

確率的拡散方程式の数値計算における注意

松山 貴*・本田勝也**

*名古屋大学大学院人間情報学研究科

**信州大学理学部数理・自然情報科学科

(1999年8月9日受理)

1 はじめに

拡散項を含む Langevin 方程式, すなわち確率的拡散方程式は自然現象を研究する数学的道具としてしばしば登場する。その例として微粒子や量子の運動, 界面の成長などノイズに影響を受ける現象を挙げることができる[1][3][5][10][11]。しかし, 自然現象を記述する多くの方程式は非線形となり, 解析的に解を得ることが困難なため数値的に求める方法が広く用いられる。

本稿では確率的拡散方程式を数値的に解く時に生ずる問題点を指摘する。普通, 偏微分方程式を数値的に解くために時間・空間をセルに分割して離散化する。対象とする方程式が自然現象を正しく記述しているならば, セルの大きさをゼロとした極限が存在して, 元の連続な偏微分方程式の解と一致するはずである。したがって, そのセルの大きさがある程度以上小さければ得られる結果はセルの大きさに依存しないことが示されなければならない。しかし, この事実が成立しない場合がある。以下本稿では「成長する荒れた界面」[7][8]を記述する方程式である Edwards-Wilkinson(EW)方程式[2]を取り上げ, 空間次元が高い場合, 離散化の程度(セルの大きさ)に数値積分の結果が依存し, 連続極限において界面の揺らぎが発散することを明らかにする。さらに, その原因が白色ノイズの仮定にあることを示す。白色ノイズより特異性の小さいノイズに置き換えることによって発散を避けることができる。本稿では線形である EW 方程式を用いて議論するが, その他の多くの非線形方程式にもこの問題は存在する。

2 Edwards-Wilkinson(EW)方程式

まず始めに Edwards-Wilkinson(EW)方程式[2]を紹介する。

$$(2.1) \quad \frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \eta(\mathbf{r}, t).$$

式(2.1)が EW 方程式である。この方程式は自己アフィンの対称性を有する「成長する荒れた界面」の運動を記述する簡単なモデルである。 $h(\mathbf{r}, t)$ は d 次元で一辺の長さ L の基盤上での界面の高さを表し, 時間 t と基盤上の位置 \mathbf{r} の関数である ($\mathbf{r} \in [0, L]^d$)。右辺の最初の項は界面の表面張力, つまり界面が滑らかになろうとする効果を表す。 ν は正の定数である。確率変数である $\eta(\mathbf{r}, t)$ に対しては普通最も数学的性質が明らかなガウス型白色ノイズを仮定する。すなわち平均 $0(\langle \eta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0)$ で, 相関は

$$(2.2) \quad \langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$$

と与えられる。また初期条件は $h(\mathbf{r}, t) = 0$ とし、境界条件は周期的境界条件を採用する。すなわち、 \mathbf{e}_l を l 番目の軸に沿った単位ベクトルとすると、 $h(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_l, t) = h(\mathbf{r}, t)$ を満たす。界面の荒さは高さの揺らぎで評価する。すなわち $h(\mathbf{r}, t)$ の平均自乗偏差 $w(L, t) \equiv \langle \{h(\mathbf{r}, t) - \langle h(\mathbf{r}, t) \rangle\}^2 \rangle^{1/2}$ を界面の荒さを表す指標とする。ここで、 $\langle \dots \rangle$ は確率変数 $\{\eta(\mathbf{r}, t)\}$ による平均量を表わす。

「成長する荒れた界面」の研究が盛んな理由の一つに臨界現象の研究においてその重要性が明らかとなったスケーリング則[3]が成立し、定量的な理解が期待されることが挙げられる。スケーリング則とは時刻 t とシステムの大きさ L に対して界面の揺らぎ $w(L, t)$ が次の形に表されることである。

$$(2.3) \quad w(L, t) = L^\alpha \Psi(t/L^z).$$

ここでスケーリング関数 $\Psi(x)$ は十分小さな x に対して x^β の形で増加し、やがて飽和し一定となる。すなわち、

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\sim x^\beta \quad (x \ll 1 \text{ のとき}), \\ \Psi(x) &\sim \text{const} \quad (x \gg 1 \text{ のとき}) \end{aligned}$$

