

拡散

拡散とは

拡散とは各粒子がランダムな運動をすることで、全体としてみた時に広がる現象のことです。水にインクを垂らしたときの様子は拡散の代表例です。これは不可逆過程で、自然に元に戻ることはありません。拡散するものとして、分子や花粉などミクロなものから、昆虫や植物、さらには物質ではない熱などがあります。ランダムな運動で一見複雑に見えるこの現象をどう扱うのでしょうか。

ランダムウォーク

拡散現象を一つ一つの粒子の運動とみて、その運動を理想化したモデルは、**ランダムウォーク**と呼ばれます。

このモデルにより、粒子が初めにいた点からある時間経った時にどれくらい離れた位置にいるか、その確率分布を知ることができます。

右の図は、二次元空間でランダムウォークする粒子の移動の様子をシミュレーションしたものです。

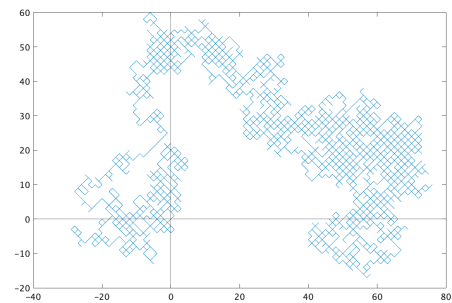


Figure 6. 二次元ランダムウォーク

拡散方程式

多数の粒子を考え、その濃度の時間変化と空間変化を結びつける式を、**拡散方程式**といい、 c を濃度、 D を拡散係数として次のように表せます。

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2c}{dx^2} \quad (\text{一次元}) \quad (2)$$

この方程式は、濃度勾配が打ち消されるように変化する有り様を表現しています。

例えば1次元で時刻 $t = 0$ で粒子 N 個がすべて $x = 0$ にあったとき、濃度分布の時間変化は右のグラフのようになります。時間が経つにつれ、勾配が緩やかになっているのがわかりますね。

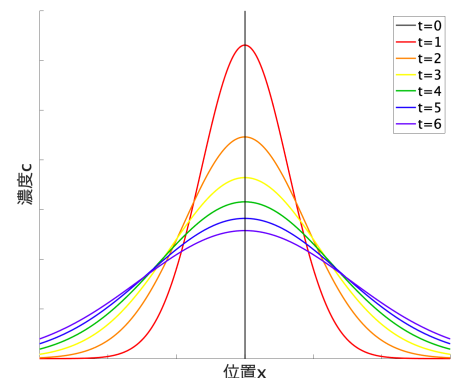


Figure 7. 濃度分布

応用

拡散は応用できる範囲が幅広いです。中でも、複数種の互いに反応し合う粒子の拡散を同時に考えた反応拡散方程式はパターン形成など生物の面白い特徴を説明できます。