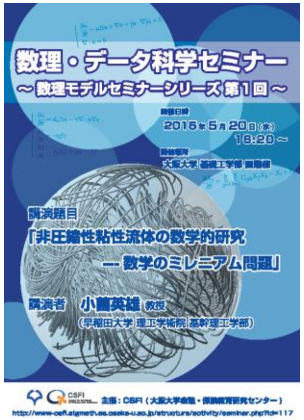
数理モデルに現れる階層の循環
～点渦系と物質輸送について

2015. 12. 23

鈴木　貴

大阪大学　数理･データ科学教育研究センター
数理モデリング部門主催　数理モデリングセミナーシリーズ



第1回
「非圧縮性粘性流体の数学的研究---数学のミレニアム問題」

講演者：小薗英雄 (早稲田大学 理工学術院 基幹理工学部)
日　時：2015年5月20日（水）16:20-17:50
場　所：大阪大学基礎工学部（豊中キャンパス）国際棟

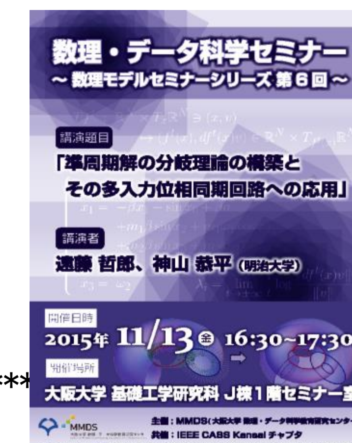
第2回
「超準解析による物理情報システムの形式検証
　　　　　ー離散から連続･ハイブリッドへ」
講演者： 蓮尾 一郎 (東京大学大学院情報理工学系研究科)
日　時：2015年6月12日（金）16：45-17：45
場　所：大阪大学基礎工学部（豊中キャンパス）国際棟

第3回　微分方程式セミナー共催
講演題目：「ラグランジュ的視点によるトポロジカル渦度ダイナミックス」
講演者：福本康秀 (九州大学マス･フォア･インダストリ研究所)
日　時：2015年7月17日（金）16:20-17:50
場　所：大阪大学基礎工学部（豊中キャンパス）国際棟

****
第4回
講演題目 :「クラスター分析の理論と研究動向」
講演者: 宮本 定明（筑波大学）
日時: 9月29日(火) 15:00-16:30
場　所 : 大阪大学基礎工学部（豊中キャンパス）国際棟

第5回
講演題目 :「Mathematical Applications in Drug Discovery and Development」
講演者: 豊柴博義 (武田薬品工業株式会社 医薬研究本部 基盤技術研究所)
日時: 10月16日（金）17 : 30〜18:30
場　所 : 大阪大学基礎工学部（豊中キャンパス）国際棟
****

****
第6回
講演題目 :「準周期解の分岐理論の構築とその多入力位相同期回路への応用」
講演者 : 遠藤　哲郎（明治大学）、神山　恭平（明治大学）
日　時 : 2015年11月13日（金）16:30−17:30
場　所 : 基礎工学研究科 J棟1階 セミナー室



第7回
講演題目 :「意思決定と協力行動における非加法性の表現と解釈」
講演者: 藤本　勝成（福島大学）
日　時: 12月4日（金）14:50−16:20
場　所 : 基礎工学研究科 J棟1階 セミナー室

第8回
講演題目 :「電磁場問題の数値解析」
講演者: 菊地　文雄　（東京大学名誉教授）
日　時: 2016年1月28日（木）16:30−18:00
場　所 : 大阪大学基礎工学部（豊中キャンパス）国際棟
****

