

Baby-bathwater scheme : a bridge between macroscopic and microscopic descriptions

磯野, 雅史
同志社大学大学院工学研究科

大宮, 眞弓
同志社大学大学院工学研究科

<https://doi.org/10.15017/14306>

出版情報 : 応用力学研究所研究集会報告. 20ME-S7 (34), 2009-02. Research Institute for Applied
Mechanics, Kyushu University

バージョン :

権利関係 :



応用力学研究所研究集会報告 No.20ME-S7
「非線形波動の数理と物理」(研究代表者 矢嶋 徹)
共催 九州大学グローバル COE プログラム
「マス・フォア・インダストリ教育研究拠点」

Reports of RIAM Symposium No.20ME-S7
Mathematics and Physics in Nonlinear Waves

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 6 - 8, 2008

Co-organized by
Kyushu University Global COE Program
Education and Research Hub for Mathematics - for - Industry

Article No. 34 (pp. 201-205)

Baby-bathwater scheme - a bridge between macroscopic and microscopic descriptions -

磯野 雅史 (ISONO Masafumi), 大宮 眞弓 (OHMIYA Mayumi)

(Received February 2, 2009)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
February, 2009

Baby-bathwater scheme - a bridge between macroscopic and microscopic descriptions -

磯野雅史、大宮眞弓

Masafumi Isono, Mayumi Ohmiya

同志社大学大学院工学研究科

1. はじめに

流体や波動などのマクロな現象の背景には分子や原子などのミクロな現象が存在している．前者は一般に偏微分方程式で記述され、後者は空間微分を含まない常微分方程式系や差分方程式系で記述される．マクロな系はあるミクロな系の近似と見なすことができるが、当然のことながら、連続体近似が困難な粒子系も存在する．しかし、我々が直接観測できるマクロな現象そのものは常に存在しているので、偏微分方程式(系)はミクロな現象の“粗い (coarse)” 近似的描写と言える．

ところで、偏微分方程式で記述される系においては、その系の物理的特性を知るためには、空間微分の最高階数を知ることが重要である．実際、発展方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = L[u] \quad (1)$$

においては、大雑把に言って、(1) の右辺 $L[u]$ が 1 階ならば移流現象、2 階ならば拡散現象、3 階ならば分散現象というように、現象の基本的性質は $L[u]$ に含まれる空間微分の最高階数によって基本的に支配されている．他方、偏微分方程式で記述されるとは限らないミクロな系を考えると、それらがやはり空間方向の変動の様子が何等かの形で支配されていると考えることは極めて自然である．

論文 [1] において Li らによって提唱された Baby-Bathwater スキームは、ミクロな時間発展はわかっている系において、空間方向の支配的な変動の様子、すなわち連続場近似した場合の空間微分の最高階数がある程度の確からしさで推定する統計的手法である．

本報告では、このスキームの改良を行うと共に、このスキームの有効性を調べるために移流方程式をはじめ、Burgers 方程式や KdV 方程式のような良く知られた方程式の差分スキームをミクロな系と見なし、数値実験を行ってこのスキームの有効性を検証する．さらに連続系の性質である、拡散性、分散性および非線形性と離散系との関係を明らかにし、衝撃波現象やソリトン現象等の物理現象のメカニズムを解き明かす研究の新たな方向性を開拓することを目的としている．

2. Baby-Bathwater スキーム

各 x_i , ($i = 1, 2, \dots, n$) における変位 $u(x_i, t)$ の、微小時間 Δ に対する時間発展

$$u(x_i, t) \longrightarrow u(x_i, t + \Delta), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

がわかっているミクロモデルに対するマクロモデル (連続系) が

$$u_t = f(u, u_x, u_{xx}, \dots, u^{(p)}) \quad (2)$$

の形の何等かの関係式で表されるとき、Baby-Bathwater スキームは、空間微分の最高階数 p を推定するアルゴリズムである．注意すべきなのは、この関係式 (2) が所謂“偏微分方程式”として完結していることは仮定していない事である．例えば、実際の乱流現象等を考えると、時間発展に関する“関係式”は存在しても、それに対して偏微分方程式として当然要求される適切性 (wellposedness) 等は多くの場合期待できないのは普通だからである．現実には、多くの妥協をして Navier-Stokes 方程式等の偏微分方程式を得て、それを基本方程式として解析して済ませているのが実情である．それはさておき以下に Baby-Bathwater スキームをいくつかのステップに分けて解説する．

