

微分方程式のデジタル化 (Digitalization of Differential Equations)

早稲田大学理工学部数理科学科

高橋大輔

1 はじめに

本稿は 2000 年 11 月に京都大学数理解析研究所で行われた短期共同研究「関数方程式の定性的理論とその現象解析への応用」における筆者の講演の内容をまとめたものである。そのときの講演タイトルも「微分方程式のデジタル化」であったが、ここで言うところのデジタル化とは微分方程式に含まれるすべての変数を離散化する手続きのことを意味し、特に超離散化とよばれる手法についての解説を行った。

微分方程式の離散化でよく知られているのはいわゆる差分化であり、方程式の解を近似的に求めるために独立変数を離散化（差分化）し、計算機で得られた差分方程式を数値計算することがしばしば行われる。この場合に問題となるのは、差分間隔（格子間隔）が 0 の極限、すなわち連続極限で差分方程式の解が元の微分方程式の解に安定に収束するかである。非線形方程式では一般に収束性を保証するのが難しく、方程式の特微量を検証したり、数値実験により解のふるまいを確認したりすることで収束性を検証することが多い。

一方、セルオートマトン (Cellular Automaton, CA) のように独立・従属の全変数が離散的な時間発展系も、しばしば連続的な現象をシミュレートするのに用いられる [1]。この場合は従属変数（状態変数）の離散性により、現象のモデルとなる微分方程式を離散化するというアプローチは少なく、むしろ現象のメカニズム自体を直接模倣することの方が多し。もちろん格子気体 (lattice gas) モデルのように、粒子数無限大の極限での統計的平均をとると Navier-Stokese 方程式が得られるような場合もあるが、そのような例はまれであろう。しかしながらメカニズム自体を模倣するのであるから驚くほど元の現象の再現性がよく、またその離散性により計算機向けであるとも考えられる。

上では微分方程式・差分方程式・CA と 3 種類の方程式 (CA も方程式と呼ぶことにする) に触れたが、系の見かけの離散度合いは後者の方ほど強い。微分方程式は独立・従属変数がすべて連続であり、差分方程式は独立変数の全部あるいは一部が離散的で従属変数が連続であり、CA は全変数が離散的である。そして、特定の現象に対してそのモデルとなるようなものを三者で作ろうとすると、しばしばどれでも成功し、その場合には解のふるまいが互いによく似ている。そこで三者には深いつながりがあることがもちろん予想される。本稿では、超離散化手法を解説することによって、従来の近似や模倣という意味合いでのやや漠然としたつ

ながりではなく、三者が対等に直接的につながっていることもあるという例をいくつか示し、方程式の離散化についてある新しい見方を提案することをもくろむ。

2 拡散方程式の超離散化

最初は簡単な例から始める。まず拡散方程式

$$g_t = g_{xx} \quad (1)$$

を考える。\$x, t\$ はそれぞれ空間・時間に関する連続の独立変数であり、連続な従属変数 \$g\$ はそれらに依存している。この方程式の差分化として最も簡単なもののひとつに

$$\frac{1}{\Delta t}(f_j^{n+1} - f_j^n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}(f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n) \quad (2)$$

がある。ここで \$\Delta t, \Delta x\$ はそれぞれ時間・空間格子間隔である。\$f_j^n = g(j\Delta x, n\Delta t)\$ として \$\Delta x, \Delta t \to 0\$ の極限をとると、(2) の極限方程式が (1) になり、さらに \$\Delta t/(\Delta x)^2 \le 1/2\$ ならば (2) の解が (1) の解に収束することが知られている。また (1) も (2) も線形の方程式であり、解の重ね合わせができる。以上のように (1) と (2) の関係は方程式・解の両レベルで直接的に示すことができ、漠然とした言い方であるが両者は深く結びついている。離散度合いで考えると、(1) で連続であった独立変数が、(2) で離散的になっている。

では、さらに (2) の従属変数 \$f\$ を離散化するにはどうすればよいであろうか。この離散化にもいろいろな方法が考えられるが、ここでは「超離散化」と呼ばれている方法を用いる [3, 2]。超離散化とは公式

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \epsilon \log(e^{A/\epsilon} + e^{B/\epsilon} + \dots) &= \max(A, B, \dots) \\ \left(\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \right) \epsilon \log(e^{A/\epsilon} \cdot e^{B/\epsilon} \dots) &= A + B + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

を用いた離散化である。式の形を簡単にして見通しをよくするため、(2) で \$\Delta t/(\Delta x)^2 = 1/2\$ の場合についてのみ考える。このとき (2) は

$$f_j^{n+1} = \frac{1}{2}(f_{j+1}^n + f_{j-1}^n) \quad (4)$$

になる。ここで \$f_j^n = e^{F_j^n/\epsilon}\$ として式を書き換えると

$$F_j^{n+1} = \epsilon \log(e^{F_{j+1}^n/\epsilon} + e^{F_{j-1}^n/\epsilon}) - \epsilon \log 2 \quad (5)$$