Methods of Mathematical Modeling

1. Coarsening key factors

1) <u>supply - consumption</u>

$u_t = \alpha,\ v_t = -\beta$

2) <u>production - annihilation</u>

$u_t = \alpha u,\ v_t = -\beta v$

3) <u>transport</u>

$u_t = -\nabla \cdot j$

j... flux

4) <u>gradient</u>

$j = -d_u \nabla u$... diffusion

$j = d_v \nabla v$... chemotaxis

5) <u>chemical reaction</u>

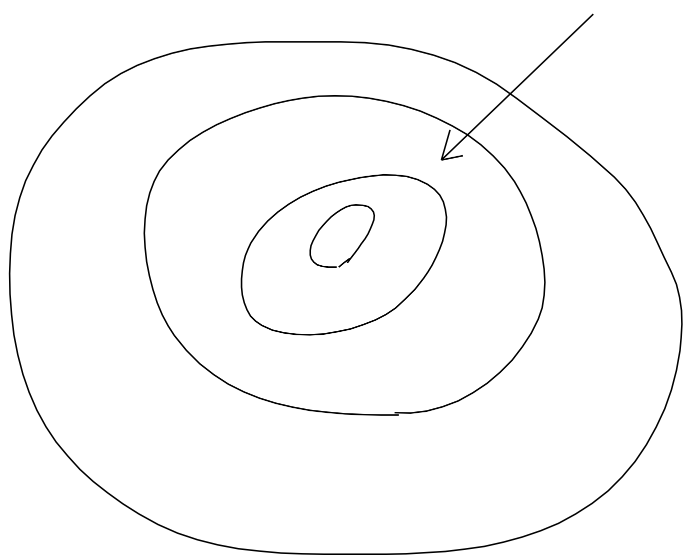
$A + B \to C\ (k)$

$\Rightarrow$ (mass action)

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B]$$

$$\frac{d[B]}{dt} = -k[A][B]$$

Mechanics
Fluid dynamics



$$u_t = D\Delta u$$

$$u_t = \nabla \cdot (D\nabla u)$$

$$u_t = \Delta(Du) \qquad ?$$

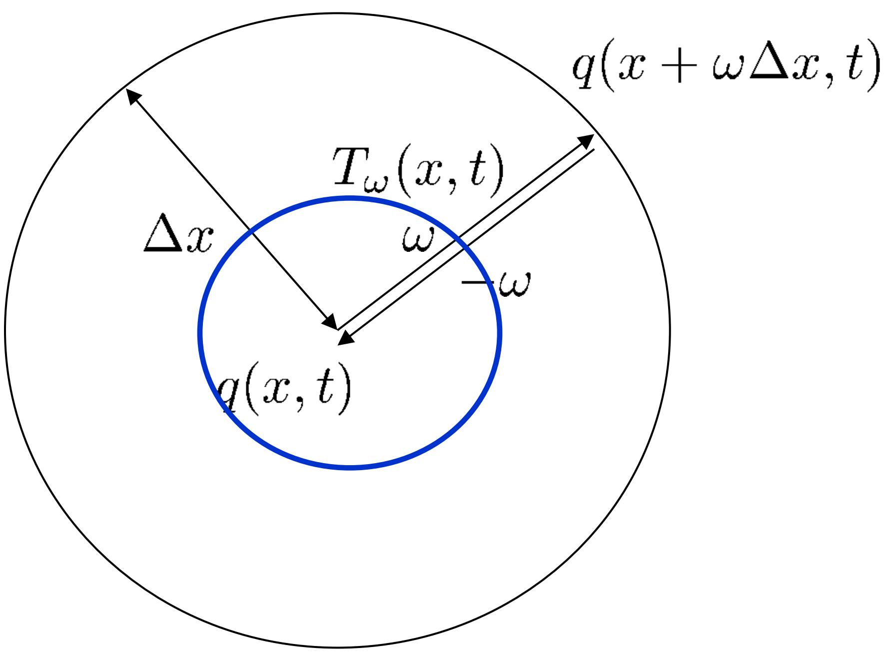
2. Averaging particle movements

Spatially-temporally continuous distribution function
Ichikawa-Rouzi-S. 12

$q = q(x,t)$ particle density

$T = T_\omega(x,t)$ transient probability

τ mean waiting time



Master equation

$$\frac{q(x,t+\Delta t)-q(x,t)}{\Delta t} =$$

$$\int_{S^{N-1}} T_{-\omega}(x+\omega\Delta x,t)q(x+\omega\Delta x,t)d\omega$$

$$-\int_{S^{N-1}} T_\omega(x,t)d\omega \cdot q(x,t)$$

renormalized barrier

$$\int_{S^{N-1}} T_\omega(x,t)d\omega = \tau^{-1}$$

$\Rightarrow$

$$\tau T_\omega(x,t) = \frac{T(x+\omega\frac{\Delta x}{2},t)}{\int_{S^{N-1}} T(x+\omega'\frac{\Delta x}{2},t)d\omega'}$$