を満たし、かつ $\beta = \alpha/z$ である。粗さ指数 α (自己アフィン・フラクタルに対しては Hurst 指数と呼ぶこともある)、動的指数 z を基盤の次元 d の関数として表すことが研究の目的である。 β は成長指数と呼ばれる。

式(2.1)は線形なので容易に

$$(2.4) \quad w^2(L, t) = (D/\nu) \int_{2\pi/L \leq k} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{1 - \exp(-2\nu k^2 t)}{k^2}$$

を得る。この結果の導出は4章に詳述されている。 $k' = Lk$ とおくと、

$$\begin{aligned} w^2(L, t) &= (D/\nu) L^{2-d} \int_{2\pi \leq k'} \frac{d^d \mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \frac{1 - \exp(-2\nu k'^2 t/L^2)}{k'^2} \\ &= L^{2-d} \Psi(t/L^2) \end{aligned}$$

となり、スケーリング式(2.3)を満たし $\alpha = (2-d)/2$, $z = 2$ となることが分かる。しかし、式(2.4)の被積分関数は波長 ($\propto k^{-1}$) が短いところで k^{-2} のごとく振舞い、 $d > 2$, つまり基盤の次元が2より高い場合、積分値は発散する(紫外線発散)。この事実は離散化の単位に結果が強く依存することを示唆している。

3 数値計算 (その1)

まずEW方程式、式(2.1)を離散化する。空間的な離散化の単位を a として基盤を $(2N)^d$ 個のセルに分割する ($N = L/2a$)。格子点の位置を $\mathbf{x}_i = a\mathbf{i}$ で表す。ここで \mathbf{i} は d 次元の整数で、 $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \dots, i_d)$, $i_l = 0, \pm 1, \dots, \pm N$ ($l = 1, 2, \dots, d$) である。時間的な離散化の単位を τ として、 $t_j = j\tau$ ($j = 0, 1, \dots$) と表す。式(2.1)を陽解法で離散化すると、

$$(3.1) \quad h(\mathbf{x}_i, t_{j+1}) = h(\mathbf{x}_i, t_j) + (\nu\tau/a^2) \sum_{l=1}^d \{h(\mathbf{x}_i + a\mathbf{e}_l, t_j) - 2h(\mathbf{x}_i, t_j) + h(\mathbf{x}_i - a\mathbf{e}_l, t_j)\} + \tau\eta'(\mathbf{x}_i, t_j)$$

が得られる。ここで \mathbf{e}_l は l 番目の軸に沿った単位ベクトルである。確率変数 $\eta'(\mathbf{x}_i, t_j)$ はガウス型で空間的、時間的にそれぞれ独立な分布を持つ。相関は次のように表される。

$$(3.2) \quad \langle \eta'(\mathbf{x}_i, t_j) \eta'(\mathbf{x}_{i'}, t_{j'}) \rangle = 2Da^{-\phi} \tau^{-1} \delta_{i_1, i_1'} \delta_{i_2, i_2'} \cdots \delta_{i_d, i_d'} \delta_{j, j'}$$

後の議論に便利になるように指数 ϕ を導入した。式(2.2)の離散版の場合は $\phi=d$ であることに注意する。平均0、分散1の正規分布に従う確率変数 $B(\mathbf{x}_i, t_j)$ を用いて、

$$(3.3) \quad \eta'(\mathbf{x}_i, t_j) = \sqrt{2D} a^{-\phi/2} \tau^{-1/2} B(\mathbf{x}_i, t_j)$$

