

非線形 SDE の数値計算 - 小川の方法によるシミュレーションについて -

日立製作所中央研究所
直野 健

概要

本報告では、小川によって提案されたモンテカルロ法による非線形現象の数値計算における二つの問題点を検討する。一つは非線形計算を実現するため必要であった密度推定の数値計算に関する問題である。もう一つは、小川の方法のバーガース方程式への適用において導入すべきパラメータ h についての、 $h \rightarrow 0$ のときの数値解の収束に関する問題である。

1 序

非線形現象の解析では、その現象を表す微分方程式を数値計算することが非常に強力な手段となる。その場合、解析領域にメッシュ分割を行なう有限要素法や有限差分法などが多く用いられている。しかし、これらメッシュ系の手法では、例えば流体のシミュレーションにおいて、レイノルズ数が高ければ高いほどより細かいメッシュが必要になり、計算量が非常に大きくなってしまいう問題点がある。特に、産業上で解明が期待される流体の現象はレイノルズ数が 10^5 から 10^9 あるいはそれ以上とされ、現在最速の並列計算機を利用しても未だに困難なことが多い。

一方、非線形現象の新しい数値計算方法として、Ogawa [6] による非線形 SDE のシミュレーション（以下、小川の方法）が提案されている。この方法は、各時間ごとに個々の仮想的な粒子の軌跡を、密度推定から定まる系全体の物理量によって決定する、という解析方法である。小川の方法にはメッシュ系の手法にはない数値計算上の優秀な点がある。まず、メッシュを切る必要がないためプログラム工数の大幅な削減が期待できる。次に、数値解の収束が粘性係数によらないため、計算量がレイノルズ数に依存して増えないと予想される。さらに、粒子ひとつひとつを独立にわけて考えることができるので並列計算機との親和性も高い。

しかし、小川の方法は非線形性を実現するため用いた密度推定に関わる問題点を抱えている。Ogawa [6] にも指摘されているように、密度推定の精度が小川の方法の計算量を大きく左右する。だが、密度推定そのものをどのように実現すれば最適であるか、またそこでの最適な解像度パラメータ（あるいはウィンドウ幅）はどうやって決定するのが未解決の課題となっている。本報告ではこの問題について Kerkycharian-Picard（以下、K-P）[3], [4] と Naono [5] を振り返り、密度推定の数値計算の現状を指摘する。

また、小川の方法は密度推定のために、解くべき SDE と同値の微分方程式の非線形項が

$$\frac{\partial}{\partial x} \{ (Hu)(x)u(x) \} \quad \text{where} \quad (Hu)(x) := \int H(x-y)u(y)dy$$

となっている。ここで、パラメータ h を導入してこの非線形項を

$$\frac{\partial}{\partial x} \{ (H_h u)(x)u(x) \} \quad \text{where} \quad (H_h u)(x) := \int \frac{1}{h} H\left(\frac{x-y}{h}\right)u(y)dy$$

とすると $h \rightarrow 0$ で形式的には、通常非線形項 $\frac{\partial}{\partial x}\{u(x)^2\}$ を持つ微分方程式の数値計算が可能と考えられる。本報告では、このような方法でバーガス方程式の数値計算を行ない、パラメータ $h \rightarrow 0$ のときに数値解 u_h が真の解に収束するかどうかの状況を調べた。

本報告は以下のように構成する。まず次節では密度推定に関する数値計算上の問題点を指摘する。第三節では、小川の方法をバーガス方程式のシミュレーションに適用する場合についてパラメータ h の変化における数値計算の結果と問題点をまとめる。最後に、本報告のまとめと今後の課題を記す。

2 密度推定の方法

密度推定は小川の方法において、SDE の非線形性の実現だけではなく、数値計算の計算量からも重要な要素である。そこで本節では、K-P [3], [4] と Naono [5] に基づき密度推定の計算に関わる問題を振り返っておきたい。

2.1 Kerkyacharian-Picard による密度推定

密度推定とは N_0 個の i.i.d. のサンプル X_i ($i = 1, \dots, N_0$) から密度を推定することである。密度推定の方法には Parzen [8] 以来、様々な種類があるが、小川の方法のために

$$\begin{aligned} IMSE(N_0) &:= E\|Mu_{N_0}(\cdot, \omega) - u\|_2^2 \\ &= \int_{\Omega} \int_{-\infty}^{+\infty} |Mu_{N_0}(x, \omega) - u(x)|^2 dx P(d\omega) \end{aligned}$$