$$T = T(x,t)$$

$\Rightarrow$ Smoluchowski equation

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D\nabla\cdot(\nabla q - q\nabla \log T)$$

diffusion coefficient

space dimension

$$\tau^{-1}(\Delta x)^2 = 2nD$$

Einstein formula

statistic mechanics $\longleftrightarrow$ thermodynamics

3. Realizing fundamental laws

system	consistency	dynamics	ensemble
isolated	energy	entropy	micro-canonical
closed	temperature	Helmholtz free energy	canonical
open	pressure	Gibbs free energy	grand-canonical

---

particle density **duality** **field potential**

Smoluchowski $\longleftrightarrow$ **Poisson**

$$u_t = \nabla \cdot (\nabla u - u\nabla v) \text{ in } \Omega \times (0,T)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} - u\frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 \text{ on } \partial\Omega \times (0,T)$$

$$-\Delta v = u - \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega u, \quad \left.\frac{\partial v}{\partial \nu}\right|_{\partial\Omega} = 0$$

$$\int_\Omega v = 0$$

$$\Leftrightarrow v = G * u = \int_\Omega G(\cdot, x')u(x')dx'$$

Legendre transformation

Helmholtz fee energy

$$\mathcal{F}(u) = \int_\Omega u(\log u - 1) - \frac{1}{2}\langle G * u, u\rangle$$

$$\delta\mathcal{F}(u) = \log u - G * u$$

Model (B) equation

$$u_t = \nabla u \cdot \nabla \delta\mathcal{F}(u), \quad \left.\frac{\partial}{\partial \nu}\delta\mathcal{F}(u)\right|_{\partial\Omega} = 0$$

S. Mean Field Theories and Dual Variation, 2nd edition, Atlantis Press, 2015

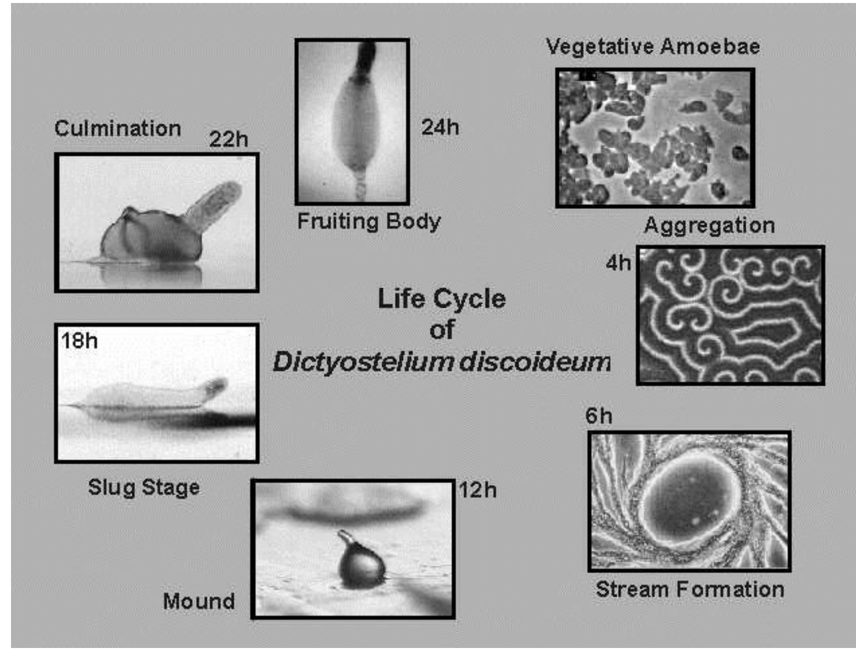
1. Cell Movement

Keller-Segel 70

$$u_t = \nabla\cdot(d_1(u,v)\nabla u) - \nabla\cdot(d_2(u,v)\nabla v)$$
$$v_t = d_v\Delta v - k_1 vw + k_{-1}p + f(v)u$$
$$w_t = d_w\Delta w - k_1 vw + (k_{-1}+k_2)p + g(v,w)u$$
$$p_t = d_p\Delta p + k_1 vw - (k_{-1}+k_2)p$$

