物質情報学 2（物理数学）　担当 谷村　平成 24 年度前期

ノート 1：数理モデルと微分方程式

Mathematical Models and Differential Equations

1　はじめに：この講義の狙いと進め方

・ 自然現象や社会現象を記述する数理モデルを定式化・分析・検討できるようになる.

・ 基本的な常微分方程式を解けるようになる. 相図を描いて解の大域的性質を調べる.

・ 典型的な偏微分方程式を導出し，その意味を理解する.

・ フーリエ解析の概念を理解し，フーリエ級数やフーリエ変換の計算ができるようになる.

・ 解の存在と一意性や，フーリエ級数の収束など数学的厳密性が必要となる部分は証明できないにしても，なぜそういう点に注意しなければならないかということは理解する.

講義の進め方：ときおり講義資料を配布するが，要点を記録・確認するためのメモにすぎない. 谷村は板書をたくさん書くが，なるべくちゃんとノートを取ることをお勧めする. プリント中の演習問題は講義を進める上でやってしまうこともあるが，自力で解けるかどうか，後で確認せよ. レポートと定期試験を合算して成績評価する. レポート課題にならなかった演習問題も自主的にやる方がよい. 教科書は指定しないが，シラバスに挙げた参考書などを買う・借りるなどして，自分に合った本を見つけてほしい. 講義資料はインターネットに公開する：

`http://www.phys.cs.is.nagoya-u.ac.jp/~tanimura/class/index.html`

2　システムとモデル

システム (系，system) とは，ある環境に置かれた，有限個あるいは無限個の要素の集まりであり，要素同士あるいは要素と環境の間で相互作用が働いている，ひとまとまりのもののことを言う.

システムの例：

・一人の人間（物質・細胞の集まりであり，呼吸や食事によって外部と物質のやりとりをし，視覚や聴覚で外部からの刺激を知覚し，移動し，声を出したり手足でものを動かしたりして他人や外部のものに働きかける.）

・社会（人間の集まりであり，人間同士の間でものやお金を交換したり友人や家族といった関係を構築し，人間以外の生物を飼ったり獲ったり食べたりし，地球上の物質を掘ったり燃やしたり形を変えたりし，太陽や大気などの環境の影響を受け，海や大気や他の生物に影響を与えている.）

・自動販売機（機械部品と電気回路の集まりであり，お金や商品や電力の出し入れがあり，外部からの命令に対して，商品やおつりなどを出す. 偽札・偽コインなどを判断する.）

演習 1-1. 自転車，ガソリンスタンド，地下鉄，発電所，生態系，太陽系はどんなシステムか. どんな要素が集まってできていて，どんな環境に置かれていて，どんな相互作用が働いているか，考察せよ. また，システムと呼べるものを列挙して，その要素・環境・相互作用の特徴を述べよ.

モデル (模型，model) とは，現実の問題のある側面だけに注目して抽出された単純な要素と，数学的分析・推論が可能な明晰な関係規則から成る，人工的なシステムのことを言う．

モデルの例：怒る犬のバケツモデル，原子の土星モデル，電気伝導のパチンコ玉モデル．

よいモデルの条件

(1) 単純・明快（$\leftrightarrow$ 複雑・曖昧）：数学的分析・推論・計算ができる．

(2) 現実との対応付けができる．(現実世界と無関係なものはモデルとは呼ばない．)