Baby-Bathwater スキームのアルゴリズム

step1 . n を 1 つ決める ($n = 1, 2, 3, \dots$) .

step2 . x をランダムに 1 つ決める (例えば $x = x_1$) .

step3 . n 個の $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ をランダムに決める . これらは $u(x, 0)$ の $u(x_1, 0), u_x(x_1, 0), \dots, u^{(n-1)}(x_1, 0)$ に対応する .

step4 . 周期境界条件と step3 の条件を満たすような初期値 $u(x, 0)$ をランダムに設定する . 例えば , 天井関数 $[x] = \min\{n \in \mathbb{Z} | x \leq n\}$ を用いて $L > [n/2]$ とし , フーリエ多項式を用いて

$$u(x, 0) = b_0 + \sum_{l=1}^L \{a_l \sin(lx) + b_l \cos(lx)\}, \quad x \in [0, 2\pi) \quad (3)$$

として初期値を設定する . この際 , 方程式の数は n であるが , 自由度の大きさ $2L+1$ であるので未知数が残る . この劣決定系としての自由度の大きさを利用することで , 条件を満たしつつ初期値 $u(x, 0)$ をランダムに設定することができる . [1] において Li 達は step4 において連続データ $u(x, 0)$ を決定するのに共役勾配法 (CGI) を用いたが本報告では劣決定的連立一次方程式系として自由度を増やすことにより計算負荷の軽減も図った .

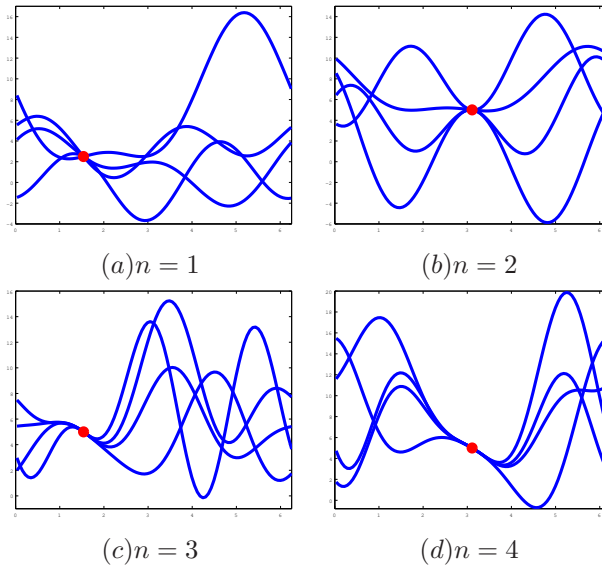


Fig.1 Families of random initial profile $u(x, 0)$

step5 . $u(x, 0)$ を初期値としてシミュレーションを行い , ミクロな時間発展規則に従って時間 Δ だけ進める . それを $u(x, \Delta)$ とし ,

$$u_t(x_1, 0) \equiv \frac{u(x_1, \Delta) - u(x_1, 0)}{\Delta}$$

を評価する .

step6 . step4 へ戻り , J 回繰り返す .

$\{u_t^1(x_1, 0), u_t^2(x_1, 0), \dots, u_t^J(x_1, 0)\}$ から分散 $\sigma^2(u_t(x_1, 0))$ を評価する .

step7 . step2 へ戻り , K 回繰り返す .

$\{\sigma^2(u_t(x_1, 0)), \sigma^2(u_t(x_2, 0)), \dots, \sigma^2(u_t(x_K, 0))\}$ から平均 $\langle \sigma^2(u_t) \rangle$ を評価する .

step8 . step1 へ戻り , $n \rightarrow n+1$ とする .

このとき , $\langle \sigma^2(u_t) \rangle_n \gg 0$ から $\langle \sigma^2(u_t) \rangle_{n+1} \approx 0$ へ急激に変化したなら $n = p$ とする .