$u = u(x,t)$ cellular slime molds
$v = v(x,t)$ chemical substances
$w = w(x,t)$ enzymes
$p = p(x,t)$ comlices

1. transport, gradient
   (a) diffusion u, v, w, p
   (b) chemotaxis $v \to u$
2. production $u \to (v,w)$



moving clustered cells   aggregating cells

3. chemical reaction v, w, p

$$V + W \;\underset{\leftarrow\,(k_{-1})}{\overset{(k_1)\,\rightarrow}{\rightleftharpoons}}\; P \;\overset{(k_2)}{\rightarrow}\; W + A$$

$$v_t = -k_1 vw + k_{-1}p$$
$$w_t = -k_1 vw + (k_{-1}+k_2)p$$
$$p_t = k_1 vw - (k_{-1}+k_2)p$$

2. Kinetic Point Vortex Mean Field

Chavanis 08 Langevin equation

$$\frac{dx_i}{dt} = \alpha\nabla_i^\perp \hat{H}_N - \mu\alpha^2\nabla_i\hat{H}_N + \sqrt{2\nu}R_i(t)$$

$i = 1, 2, \cdots, N$, $\mu > 0$ mobility

$\nu > 0$ viscosity of the particles

$\hat{H}_N$ point vortex Hamiltonian

$R_i(t)$ white noise, $\langle R_i(t)\rangle = 0$

$$\langle R_i^\alpha(t) R_j^\beta(t')\rangle = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')$$

$P_N(x_1, \cdots, x_N, t)$: N-pdf

$$\Rightarrow$$

$$\frac{\partial P_N}{\partial t} + \alpha\nabla^\perp \cdot \hat{H}_N \nabla P_N$$

$$= \nabla \cdot (\nu\nabla P_N + \mu\alpha^2 P_N \nabla \hat{H}_N)$$

Fokker-Planck equation

BBGKY-like hierarchy to $\{P_i\}_{i=1,2,\cdots,N}$

factorization (propagation of chaos)

$$P_N(x_1, x_2, \cdots, x_N, t) = \prod_{i=1}^N P_1(x_i, t)$$

High-energy limit

$$\mu\hat{\beta}N\alpha^2 = \nu\beta, \ \alpha N = 1, \ \omega = P_1$$

$$\Rightarrow$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla^\perp\psi \cdot \nabla\omega = \nu\nabla \cdot (\nabla\omega + \beta\alpha\omega\nabla\psi)$$

$$-\Delta\psi = \omega, \quad \psi|_{\partial\Omega} = 0$$

Euler-Smoluchowski-Poisson equation

3. Thermodynamics

$\Omega \subset \mathbf{R}^2$ bounded domain, $\partial\Omega$ smooth

1. Smoluchowski Part

$$u_t = \nabla \cdot (\nabla u - u\nabla v)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \nu} - u\frac{\partial v}{\partial \nu} \right|_{\partial\Omega} = 0$$

$$u|_{t=0} = u_0(x) > 0$$

transport

closed system

potential

2. Poisson Part

$$-\Delta v = u, \quad v|_{\partial\Omega} = 0$$

Sire-Chavanis 02
motion of the mean field of many self-gravitating Brownian particles
kinetic equation + maximum entropy production

Chavanis 08
relaxation to the equilibrium in the point vortices
BBGKY hierarchy + factorization

other Poisson parts

a) Debye system (DD model)

$$\Delta v = u, \quad v|_{\partial\Omega} = 0$$

global-in-time existence with compact orbit
Biler-Hebisch-Nadzieja 94

$$\|u\nabla u \cdot \nabla v\|_2 \leq C\|u\|_2\|\nabla u\|_2\|\nabla v\|_6$$

b) Childress-Percus-Jager-Luckhaus model (chemotaxis)

$$-\Delta v = u - \frac{1}{|\Omega|}\int u$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial \nu} \right|_{\partial\Omega} = 0, \ \int_\Omega v = 0$$

blowup threshold 8π
a. Biler 98, Gajewski-Zacharias 98, Nagai-Senba-Yoshida 97
b. Nagai 01, Senba-S. 01b

a mathematical phenomenon

blowup of the solution

$$\frac{du}{dt} = u^2, \; u(0) = T^{-1} > 0$$

$$\Rightarrow$$

$$u(t) = (T-t)^{-1}$$

$$\lim_{t \uparrow T} u(t) = +\infty$$

quantity distributed in space - time

$\Omega \subset \mathbf{R}^n$ bounded open set, $T > 0$

$u = u(x,t)$:

