．この偏微分方程式系は，主に放物型方程式と呼ばれる偏微分方程式で記述され，それは長い研究の歴史がある．既に知られているそれらの研究を基礎として，この現象を数値解析的または数学的に研究することが可能となる．

２．研究の目的

この研究の目的は，ステンレス鋼内のピット伝播を再現する数理モデル（偏微分方程式系，特に放物型偏微分方程式と常微分方程式を連立させた方程式系の自由境界問題）を開発し，その数値解析的または数学的な研究を行うことである．数値解析的研究とは，数値シミュレーションによる方程式の解の定性的研究であり，数学的研究とは，解の存在と一意性などの基礎的な性質や，漸近挙動など時間大域的な挙動と解の形状に関する性質等を，数学的に証明することである．数理モデルの開発には，陽極溶解，拡散，移流，反応などの複雑な現象を考慮に入れる必要があり，それらの分野の理解や各現象に対する数理科学の視点からの貢献も，重要な目標となる．

３．研究の方法

具体的には，決定論的アプローチに基づき，物理的・化学的な現象を考慮に入れて，この現象を説明するための数理モデル（偏微分方程式系）を開発する．数学的視点からは，この数理モデルは，上記のように，放物型方程式系となることが予想される．また，この現象は境界が動くので自由境界問題となり．従って，この問題は，移流反応拡散系や常微分方程式系を含む１層ステファン問題（自由境界問題の一種）として識別することができる．この問題の数値シミュレーションには，有限体積法が適しており，それを用いてシミュレーションを行う．

まず，問題が複雑なため，空間１次元の問題から研究を開始することにした．空間１次元の場合は，ピット伝搬の様子を再現する効果的な数値スキームを比較的容易に作成することが可能であると予想できるからである．そして，さらに問題を簡単化するために，最初は，拡散のみを考慮した方程式の解析から研究を開始する．その後，徐々に様々な効果を考慮して，現実の現象に近づくように，段階的に数理モデルを開発する．従って，最初の段階では，拡散のみの効果を扱う極めて単純な方程式となる．方程式が単純であるため，比較的に解析しやすいので，さまざまな性質の数学的な証明が得られることが期待される．

一方，色々な条件を考慮した現実的な数理モデルに対しては，数学的な証明は難しいことが予想される．そのような数理モデルに対しては，数値シミュレーションを基礎にして，解の定性的研究を行う．また同時に，解の存在や一意性といった基礎的な性質の数学的証明にも取り組む．

４．研究成果

下記の主たる海外共同研究者の Danielle Hilhorst 氏や，研究協力者の Meriem Bouguezzi 氏，俣野博氏などにより，暫定的に数理モデルを構築し，その空間１次元問題に対して数値シミュレーションを行った．

また，拡散のみの効果を取り入れた簡単化した数理モデルに対して数値シミュレーションと数学的な解析を行った．簡単化したモデルに対しては，数値シミュレーションの結果から，任意の初期関数から方程式を解いた場合に，十分時間が経つと，自己相似解に何らかの意味での収束することが強く示唆された．そこで，この簡単化された数理モデルに対しては，解の存在と一意性，そしてそれらの解析や解の形状の解析に欠くことのできない，比較定理の証明が目標となった．

まず，簡単化された数理モデルに対しては，ある変数変換が存在し，それによって，古典的な１次元半直線領域における１層ステファン問題（１次元半直線上において定義され熱方程式を満たし，２つの境界では Neumann 境界条件とステファン境界条件を課した問題）に変換できることを明らかにした．１次元領域における１層ステファン問題は，１９５０年代より Avner Friedman により詳しく研究がなされており，解の存在と一意性が知られている．従って，それらの理論を適用することによって，この数理モデルに対しても解の存在と一意性が示された．次に，１つの境界で，ステファン境界条件を課していることから，比較定理が成り立つことが必ずしも自明ではない．実際に，１９５０年代の Friedman の論文では，比較定理は予想という形で述べられており未解決問題の一つとして挙げられていた．比較定理に関して，過去の研究を調査した結果，１９８０年代には証明されていることが分かった．従って，解析の基盤となる，解の存在・一意性・比較定理の３つの基礎的性質については問題なく使用して良いこととなった．

１層ステファン問題は，自己相似解を持ち，さらにその解は厳密な表示を持つことは以前より知られていた．また，任意の初期関数から方程式を解いた場合，自由境界が漸近的にどのように振る舞うかも，これまで盛んに研究されてきた．しかし，先行研究を調査した結果，解自身が漸近的にどのように振る舞うかの研究はされておらず，自己相似解への収束も知られていないと思われた．本研究では，自己相似形への収束という現象を発見し，その数学的証明に成功した．

これらの結果は，実質的には１層ステファン問題に対する結果となる．自己相似解への収束は，新しい結果で，興味深いと思われるが，さらに詳しい解の挙動は今後の課題となった．また，今後，現実の現象に近づけるべく，さまざまな現象を考慮に入れて，数理モデルを構築することになった．その数理モデルに対する数値シミュレーションによる解析と，数学的な解析も，今後の課題として残った．それらの課題に対して，今後も継続的にコンタクトをとり，研究を継続していくことを確認した．

５．主な発表論文等

現時点では，ありません．

６．研究組織

研究協力者

〔主たる渡航先の主たる海外共同研究者〕

研究協力者氏名：Danielle Hilhorst

ローマ字氏名：Danielle Hilhorst

所属研究機関名：Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS)　/ Université de Paris-Sud

部局名：Départment de Mathématiques d’Orsay

職名：Emeritus Directrice de recherche au CNRS

〔その他の研究協力者〕

研究協力者氏名：Chirstian Bataillon
ローマ字氏名：Chirstian Bataillon

研究協力者氏名：Meriem Bouguezzi
ローマ字氏名：Meriem Bouguezzi

研究協力者氏名：Florence Lequien
ローマ字氏名：Florence Lequien

研究協力者氏名：Fabien Rouillard
ローマ字氏名：Fabien Rouillard

研究協力者氏名：Jean-Francois Scheid
ローマ字氏名：Jean-Francois Scheid

研究協力者氏名：俣野　博
ローマ字氏名：Matano Hiroshi

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。