が最小となるような密度 $Mu_{N_0}(x)$ を求めたい。そこで、この誤差の意味で非常に精密な評価式を得ている K-P のクライテリア (K-P [4]) の枠内に議論を限定する。ここにその概略を記す。

はじめに、以下の $F_{N_0}(x, \omega)$ と条件 $S(p)$ 、 $G(p)$ (p は自然数) を満たす $E^{<p>}(x, y)$ を用意する。

$$F_{N_0}(x, \omega) := \frac{1}{N_0} \{ \text{No. of r.v.s } \leq x \text{ among } X_1(\omega), \dots, X_{N_0}(\omega) \}$$

【条件 $S(p)$ 】

$$\exists \Phi(x) \in L^1(R) \cap L^2(R) \text{ s.t.}$$

$$|E^{<p>}(x, y)| \leq \Phi(x - y), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(x) |x|^p dx < \infty$$

【条件 $G(p)$ 】

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} E^{<p>}(x, y) (y - x)^k dy &= \delta_{0k} \\ \text{for } k &= 0, 1, \dots, p-1 \end{aligned}$$

そして、これらを用いて密度関数 $Mu_{N_0, j}^{<p>}(x, \omega)$ を構成する。

$$\begin{aligned} Mu_{N_0, j}^{<p>}(x, \omega) &:= \int_{-\infty}^{+\infty} 2^j E^{<p>}(2^j x, 2^j y) dF_{N_0}(y, \omega) \\ &= \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} 2^j E^{<p>}(2^j x, 2^j X_i(\omega)) \end{aligned}$$

この密度推定について K-P は次の結果を得た。

Theorem 1 (K-P [4])

$S(p)$ 、 $G(p)$ を満たす $E^{<p>}(x, y)$ と、任意の $u \in H^s (0 < s < p)$ について

$$IMSE(N_0, j) \leq C_1 \frac{1}{N_0} 2^j + C_2 2^{-2js}$$

従って $j = j(N_0)$ が

$$C_3 + \frac{\log_2 N_0}{1 + 2s} \leq j(N_0) \leq C_4 + \frac{\log_2 N_0}{1 + 2s}$$

を満たせば、

$$IMSE(N_0, j) = C(E, u, C_3, C_4) N_0^{-\frac{2s}{1+2s}}$$

実際の数値計算では、具体的な関数 $E^{<p>}(x, y)$ と最適な解像度パラメータ j_{opt} を定めなくてはならない。K-P [3] では、Daubechies [1] の p 次のスケーリング関数 $\phi^{<p>}(x)$ によって、上記 $E^{<p>}(x, y)$ を構成するウェーブレット法を提案し、併せて最適な解像度パラメータも導出した。

Theorem 2 (K-P [3])

p 次の Daubechies のスケーリング関数 $\phi(x) = \phi^{<p>}(x)$ から

$$E^{<p>}(x, y) := \sum_{k \in \mathbb{Z}} \phi^{<p>}(x - k) \phi^{<p>}(y - k)$$

とすると、 $E^{<p>}(x, y)$ は、 $S(p)$ 、 $G(p)$ を満たす。

この $E^{<p>}(x, y)$ による密度推定の最適な解像度パラメータ j_{opt} は次のようにとればよい。

$$j_{opt}(N_0) := \frac{\log_2 N_0}{1 + 2s} \quad (s \approx p)$$

2.2 密度推定の数値計算

K-P [3], [4] では理論上の誤差解析に留まっており、実際の数値計算上のコストの問題などは取り挙げていない。K-P の唯一の具体例である Daubechies のスケーリング関数による密度推定が上記 $S(p)$ と $M(p)$ を満たす $E^{<p>}(x, y)$ のなかで精度のみならず計算上も有効かどうかはわからない。

そこで Naono [5] では、ウェーブレットと同種の構成方法である Dubuc [2] の関数 $K(x)$ を用いたカーネル法 $E(x, y) := K(x - y)$ との比較を行ない、数値計算上の有効性の検討を行なった。なお、Dubuc の関数もウェーブレットと同様に滑らかさとモーメント 0 性を表すパラメータ p (ただし p は 3 以上の奇数) があり $K(x) = K^{<p>}(x)$ と書かれ、 $E^{<p>}(x, y) := K^{<p>}(x - y)$ と作られた $E^{<p>}(x, y)$ は $S(p)$ 、 $G(p)$ を満たす。