$\Omega \times [0,T] \to (-\infty, +\infty]$ continuous

$$D(t) = \overline{\{x \in \Omega \mid u(x,t) = +\infty\}}$$

$$D = \bigcup_{0 \leq t \leq T} D(t) \times \{t\} \subset \Omega \times [0,T]$$

$u_t - \Delta u \geq 0$ in $\Omega \times (0,T) \setminus D$

$u = u(x,t)$ Lip. conti. near in $\partial\Omega$

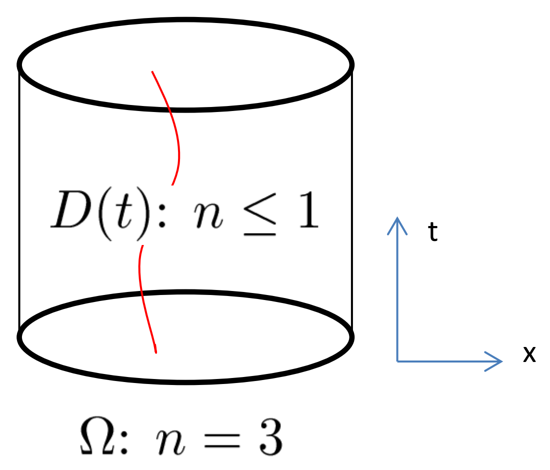
unif. in $t \in [0,T]$

Theorem A [F. Takahashi-S. 08]

$$\int_0^T \mathrm{Cap}_2(D(t))dt \leq \frac{L^n(\Omega)}{2}$$

~ (n-2) dimensional Hausdorff measure

Temperature infinite region enclosed in a bounded domain in a positive time interval takes a dimension lower than 2



SP equation

$$u_t = \nabla \cdot (\nabla u - u\nabla v), \ -\Delta v = u$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \nu} - u\frac{\partial v}{\partial \nu}, v \right)\Bigg|_{\partial\Omega} = 0$$

$u = u(x,t) \geq 0$ density

$j = -\nabla u + u\nabla v$ flux

$u_t + \nabla \cdot j = 0$ conservation law

1. total mass conservation

$$\frac{d}{dt}\|u(t)\|_1 = 0$$

$v = (-\Delta)^{-1}u$ potential

attractive (chemotaxis, gravitation)
action at a distance (long range potential)
symmetry (action-reaction)

$G(x,x') = G(x',x)$ Green's function

2. free energy decreasing

$$\frac{d}{dt}\left\{ \int_\Omega u(\log u - 1) - \frac{1}{2}\int\int_{\Omega\times\Omega} G(x,x')u \otimes u \right\} = -\int_\Omega u|\nabla(\log u - v)|^2 \leq 0$$

$$u \otimes u = u(x,t)u(x',t) \ dxdx'$$

3. weak form

$$\varphi \in C^2(\overline{\Omega}), \ \frac{\partial \varphi}{\partial \nu}\Bigg|_{\partial\Omega} = 0$$

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega \varphi u(\cdot,t) = \int_\Omega \Delta\varphi \cdot u(\cdot,t) + \frac{1}{2}\int\int_{\Omega\times\Omega} \rho_\varphi(x,x')u \otimes u$$

$$\rho_\varphi(x,x') = \nabla\varphi(x) \cdot \nabla_x G(x,x') + \nabla\varphi(x') \cdot \nabla_{x'} G(x,x')$$