(3) なるべく多くのことがらに関して精確な予測ができる．

3 微分方程式でモデルを作る

・人口統計と将来予測

・将来を予測するためにはデータから法則性を見抜く必要がある．

・法則をモデルという形にまとめる．

・モデルを作ってみよう．人口推移のモデル．

・モデルを批判的に検討しよう．このモデルのどこがまずいのか？

・モデルを改良しよう．ヴェアフルストのモデル（ロジスティック方程式）．

・より複雑なシステムのモデルを作ろう．２種競合生物系のロトカ・ヴォルテラモデル．

・モデルの破綻に気をつけよう．微分方程式の解の一意性・存在が破綻するケース．雪崩のモデル

・モデルは便利だが万能ではない．

3.1 人口推移のモデル 1：等差モデル

時刻 t の人口を $N(t)$ とする．微分方程式でモデルを作る．ある時間経過 Δt の前後の人口の増加分は Δt に比例すると仮定する：

$$N(t+\Delta t) \;=\; N(t) + g\,\Delta t \tag{1}$$

Δt を限りなく 0 に近づける極限で

$$\lim_{\Delta t\to 0}\frac{N(t+\Delta t)-N(t)}{\Delta t} \;=\; \frac{dN}{dt} \tag{2}$$

によって，微分（導関数）が定義され，微分方程式

$$\frac{dN}{dt} \;=\; g \tag{3}$$

を得る．その解は

$$N(t) = N_0 + gt \tag{4}$$

人口は時間の一次関数（とくに $N_0 = 0$ なら線形関数）．

3.2 人口推移のモデル 2：マルサスのモデル

Malthus のモデル．現在の人口と経過時間に比例して人口は増えると仮定する：

$$\begin{aligned} N(t+\Delta t) &= N(t) + \gamma N(t)\Delta t \\ \frac{dN}{dt} &= \gamma N \end{aligned} \tag{5}$$

解は

$$N(t) = N_0\, e^{\gamma t} \tag{6}$$

人口は時間とともに指数関数的に増大．人口は一定時間ごとに倍々に増えていく．人口が 2 倍に増える時間 τ は,

$$e^{\gamma\tau} = 2, \qquad \tau = \frac{1}{\gamma}\,\log_e 2 = \frac{0.3010299}{\gamma} \tag{7}$$

3.3 ロジスティック方程式

logistic equation, Verhulst（ヴェアハルスト）の方程式とも呼ばれる．人口増加率 γ が定数だというマルサスの仮定はモデルとして粗すぎる点を反省．人口が多くなりすぎると，土地不足や食糧難のために人口増加率が減るのが自然だろうと考える．人口増加率 γ は定数ではなく，人口 N の関数

$$\gamma = \gamma_0\left(1 - \frac{N}{N_\infty}\right) \tag{8}$$

だとする．人口 N が N_∞ に近づくと増加率 γ は 0 に近づく．ロジスティック方程式は

$$\frac{dN}{dt} = \gamma_0\left(1 - \frac{N}{N_\infty}\right)N \tag{9}$$

ここで γ_0 と N_∞ は定数．解は

$$N(t) = \frac{N_\infty}{1 + e^{-\gamma_0 t}\left(\frac{N_\infty}{N_0} - 1\right)} \tag{10}$$

ただし，$N(0) = N_0$ とおいた．

ポイント：初期値問題という考え方．

チェックポイント：$t = 0$ のとき，$N(0) = N_0$ になること．$t \to \infty$ のとき $N(t) \to N_\infty$ となること．

大事なポイント：方程式を解かなくても，おおよそどんな解になるか見当をつける方法がある．相流の方法とか，定性的分析と呼ばれる．

演習 1-2. 微分方程式 (9) を解け．ただたんに (9) に (10) を代入して確かに (9) が成り立っていることを確認するのではなく，(9) から式変形によって (10) にたどり着け．

演習 1-3. 次の 3 通りの場合について関数 (10) のグラフを描け．初期値 N_0 が (i) $0 < N_0 < N_\infty$ を満たす場合，(ii) $N_0 = N_\infty$ を満たす場合，(iii) $N_0 > N_\infty$ を満たす場合．

3.4 ロトカ・ヴォルテラのモデル

Lotoka (1925), Volterra (1926). 2 種類の生物種の個体数の時間変化を記述するモデル．食うものと食われるもの．$x(t)$, $y(t)$ は時刻 t における 2 種類の個体数とする．連立方程式