ウェーブレット法と Dubuc の関数によるカーネル法を書き下すと次のようになる。

- p 次のスケーリング関数 $\phi^{<p>}(x)$ によるウェーブレット法

$$\begin{aligned} Mu_{N_0, j}^{w, <p>}(x, \omega) &:= \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} 2^j E^{w, <p>}(2^j x, 2^j X_i(\omega)) \\ &= \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} 2^j \sum_{k \in \mathbb{Z}} \phi^{<p>}(2^j x - k) \phi^{<p>}(2^j X_i(\omega) - k) \end{aligned}$$

- p 次の Dubuc の関数 $K^{<p>}(x)$ によるカーネル法

$$\begin{aligned} Mu_{N_0,j}^{D,<p>}(x,\omega) &:= \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} 2^j E^{D,<p>}(2^j x, 2^j X_i(\omega)) \\ &= \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} 2^j K^{<p>}(2^j(x - X_i(\omega))) \end{aligned}$$

スケーリング関数 $\phi^{<p>}(x)$ と Dubuc の関数 $K^{<p>}(x)$ の構成にかかる数値計算上の手間は同じであるが、ウェーブレット法では k についての和をとるため次の点に注意しなくてはならない。

Remark 1 (Naono [5])

$\text{supp}(\phi^{<p>}) = [0, 2p-1]$ より、数値計算ではウェーブレット法 $Mu^{w,<p>}$ は Dubuc の関数によるカーネル法よりも $2p-1$ 倍の時間がかかる。

p の値は実質 2 以上でなければ意味がなく、ウェーブレット法は少なくとも Dubuc の関数によるカーネル法よりも 3 倍の時間がかかってしまう。精度上でウェーブレット法が勝れば良いが、Naono [5] の数値計算によれば両者はほぼ同じかあるいは Dubuc の関数によるカーネル法のほうが良い。さらに、数値実験によって得られた最適解像度パラメータと j_{opt} と、定理 2 の $j_{opt}(N_0)$ とではずれがあり、この値の適用には問題があることも示されている。

現状では、最適解像度パラメータを知る有効な解決策は筆者の知る範囲内では存在しない。与えられている情報は、使用する i.i.d. の $X(\omega^i)$ の個数 N_0 と、解像度パラメータ j を変えるごとの近似密度 $Mu_j(x)$ のみである。必ずしも最適ではなくとも、おおよそ実用に耐えうる方法の開発が今後の課題として残されている。

3 小川の方法によるバーガス方程式の数値計算

ここでは序章で導入したパラメータ h を $h \rightarrow 0$ として小川の方法によりバーガス方程式を数値計算した状況を示す。

3.1 計算方法

次の粘性項付きのバーガス方程式を扱う。

$$(Burg) \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} u(t, x) + u(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u(t, x) = \frac{1}{2} \mu^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(t, x) \\ u(0, x) = f(x), \quad ((t, x) \in [0, T] \times R^1) \end{cases}$$

この方程式の解は下のように解析的に与えられるため、数値解との誤差 $IMSE$ が計算できる。

$$u(t, x) = \frac{\int \frac{x-y}{t} \exp(-\frac{1}{\mu^2} F(t, x, y)) dy}{\int \exp(-\frac{1}{\mu^2} F(t, x, y)) dy}$$

ただし

$$F(t, x, y) = \frac{(x-y)^2}{2t} + \int_0^y f(\eta) d\eta$$

パラメータ h を導入すると $(Burg)$ は次の $(Burg_h)$ となる。

$$(Burg_h) \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} u_h(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} \{H_h(x : u_h(t))\} u_h(t, x) = \frac{1}{2} \mu^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_h(t, x) \\ H_h(x : u(t)) = \int \frac{1}{h} H(\frac{x-y}{h}) u(t, y) dy \\ u_h(0, x) = f(x), \quad ((t, x) \in [0, T] \times R^1) \end{cases}$$

適当な条件の下で (Burg_h) と同値になる非線形 SDE(A_h) は次のようになる。

$$(A_h) \begin{cases} dX_t = \frac{1}{2} H_h(X_t : u(t)) dt + \mu dW_t \\ H_h(x : u(t)) = \int \frac{1}{h} H(\frac{x-y}{h}) u(t, y) dy \\ u(t, x) ; p.d.f. \text{ of } X(t) \end{cases}$$

$W_t(\omega)$ は、 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ 上のブラウン運動、 $\xi(\omega)$ は分布密度関数 $f(x)$ を持つ確率変数 Ogawa [6] にならって、SDE (A_h) の解法は次のようになる。