Theorem B1 (blowup in infinite time)

$$T = +\infty, \ \limsup_{t \uparrow +\infty} \|u(\cdot, t)\|_\infty = +\infty$$

$$\Rightarrow$$

$$\lambda \equiv \|u_0\|_1 = 8\pi\ell, \ \exists \ell \in \mathbf{N}$$

$$\exists x_* \in \Omega^\ell, \ \nabla H_\ell(x_*) = 0$$ recursive hierarchy

Corollary 1 $\quad T < +\infty$ if

(1) $\lambda \notin 8\pi\mathbf{N}, \ \nexists$ stationary solution

or $\quad \mathcal{F}(u_0) \ll -1$

(2) $\lambda \in 8\pi\mathbf{N}, \ \nexists$ singular limit

Corollary 2 $\quad \Omega$ convex $\quad \lambda \neq 8\pi$

$\Rightarrow \ T < +\infty$ or

$T = +\infty$ compact orbit

$\exists$ stationary solution

c.f. Grossi-F. Takahashi 2010

Theorem B2 (blowup in finite time) $\quad T < +\infty$

$$u(x,t)dx \rightharpoonup \sum_{x_0 \in \mathcal{S}} m(x_0)\delta_{x_0}(dx) + f(x)dx$$

$$m(x_0) \in 8\pi\mathbf{N}$$

$$\mathcal{S} = \{x_0 \in \overline{\Omega} \mid \exists x_k \to x_0, \ t_k \uparrow T$$
$$u(x_k, t_k) \to +\infty\} \subset \Omega$$

$$0 \leq f = f(x) \in L^1(\Omega) \cap C(\overline{\Omega} \setminus \mathcal{S})$$

S. Mean Field Theories and Dual Variation, Atlantis Press, Amsterdam-Paris, second edition, 2015

quantized blowup mechanism in dynamical level

$G = G(x, x')$ Green's function

$R = R(x)$ Robin function

point vortex Hamiltonian

$$H_\ell(x_1, \cdots, x_\ell) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{\ell} R(x_j) + \sum_{1 \leq i < j \leq \ell} G(x_i, x_j)$$

Stationary States

$$u \geq 0, \ \frac{d}{dt}\|u(\cdot,t)\|_1 = 0$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}(u) = -\int_\Omega u|\nabla(\log u - v)|^2$$

$$-\Delta v = u, \ \ v|_{\partial\Omega} = 0$$

$$\log u - v = \text{constant}, \ \|u\|_1 = \lambda \text{ given}$$

$$\Rightarrow u = \frac{\lambda e^v}{\int_\Omega e^v}$$

duality

u $\longleftrightarrow$ v

$$-\Delta v = \frac{\lambda e^v}{\int_\Omega e^v}, \ v|_{\partial\Omega} = 0$$

Point Vortex Mean Field Equation
(Boltzmann-Poisson)

2D Euler (simply connected)

$$v_t + (v\cdot\nabla)v = -\nabla p, \ \ \nabla\cdot v = 0$$

$$\nu \cdot v|_{\partial\Omega} = 0$$

$$\nabla \times v = \omega(dx,t) = \sum_{i=1}^{N} \alpha\delta_{x_i(t)}(dx)$$

mean field limit $\alpha N = 1, \ N \to \infty$

ordered structure in negative inverse temperature

point vortices

L. Onsager 49

stationary quantization (Nagasaki-S. 90) → dynamical quantization quantized blowup mechanism – spectral level

Theorem C1 [Nagasaki-S. 90]

$\{(\lambda_k, v_k)\}$ solution sequence

$\lambda_k \to \lambda_0 \in (0, \infty)$, $\|v_k\|_\infty \to \infty$

$\Rightarrow$

$\lambda_0 = 8\pi\ell$, $\ell \in \mathbf{N}$

$\exists$sub-sequence, $\exists \mathcal{S} \subset \Omega$, $\sharp \mathcal{S} = \ell$

$v_k \to v_0$ locally uniform in $\overline{\Omega} \setminus \mathcal{S}$

$$v_0(x) = 8\pi \sum_{x_0 \in \mathcal{S}} G(x, x_0) \text{ singular limit}$$

$\mathcal{S} = \{x_1^*, \ldots, x_\ell^*\}$ blowup set

$$\nabla_i H_\ell|_{(x_1, \cdots, x_\ell) = (x_1^*, \cdots, x_\ell^*)} = 0, \ 1 \le i \le \ell$$

$$H_\ell(x_1, \ldots, x_\ell) = \frac{1}{2} \sum_i R(x_i) + \sum_{i<j} G(x_i, x_j)$$