と表わされる。しかし、求める値が h そのものではなく、 h の分散であることから $B(\mathbf{x}_i, t_j) = \sqrt{12}U$ (U は $[-1/2, 1/2]$ の値をとる一様乱数)としても十分な精度が得られることが分かっている[4]。結局、EW方程式(2.1)を離散化した

$$(3.4) \quad h(\mathbf{x}_i, t_{j+1}) = h(\mathbf{x}_i, t_j) + (\nu\tau/a^2) \sum_{l=1}^d \{h(\mathbf{x}_i + a\mathbf{e}_l, t_j) - 2h(\mathbf{x}_i, t_j) + h(\mathbf{x}_i - a\mathbf{e}_l, t_j)\} + \sqrt{2D} a^{-\phi/2} \tau^{1/2} \sqrt{12}U$$

を以下に数値計算の対象とする。

上記の式に式(2.2)に相当する $\phi=d$ を代入して界面の揺らぎ $w(L, t)$ を計算した。 $w(L, t)$ は

$$w^2(L, t_j) = \frac{1}{(2N+1)^d} \sum_i \{h(\mathbf{x}_i, t_j) - \bar{h}(t_j)\}^2,$$

$$\bar{h}(t_j) = \frac{1}{(2N+1)^d} \sum_i h(\mathbf{x}_i, t_j)$$

より求める。ここで $\sum_i = \sum_{i_1=-N}^N \sum_{i_2=-N}^N \cdots \sum_{i_d=-N}^N$ である。以下、 $L=50$ 、 $\nu=0.5$ 、 $D=0.005$ とする。 $\sigma \equiv \tau/a^2$ と定義された σ を0.1に固定して a をTable 1のように変化させて

$d=1$		$d=3$	
a	τ	a	τ
1.0	0.1	1.0	0.1
0.5	0.025	0.5	0.025
0.2	0.004	—	—

Table 1: Values of a and τ adopted to calculate the surface fluctuation $w(L, t)$.

計算した。 $d=3$ では計算時間の制限から $a=0.2$ の場合は計算できなかった。なお、 $d=3$ 、 $a=0.5$ の場合を除き10回計算しその平均値を求めた。 $d=3$ 、 $a=0.5$ の場合は計算

時間の制限から計算回数は1回のみである。

$t=1000$ まで計算し、横軸に t 、縦軸に w とした両対数グラフを $d=1$ の場合、 $d=3$ の場合、それぞれ Fig.1, 2 に示した。

得られた結果には顕著な違いがみられる。 $d=1$ の場合、 a, τ の変化にかかわらず $w(L, t)$ はほぼ変化していない。また、スケーリング則に従って直線的に増加しているのが分かる。それに反して $d=3$ の場合は a の値が小さくなるにつれて $w(L, t)$ の値が大きく変化している。これは離散化の単位 a に $w(L, t)$ が依存することを意味している。