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = \alpha x - \gamma xy, \\ \\ \dfrac{dy}{dt} = -\beta y + \delta xy \end{cases} \tag{11}$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は正の定数とする．

微分方程式を解く前に解の挙動の見当をつける．相図 (phase diagram) の方法．ベクトル場と相流 (phase flow)．長時間変化の傾向は？収束か？循環か？発散か？

演習 1-4. x と y のどちらが捕食者の数でどちらが被食者の数か？

演習 1-5. x, y の関数 $F(x,y)$ で，$x(t), y(t)$ が (11) を満たすならば任意の時刻 t に対して $F(x(t), y(t)) = F(x(0), y(0))$ が成り立つとき，関数 $F(x,y)$ を方程式 (11) の保存量 (conserved quantity) あるいは積分 (integral) と言う．方程式 (11) の保存量を見つけよ．

3.5 雪崩のモデル

雪玉の質量 $m(t)$ と速度 $v(t)$ に対する方程式

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}(mv) = mg \sin\theta, \\ \\ \dfrac{dm}{dt} = \mu v \end{cases} \tag{12}$$

g, θ, μ は正の定数とする．

演習 1-6.

$$\begin{cases} m(t) = \frac{1}{6}\mu g t^2 \sin\theta \\ v(t) = \frac{1}{3} g t \sin\theta \end{cases} \tag{13}$$

が (12) の解になっていることを確かめよ．また，初期条件 $m(0) = 0$, $v(0) = 0$ を満たす (12) の解は (13) の他にも無数にあるが，それらを求めよ．なぜ無限個の解があるのか考えよ．

一意性 (uniqueness) とは：あったとしても一つしかないこと（「ある」とは言っていないことに注意）．二つ以上はないこと．0 個または 1 個であること．例えば，四角形の外接円は一意的である．「一意的だ」からと言って「存在する」とは限らない．

解の一意性が破れるモデルは，答えが一つとは限らないのだから，予測能力が欠ける．

演習 1-7. 次の微分方程式を初期条件 $x(0) = 0$ の下で解け．ただし関数 $x(t)$ は $x(t) \geq 0$ を満たすとする．さらに，この方程式には，同じ初期条件を満たす無数の異なる解がある．それらを求めよ．

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{x} \tag{14}$$

3.6 解が存在しない微分方程式

演習 1-8. 次の微分方程式を解け．すべての時間 $-\infty < t < \infty$ にわたって解の関数 $x(t)$ がちゃんと定義できているとは限らない．初期条件 $x(0) = x_0$ を与えたとき，解 $x(t)$ が存在する t の範囲を示せ．

$$1)\quad \frac{dx}{dt} = x \tag{15}$$

$$2)\quad \frac{dx}{dt} = x^2 \tag{16}$$

存在 (existence) とは：あること．一つ以上あること．0 個ではないこと．例えば，どんな自然数 x に対しても $x < y$ となるような自然数 y が存在する．

解が存在しないモデルは，そもそも予測にならない．ある時刻から先は何が起こるかわからない．

演習 1-9. 「存在するが一意的ではないもの」,「一意的だが存在するとは限らないもの」,「存在し，かつ一意的なもの」の例をできるだけたくさん列挙せよ．

3.7 微分方程式で数理モデルを作るときに心得ておくべきこと

1. 微分方程式を解かなくてもモデルの意味を考えれば解の挙動はおおよそ見当がつく．相図などの定性的分析手段もある．解が想定どおりの挙動を示すか確認して，モデルの欠陥や計算間違いをチェックできる．
2. 微分方程式の解はただ一つとは限らない：解の一意性の問題．
3. 微分方程式の解は（すべての変数域に対して）存在するとは限らない：解の存在の問題．
4. 微分方程式の解は既知関数で書けるとは限らない：しかし，それは新しい関数を創造するチャンスでもある．