1. 初期条件に従う $X_{t_0}(\omega^i)$ 、 $i = 1, \dots, N_0$ を作る。
2. $k = 1$ とする。
3. $H_h(x)$ の計算、ただし $k = 1$ のときは $M_j u_{t_{k-1}}(y)$ を $f(y)$ とする。

$$H_h(x; M_j u_{t_{k-1}}) := \int \frac{1}{h} H(\frac{1}{h}(x-y)) M_j u_{t_{k-1}}(y) dy$$

4. 確率密度 X_t の 1 ステップ更新。

$$X_{t_k} := X_{t_{k-1}} + \frac{1}{2} H_h(X_{t_{k-1}}; M_j u_{t_{k-1}}) \delta t + \mu \delta_{k-1} W$$

5. 適当な解像度パラメータ j を用いて $M_j u_{t_k}(x)$ の密度推定計算。

$$M_j u_{t_k}(x) := \frac{1}{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} 2^j E^{<p>} (2^j x, 2^j X_{t_k}(\omega^i))$$

6. $k = k + 1$ として 3 に戻る。

3.2 パラメータ $h \rightarrow 0$ での数値計算上の収束状況

このようなバーガス方程式の計算を保証するには、 $h \rightarrow 0$ での $u_h(x) \rightarrow u(x)$ の収束証明が必要になる。この問題は、SDE において密度ではなく分布関数である場合に Ogawa [7] によって解決されたが、一般的な密度の意味では未解決である。ここでは数値計算によってこの収束状況を調べる。

3.2.1 計算した例題

バーガス方程式 (Burg) は、以下、 $\mu = 0.1$ とし、初期関数 $f(x) = 1 - \cos(\frac{\pi}{2}x)$ とした時の $h \rightarrow 0$ での $u_h(x) \rightarrow u(x)$ の収束状況を調べる。

数値計算は次のように行なった。密度推定は前節でみたように、最適な手法と最適な解像度は不明のままであるが、Naono [5] の計算で比較的良好な結果を示していた、解像度パラメータが $j = 3.0$ での $p = 3$ の Dubuc の関数によるカーネル法を用いた。疑似乱数の個数は $N_0 = 2^{12}$ とし、時間刻 $t = 0.01$ を 50 ステップ計算した。

パラメータ $h = 0.0125, 0.025, 0.5, 1.0, 2.0$ のときを計算して収束状況を調べた。

3.2.2 計算結果

図 1,2 には、時間とともに $IMSE$ の増大する様子を縦軸に $IMSE$ 、横軸に時刻で表した。図 1 にはパラメータ $h = 0.5, 1.0, 2.0$ の結果を、図 2 にはパラメータ $h = 0.0125, 0.025, 0.5$ の結果を表した。図 1 から、パラメータ h を小さくすればある範囲までは収束していることがわかるが、図 2 から、小さくしすぎると誤差がかえって増大していることがわかる。

また、図 3,4 に数値解 $u_h(x)$ の時間発展 ($t=0.0, 0.1, 0.2$) の状況をパラメータが $h = 0.05$, $h = 0.0125$ の場合にそれぞれ示した。図 4 からわかるように、誤差が時間とともに発散していく場合には数値解が次第に振動していく状況が現われた。時間とともに、密度推定での最適な解像度パラメータの値が変化して乱数にばらつきの性質が現われて解の振動が起こることが理由として考えられる。しかし、はっきりした理由は不明であり今後の検討課題である。なお、ここで示した以外にも数値計算を行なったが、ここでの例と同様に、パラメータ h を小さくとり過ぎると数値解が振動した。