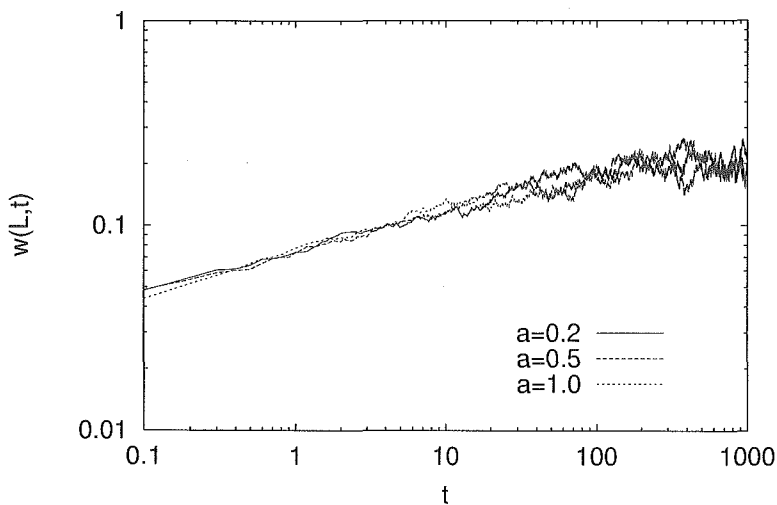


Fig. 1: Surface fluctuation $w(L, t)$ as a function of time t for $d=1$

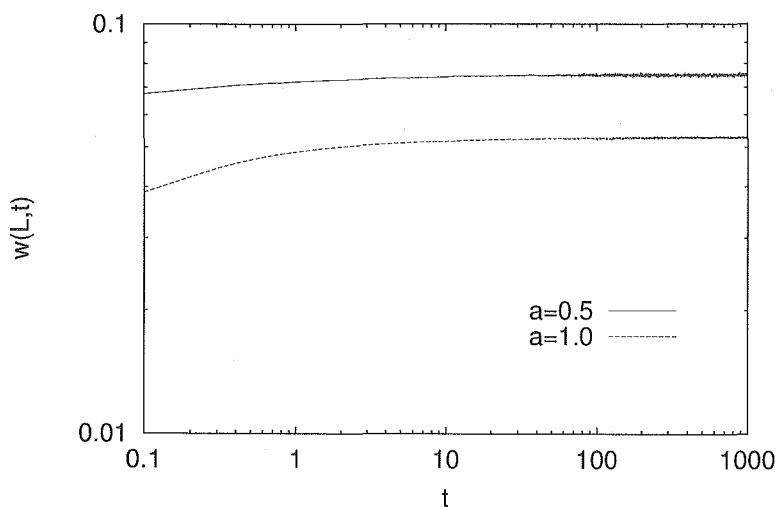


Fig. 2: Surface fluctuation $w(L, t)$ as a function of time t for $d=3$

4 連続極限

前節における数値計算の結果を理解するために解析的な考察を行う[6]. $h(\mathbf{x}_i, t_j)$ を空間的にフーリエ変換すると,

$$(4.1) \quad \hat{h}(\mathbf{k}_n, t_j) = (2N+1)^{-d} \sum_{\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{x}_l} h(\mathbf{x}_l, t_j)$$

となる。ここで離散的な波長ベクトル $\mathbf{k}_n = (k_{n_1}, k_{n_2}, \dots, k_{n_d})$ は $k_{n_l} = 2\pi n_l / (L+a)$, $n_l = 0, \pm 1, \dots, \pm N$ ($l=1, 2, \dots, d$) で定義される。 $h(\mathbf{x}_i, 0) = \hat{h}(\mathbf{k}_n, 0) = 0$ という初期条件での式(3.1)の解は,

$$(4.2) \quad \hat{h}(\mathbf{k}_n, t_{j+1}) = \sum_{j'=0}^j [1 - Y(\mathbf{k}_n)]^{j-j'} \hat{B}(\mathbf{k}_n, t_{j'})$$

と与えられる。ただし, $Y(\mathbf{k}_n) = (4\nu\tau/a^2) \sum_{l=1}^d \sin^2(k_{n_l}a/2)$ である。

式(4.2)に式(3.2)を代入して

$$(4.3) \quad w^2(L, t_{j+1}) = 2Da^{-\phi} \tau (2N+1)^{-d} \times \sum_{\{\mathbf{m}\}} \left[\frac{1 - \{1 - Y(\mathbf{k}_n)\}^{2j}}{1 - \{1 - Y(\mathbf{k}_n)\}^2} \right]$$

が得られる。ここで $\sum_{\{\mathbf{m}\}}$ は $\mathbf{n} = \mathbf{0}$ を除く $\sum_{n_1=-N}^N \sum_{n_2=-N}^N \dots \sum_{n_d=-N}^N$ を表している。式(4.3)の連続極限は L と t を固定して $a, \tau \rightarrow 0$ とすることによって得られる。連続極限によって式(3.1)は式(2.1)に収束するはずである。

式(4.3)を計算するために $\sum_{\{\mathbf{m}\}}$ を次のように2つの部分に分ける。

$$(4.4) \quad \sum_{\{\mathbf{m}\}} = \sum_{n_1=-N_c}^{N_c} \sum_{n_2=-N_c}^{N_c} \dots \sum_{n_d=-N_c}^{N_c} + (\text{その他の項}).$$