Hamiltonian

$\Omega \subset \mathbf{R}^2$ bounded domain $\partial\Omega$ smooth

$\lambda > 0$ constant

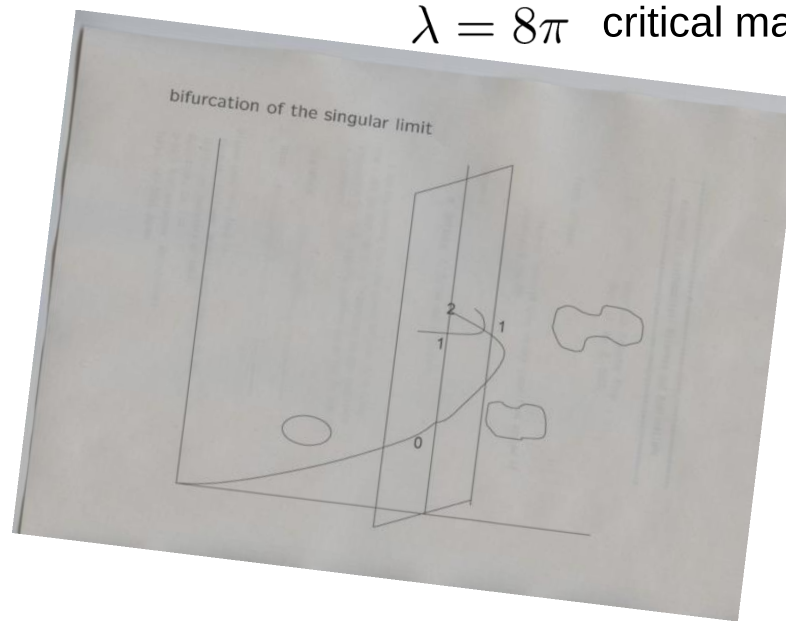
$$-\Delta v = \frac{\lambda e^v}{\int_\Omega e^v} \text{ in } \Omega, \ v = 0 \text{ on } \partial\Omega$$

$G = G(x, x')$ Green's function

$$R(x) = \left[G(x, x') + \frac{1}{2\pi} \log|x - x'| \right]_{x'=x}$$

Robin function

$\lambda = 8\pi$ critical mass



Euler $v_t + (v \cdot \nabla) v = -\nabla p,\ \nabla \cdot v = 0,\ \nu \cdot v|_{\partial\Omega} = 0$

Justification of the mean filed limit

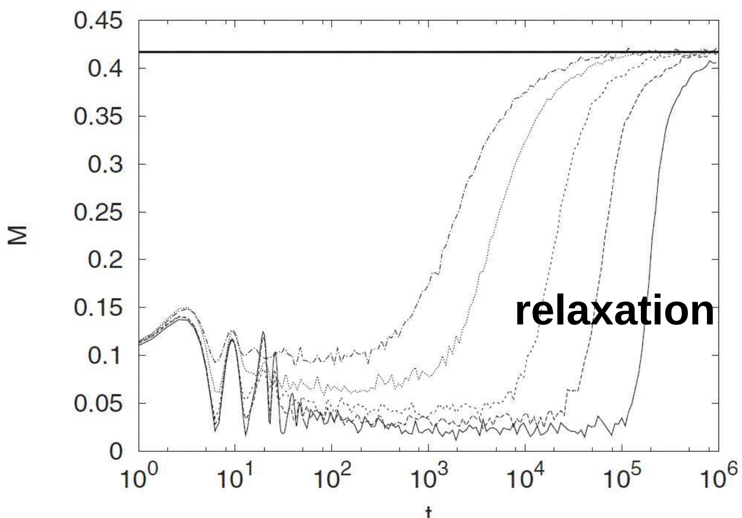
Recursive hierarchy
Nagasaki-Suzuki 1990

$$-\Delta v = \frac{\lambda e^v}{\int_\Omega e^v}, \quad v|_{\partial\Omega} = 0$$