このアルゴリズムのアイデアはシンプルで , 例えば , 次の 2 つの場合を考える .

case1 n 回目の試行において , 連続関係式 $u_t = f(u, u_x, \dots, u^{(n)})$ における $u, u_x, \dots, u^{(n-1)}$ を固定し , $u^{(n)}$ をランダムに与えると , それに依存して u_t もランダムに変化する .

case2 $n+1$ 回目の試行において，連続関係式 $u_t = f(u, u_x, \dots, u^{(n)})$ における $u, u_x, \dots, u^{(n-1)}, u^{(n)}$ を固定し， $u^{(n+1)}$ をランダムに与えても，それに依存せず u_t は変化しない．

case2 において u_t は $u^{(n+1)}$ に依存しないことがわかる．つまり，ミクロな系の現象を記述する偏微分方程式は $u^{(n+1)}$ を含まず，発展方程式の具体的な形は求められなくても，方程式の含む空間微分の最高階数は決定でき， $u_t = f(u, u_x, \dots, u^{(n)})$ の形であると判断できる．

3. 数値実験

マクロモデルとして性質の良くわかっている偏微分方程式の差分スキームをミクロモデルとみなして数値実験を行い，Baby-Bathwater スキームを用いて階数の判定を行い，それが本来の階数と一致しているかどうかを調べることにより，このスキームの有効性を検証することを目的とする．即ち，ミクロな系としてもその粗い近似としてのマクロな系としてもその性質が良く分かっている場合に，それらを敢えて“未知なもの”と考えて（Black-box 化して），問題とするアルゴリズムを適用して本来の性質が明らかにできるかどうかを検証するわけである．

実際の差分化においては，格子点数 $N = 100$ ，空間の刻み幅 $h = 2\pi/100$ ，時間の刻み幅 $k = 0.01h, 0.1h$ とし，step6 の $J = 10$ ，step7 の $K = 10$ とした．

数値実験 1（線形系）

移流方程式，拡散方程式，分散方程式の差分スキームをミクロモデルとみなし数値実験を行った結果，空間微分の最高階数と対応する結果が得られた．実際，移流（advection）方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = v \frac{\partial u}{\partial x}$$

の FTCS 差分スキーム

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{vk}{2h}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)$$

をミクロモデルと見なし $k = 0.01h$ として数値実験を行った場合，分散の平均 $\langle \sigma^2(u_t) \rangle_n$ は $n = 1$ から $n = 2$ とすると，116.537 から 0.000149 へと 10^6 のオーダーで急激に 0 に近づくよう変化した．これは等分散検定を行うまでも無く，明らかに有意の差が見られる．これはミクロな発展系 (4) は，1 階の関係式

$$u_t = f(u, u_x)$$

が対応するマクロな連続系であることを示している．FTCS スキーム (4) は無条件不安定であることは周知であるが，この離散系があくまでも“移流現象”を表していることは確認できるわけである．

同様な数値実験を (4) の Lax スキーム

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + \frac{vk}{2h}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (4)$$

に対しても Baby-Bathwater スキームを，FTCS スキーム (4) に対するのと同様な条件下で適用した．良く知られた安定条件である CFL 条件

$$\left| \frac{vk}{h} \right| \leq 1$$

を満たす場合も満たさない場合も，2 階と判定された．これは Lax スキーム (4) を少し書き換えると

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} = \frac{h^2}{2k} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + v \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} \quad (5)$$

となるが，この差分方程式は

$$D = \frac{h^2}{2k} \quad (6)$$

と置いて固定すると拡散係数 D の拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x}$$

の FTCS スキームになっているので、(4) が 2 階と判定されるのは当然の帰結と言える。しかし、(4) は安定と不安定で分散の変動の様子に差が見られた。これについては、今回は詳しく検討できなかったが、数値スキームの安定性の問題の違う側面を暗示していると思われ興味深かった。詳しくは [3] を参照されたい。

またランダムウォーク W_j^n を、原点を出発した粒子が確率 p で右に飛び、確率 $q = 1 - p$ で左に飛ぶとき、第 n ステップにおいて座標点 x_j に居る確率として定めると、それは差分方程式

$$\frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{k} = D \frac{W_{j+1}^n - 2W_j^n + W_{j-1}^n}{h^2} + \alpha \frac{W_j^n - W_{j-1}^n}{2h}, \quad D = \frac{qh^2}{k}, \quad \alpha = \frac{2(q-p)h}{k} \quad (7)$$

が従う [2]。これは差分方程式だが、 $h, k \rightarrow 0$ としても単純には拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} \quad (8)$$