N_c は $1 \ll N_c \ll N$ となる整数で N との比は固定される, $b = N_c/N \ll 1$. 再度最初の和には $\mathbf{n} = \mathbf{0}$ が含まれないことを注意する。

式(4.4)における最初の和において $a, \tau \rightarrow 0$ で $Y(\mathbf{k}_n) \rightarrow \nu\tau k^2$, $\{1 - Y(\mathbf{k}_n)\}^{2j/\tau} \rightarrow \exp(-2\nu k_n^2 t)$ となることを使って,

$$(4.5) \quad (D/\nu) a^{d-\phi} \int_{\Omega} \dots \int_{\Omega} \{1 - \exp[-2\nu k^2 t]\} / k^2 \prod_{l=1}^d (dk_l/2\pi)$$

となる。積分領域は $\Omega = \{\cap_{l=1}^d \{k_l: |k_l| \leq 2\pi b/a\}\} \cap \{\cap_{l=1}^d \{k_l: |k_l| \leq 2\pi/L\}\}^c$ である。ここで $\{\dots\}^c$ は $\{\dots\}$ の補集合を表す。 $a \rightarrow 0$ の極限において式(4.5)がもっとも大きな寄与となる。 $d > 2$ のときは a が0に近づくにつれて式(4.5)の積分は発散するためこの方法は無効となる。

式(4.4)のその他の項において $y_{n_l} = \pi n_l / (2N+1)$ と置く。 $Y(\mathbf{k}_n) \leq (4\nu\tau/a^2) \sin^2(\pi b/2)$ であるから, $\{1 - Y(\mathbf{k}_n)\}^{2j/\tau}$ は次の条件のもとで $\tau \rightarrow 0$ という極限を取ると1となる。

$$(4.6) \quad \sigma \equiv \tau/a^2 < (2\nu d)^{-1}.$$

この条件は放物型の偏微分方程式を陽解法で数値的に積分するときに現れる。この結果, その他の項からの $w^2(L, t)$ への寄与は,

$$(4.7) \quad (D/4\nu) a^{2-\phi} \int \cdots \int_{\bar{\Omega}} \left[\sum_{i=1}^d \sin^2 y_i - 2\nu\sigma \left(\sum_{i=1}^d \sin^2 y_i \right)^2 \right]^{-1} \prod_{i=1}^d (dy_i/\pi)$$

となる。 $\bar{\Omega}$ は Ω の周辺の領域で

$$(4.8) \quad \bar{\Omega} = \left\{ \bigcap_{i=1}^d \{y_i; |y_i| \leq \pi/2\} \right\} \cap \left\{ \bigcap_{i=1}^d \{y_i; |y_i| \leq \pi b/2\} \right\}^c.$$

式(4.7)の積分は常に有界である。

式(4.5)と式(4.7)より $d < 2$ の場合連続極限をとったときに $w(L, t)$ が有限となるためには次の条件を満たさなければならない。

$$(4.9) \quad \phi = d.$$

$d < 2$ の場合では式(2.1)を直接積分した式(2.4)に収束して $\alpha = (2-d)/2, z=2$ が得られる。

一方, $d > 2$ の場合, 被積分関数は $y = |y_1^2 + y_2^2 + \cdots + y_d^2|^{1/2} = 0$ 付近で y^{d-3} のごとく振舞うので, 積分値は発散しない。そのため, 積分領域を $\tilde{\Omega} = \bigcap_{i=1}^d \{y_i; |y_i| \leq \pi/2\}$ に置き換えた式(4.7)が直ちに得られる。 $w(L, t)$ を有限に保つためには

$$(4.10) \quad \phi = 2.$$

を満たさなければならない。逆に白色ノイズを仮定するならば, すなわち $\phi = d$ とするならば, $w^2(L, t)$ は $d > 2$ ではセルの大きさ a に依存して, a^{2-d} に比例することが分かる。前節における $d=3$ の数値計算の結果を見ると, $t=1000$ で $a=1.0$ のときおおよそ $w_{a=1.0} = 0.05$, $a=0.5$ のとき $w_{a=0.5} = 0.07$ である。両者の比 $w_{a=1.0}/w_{a=0.5}$ は $a^{(2-3)/2}$ 値の比 $(1.0/0.5)^{-1/2}$ とほぼ一致している。数値計算の結果は解析的な考察によって確認されたことになる。