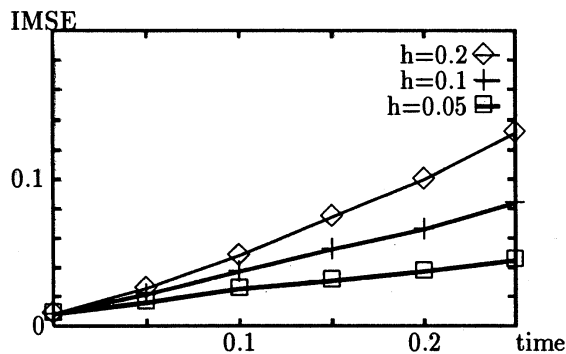


図 1: 収束しているとき

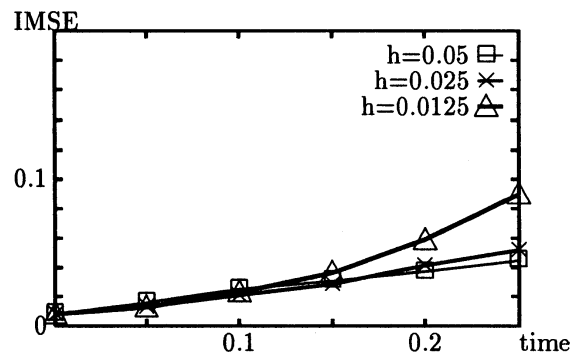


図 2: 発散しているとき

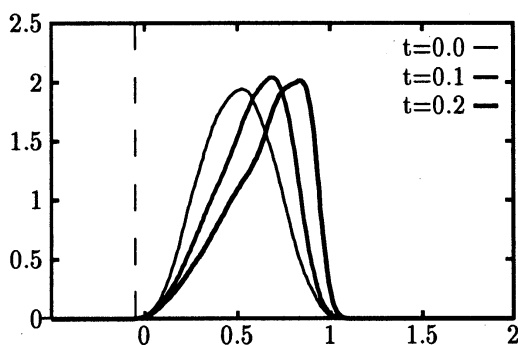


図 3: $h=0.05$ の $u_h(x)$

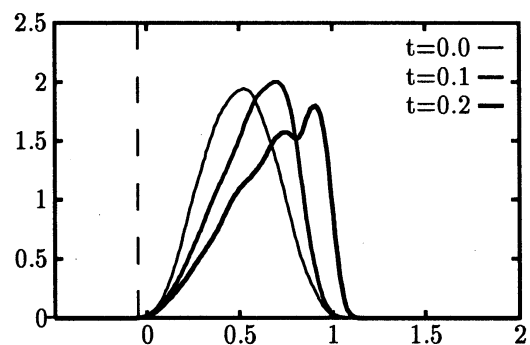


図 4: $h=0.0125$ の $u_h(x)$

4 結言

本報告では小川の方法を数値計算するときの二つの問題点について検討した。第一の問題点である密度推定の数値計算については、K-P の推定方法の枠内では、K-P の提案するウェーブレット法よりも Dubuc の関数によるカーネル法のほうが精度と計算量の面で優れていること、しかし、K-P の提案する最適な解像度パラメータ j_{opt} は適切でない例があることを振り返った。第二の問題点である、バーガス方程式を解く場合のパラメータ h の $h \rightarrow 0$ に関する数値解の挙動については、 h を小さくとり過ぎると、数値解が振動をおこしてしまう例があることがわかった。

小川の方法は、数値計算上で従来のメッシュ系の方法よりも優秀な点が多くあり、今後の発展が期待される。現段階では、本報告で取り扱ったような問題点が現れる場合があるが、これらが解決されれば、より広範囲の例題への対応が可能になると思われる。今後も各種の解析手法や統計手法などを検討し、この問題の解決に努力したい。また、メッシュ系の計算方法との具体的なパフォーマンスの差を、特に並列計算機上での実装を鑑みた検討を行なうことも今後の課題である。

最後に、K-P の論文の紹介、多くの有益な助言をしていただいた小川重義先生に感謝いたします。

参考文献

- [1] Daubechies I. : *Orthogonal bases of compactly supported wavelets*, Comm. in Pure and Applied Math., **41**, 909-996 (1988).
- [2] Dubuc S. : *Interpolation through an iterative scheme*, J. Math. Anal. Appl. , **114**, 185-201 (1986).
- [3] Kerkyacharian G., Picard D. : *Density estimation in Besov space*, Statistics and Probability Letter, **13**, 15-24 (1992).
- [4] Kerkyacharian G., Picard D. : *Density estimation by kernel and wavelets methods links between geometry of the kernel and regularity constraints*, to appear.
- [5] Naono K. : *Comparative Computations of Non-parametric Density Estimation Between Some Kernel Method and the Wavelet Method*, Monte Carlo Methods and Applications, **1-2**, 147-163 (1995).
- [6] Ogawa S. : *Monte Carlo Simulation of Nonlinear Diffusion Process*, Japan J. Indust. Appl. Math., **9**, 25-33 (1992).
- [7] Ogawa S. : Private Communication (1995)
- [8] Parzen E. : *On the estimation of a probability density function and mode*, Ann. Math. Statist., **33**, 1065-1076 (1962).