に収束しない。しかし、これに関しても Baby-Bathwater スキームは当然のように 2 階であると判定する。

数値実験 2 (非線形系)

非線形移流方程式、Burgers 方程式、KdV 方程式の差分スキームをマイクロモデルと見なし数値実験を行った結果、線形系の場合と同様に非線形系でも空間微分の最高階数と対応する結果が得られた。実際、Burgers 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (9)$$

の差分スキーム

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{vk}{h^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - \frac{k}{2h}u_j^n(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)$$

をマイクロモデルと見なし $k = 0.1h$ として数値実験を行った場合、分散の平均 $\langle \sigma^2(u_t) \rangle_n$ は $n = 2$ から $n = 3$ とすると、147.029 から 0.003733 へと 10^5 のオーダーで急激に 0 に近づくよう変化した。

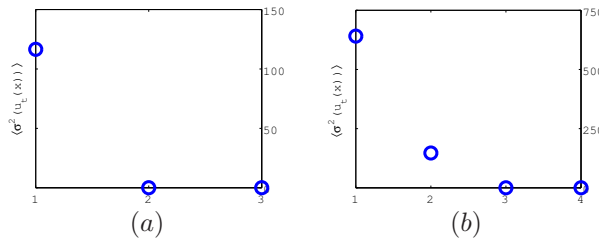


Fig.2 The order of the highest spatial derivative

(a)the advection finite-difference PDE time-stepper (b)the Burgers finite-difference PDE time-stepper

KdV 方程式に対する FTCS スキームや ZK スキームに対しても、同様な結果が得られた。この様に Baby-Bathwater スキームは、線形系だけでなく非線形に対しても有効であることが確かめられた。しかし、非線形性の種類を検出する方策は全く手付かずであるし、最高階数にしてもその係数を調べる術は全く分かっていない。

現時点ではまだ確かめていないが、多くの広田差分で得られる差分方程式についても同様の結果が予想される。その他、Boltzmann 方程式に由来する多くの方程式にも適用することが望まれるが、時間的な関係で果たせていない。また、1 次元セルオートマトンについても Baby-Bathwater スキームを用いて分類を試みることも興味深いだが、これも他日を期したい。

4. まとめ

本論での目的は、Baby-Bathwater スキームを用いて時間発展のみわかっているミクロな物理現象が偏微分方程式で記述される際の空間微分の最高階数を判定し、その有用性を検証することであった。これに対して数値実験として、既知の偏微分方程式の差分スキームをミクロな現象のモデルとして用いた結果、連続系の偏微分方程式の空間微分の最高階数と対応することが確かめられた。しかし、さらにアルゴリズムの検証、シミュレーションを行い、あらゆるミクロモデルに対応するように改善していかなくてはならない。そして今後はミクロな物理現象から、保存則の存在や非線形性の検出など、その他の定性的・大域的性質を見出していくような発展が考えられる。

5. 付録—何故“Baby-Bathwater”なのか

本研究をあちこちで発表するたびに、このスキームが何故この名称なのかという疑問をぶつけられた。学術的な内容よりもこちらの方に関する質問のほうが圧倒的に多かったといっても過言ではない。我々自身の命名ではないので、責任はもとより無いのだが、この場を借りて我々の解釈を披瀝しておこう。

まず赤ん坊を入浴させようとする。バスタブの中には赤ん坊もお湯も一緒になって揺蕩（たゆた）っている。このバスタブの中にある二つのもののうち、後に残すのは赤ん坊だけでお湯は捨てられるものだ。まさしく連続系を支配する空間微分のうち最高階迄の導関数が大切な赤ん坊であり、それ以上の階数のものは捨てても良いバスタブの残り湯である。それに、ランダムに揺らした関数のグラフである Fig.1 は、バスタブの湯の波を思い起こさせる。さらにこのスキーム自身、まだまだ未熟な赤ん坊で、これからどう発展するかどうかわからないからと思っている。

参考文献

- [1] J.Li et al.,Deciding the nature of the coarse equation through Microscopic simulation: the baby-bathwater scheme, SIAM Review, Vol.49(2007) pp.469-487.
- [2] 大宮眞弓, 非線形波動の古典解析, 森北出版, 2008.
- [3] 磯野雅史, 多粒子に対する連続モデルの Baby-Bathwater スキームによる階数決定法の研究, 同志社大学工学研究科修士論文, 2009.