5 数値計算 (その2)

前節における解析結果より $d=3$ の場合には $\phi=2$ として式(3.4)の計算を行うと, a, τ の変化にかかわらず界面の揺らぎ w の値は一定のはずである。その事実を数値計算によって確かめるために, $\phi=2$ として計算をやり直した。その結果を Fig. 3 に表した。ただし, ϕ 以外のパラメータは3節と同じにした。

a, τ の値は異なっても, $w(L, t)$ の値はほぼ同じであることが確認される。 $d > 2$ では $\phi=2$ とすることによって離散化の単位に依らない正しい結果が得られることが数値的にも確かめることができた。

システムサイズを半分にしてセルの大きさも半分にすると, 分割されるセルの数と同じであるから直観的には等価な計算をしていると思われる。そこで, $\phi = d, d=3$ のとき,

A	L=100	a=1.0
B	L=50	a=0.5

となるA, Bの2つの場合を計算し比較した。その結果を Fig. 4 に示したが, 明らかに両者は異なる値を与える。 $d > 2$ の場合においてEW方程式の数値計算はシステムサイズとセルの大きさの比, すなわちセル数のみには依存しない。

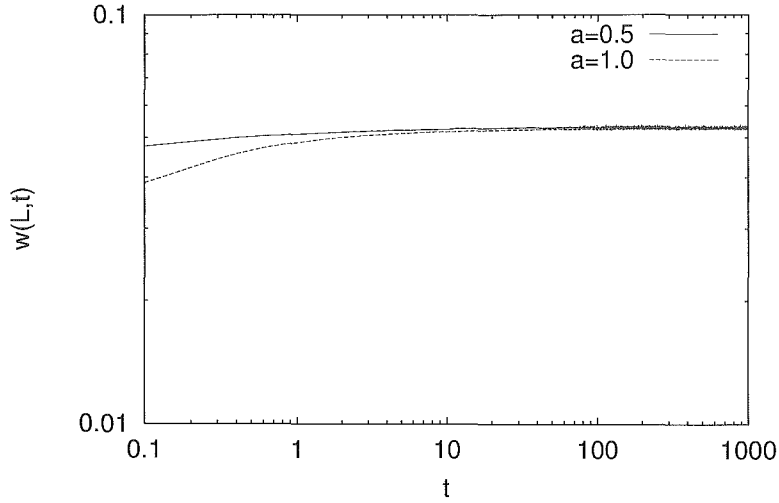


Fig. 3: Surface fluctuation $w(L, t)$ as a function of time t for $d=3, \phi=2$.

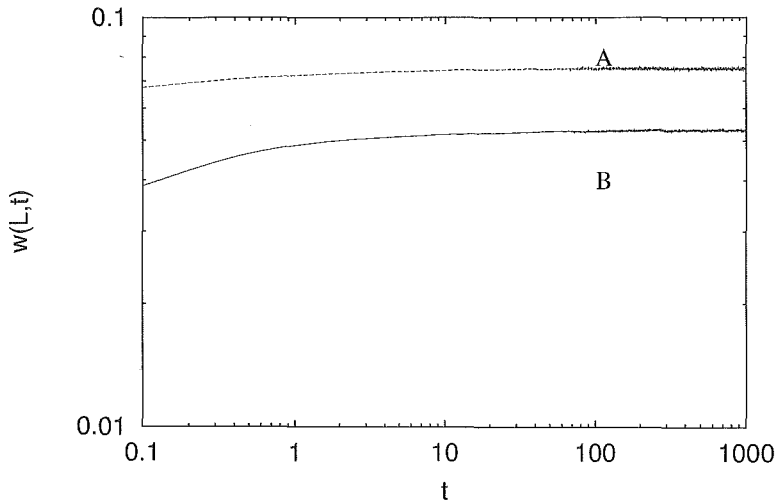


Fig. 4: Comparison of $w(L, t)$ s obtained in two cases, A and B. See text for details.