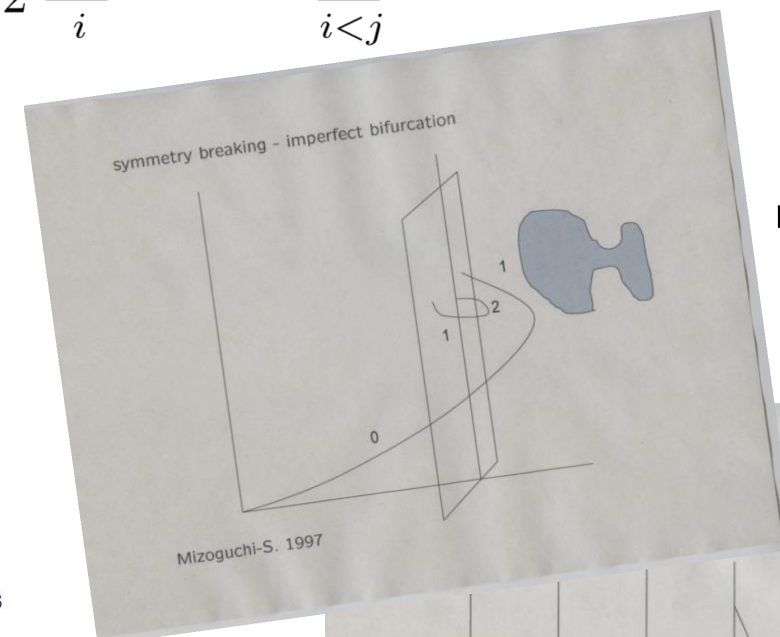
Theorem C2 [S. 92]

$0 < \lambda < 8\pi \Rightarrow \exists 1$ solution

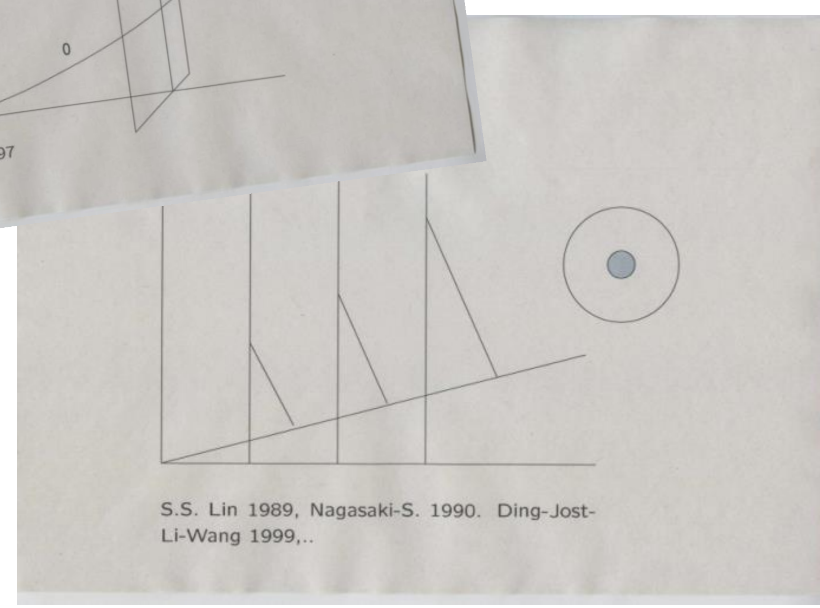
Hamiltonian $$H_N(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{2}\sum_i R(x_i) + \sum_{i<j} G(x_i, x_j)$$



quasi-equilibrium **equilibrium**



recursive hierarchy



Kinetic theory $\longleftarrow$ Static theory

Non-equilibrium statistical mechanics
Staniscia-Chavanis-Ninno-Fanelli 2009

楕円型統一理論

近平衡力学系標準理論

孤立系の均質化

ネットワークからの創発

領域の形状

場と粒子の双対性

Hamiltonian

無限時間爆発

有限時間爆発

凝縮
臨界
爆発

量子化する爆発機構

単純性

エントロピーの排出
（創発性）

重複
衝突

Boltzmann-Poisson方程式

Smoluchowski Poisson 方程式

閉鎖系
正準集団

非線形スペクトル理論
（自己組織化のポテンシャル）

質量保存
自由エネルギー

遠隔作用
作用反作用

多数粒子
平均場極限
カオスの伝播

循環的階層

点渦系

孤立系
小正準集団