6 まとめ

EW 方程式を数値的に求めようとした時、 $d=1$ の場合では解析的に求まる結果と同じ結果を数値計算によっても求めることができた。しかし、 $d=3$ の場合では EW 方程式の数値計算による界面の揺らぎ $w(L, t)$ が離散化の単位 a に依存することを示した。界面の揺らぎは巨視的な量であり、離散化するセルの大きさといった微視的な量に依存してはならない。依存する結果が得られることは EW 方程式がもはや物理的な意味を持たないこ

とを意味する。しかし、空間的な白色ノイズの仮定を破棄し、白色ノイズより特異性の低いノイズに変更すれば、界面の揺らぎ $w(L, t)$ は微視的な量 a に依存しなくなる。

EW 方程式は線形であるため、解析的に解が得られ数値計算における誤りを予測することができ、またそれを修正する方法も求めることができた。しかし、非線形で解析的に解くことができない方程式、例えば KPZ 方程式[9]などに対しても解決方法は予測できないと同様なことが起こりうる。確率的拡散方程式を数値的に求める時には注意が必要である。

謝 辞

本稿をまとめるにあたり、貴重な助言を頂いた名古屋大学大学院人間情報学研究科の三井斌友教授に深く感謝します。

参考文献

- [1] Barabási, A-L. and Stanley, H. E., *Fractal Concept in Surface Growth*, Cambridge University Press, New York, 1995.
- [2] Edwards, S. F. and Wilkinson, D. R., *The surface statistics of granular aggregate*, Proc. R.Soc.London Ser.A, **381** (1982), 17-31.
- [3] Family, F and Vicsek, T., *Dynamics of Fractal Surfaces*, World Scientific, Singapore, 1991.
- [4] Greiner, A., Strittmatter, W. and Honerkamp, J., *Numerical integration of stochastic differential equations*, J. Stat. Phys, **51** (1987), 95-108.
- [5] Halpin-Healy, T. and Zhang, Y-C., *Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. Aspects of multidisciplinary statistical mechanics*, Phys. Rep. **254** (1995), 215-414.
- [6] Honda, K., *Invalidity of the spatiotemporal white noise assumption for a stochastic diffusion-type equation*, Phys. Rev. E**55** (1997), R1235-R1238.
- [7] 本田勝也, 荒れた成長界面のダイナミックス, 日本物理学会誌 **49** (1994), 819-826.
- [8] 本田勝也, 成長する荒れた界面の形とダイナミックス—自己アフィン・フラクタル, 科学 **66** (1996) 184-192.
- [9] Kardar, M., Parisi, G. and Zhang, Y-C., *Dynamic Scaling of Growig Interface*, Phys. Rev. Lett. **56** (1986), 889-892.
- [10] Krug, J. and Spohn, H., *Solids far from Equilibrium : Growth Morphology and Defects*, (edit F.Ahnert), Catena Verlag, Cremlingen-Destedit, 1987.
- [11] Vicsek, T., *Fractal Growth Phenomena*, 2nd ed., World Scientific, Singapore, 1992.

Remarks on the Numerical Integration of Stochastic Diffusion-type Equations

Takashi Matsuyama* and Katsuya Honda**

* Graduate School of Human Informatics, Nagoya University,
Nagoya 464-8601

** Department of Mathematical Sciences, Shinshu University,
Matsumoto 390-8621

(Received August 9, 1999)

Abstract

A Langevin-type diffusion equation is studied by means of numerical integration. We show that the assumption of Gaussian white for the noise is occasionally invalid for stochastic diffusion equations such as the Edwards-Wilkinson equation in dimensions larger than two, because the derived results depend on discretized unit. Less singularly correlated noise is required to obtain reasonable results. The same situation can appear in a wide class of nonlinear stochastic partial differential equations.