となる。さらにパラメータ \$\epsilon\$ の極限 \$\epsilon \to +0\$ を考えると、この式から (3) を用いて

$$F_j^{n+1} = \max(F_{j+1}^n, F_{j-1}^n) \quad (6)$$

が得られる。(6)は超離散拡散方程式と呼ばれ、(4)の右辺の足し算がmax演算に置き換わっている。(6)は単に(4)の極限方程式であるので、差分方程式であることには変わりがなく、 F を連続変数だと考えて差し支えない。ところが F の初期値が整数であるならば任意の時刻でも整数であることは明らかである。さらに初期値がたとえば0と1の値だけで構成されているとすると、任意の時刻でも0か1の値しかとらない。つまり(6)の従属変数 F は連続変数、離散変数のどちらにもなりうる変数である。

さらに(1)、(4)で大切な性質、線形性も(6)で生き残っている。ただし和の演算をmax、積の演算を+と考える。いま G_j^n, H_j^n が(6)の解であるとする、その線形和 $F_j^n = \max(G_j^n + A, H_j^n + B)$ は

$$\begin{aligned} F_j^{n+1} &= \max(G_j^{n+1} + A, H_j^{n+1} + B) \\ &= \max(G_{j+1}^n + A, G_{j-1}^n + A, H_{j+1}^n + B, H_{j-1}^n + B) = \max(F_{j+1}^n, F_{j-1}^n) \end{aligned}$$

となり、やはり(6)を満たしている。

また、(4)の解も(6)で生き残る。たとえば

$$f_j^n = 1 + e^{kj + \omega n}, \quad \omega = \log \cosh k$$

は(4)の解であるが、 $k = K/\varepsilon, \omega = \Omega/\varepsilon$ とし、 $f_j^n = e^{F_j^n/\varepsilon}, \varepsilon \rightarrow +0$ を再び用いれば

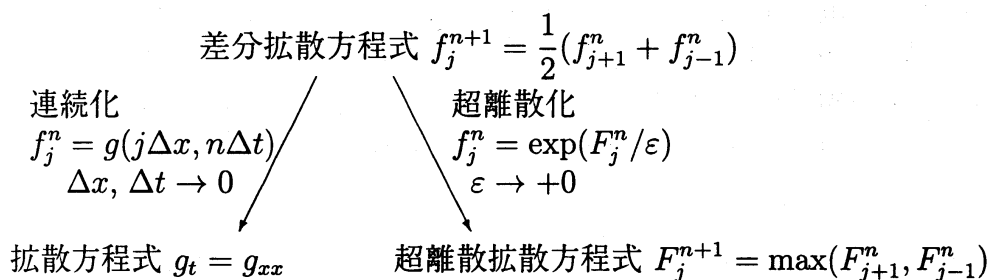
$$F_j^n = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log(1 + e^{(Kj + \Omega n)/\varepsilon}) = \max(0, Kj + \Omega n), \quad \Omega = |K|$$

となってnon-trivialな解が得られる。念のためにこの解を(6)に代入すると

$$\begin{aligned} \max(0, Kj + \Omega n + \Omega) &= \max(\max(0, Kj + \Omega n + K), \max(0, Kj + \Omega n - K)) \\ &= \max(0, Kj + \Omega n + K, Kj + \Omega n - K) = \max(0, Kj + \Omega n + |K|) \end{aligned}$$

となって $\Omega = |K|$ であれば解になることが確認できる。

以上のように(6)自身は(4)の単純な極限で得られ、解も同様の極限で手に入り、線形性も保たれている。(1)、(4)、(6)の関係を図式的に書くと以下のようになる。差分方程式を中心として、方程式・解が極限によって相互に直接的に結びついているのである。



3 Burgers 方程式の超離散化

前節の拡散方程式の超離散化をふまえて、今度は非線形方程式である Burgers 方程式の

$$v_t = 2vv_x + v_{xx} \quad (7)$$

超離散化を行う [2]. Burgers 方程式は拡散方程式 (1) から Cole-Hopf 変換 $v = (\log g)_x$ によって得ることができる. つまり図式的に書くと

$$\begin{cases} g_t = g_{xx} \\ \downarrow v = (\log g)_x \\ v_t = 2vv_x + v_{xx} \end{cases} \quad (8)$$

となる. この図式全体は以下の形でまず差分化される.

$$\begin{cases} f_j^{n+1} = \frac{1}{2}(f_{j-1}^n + f_{j+1}^n) \\ \downarrow u_j^n = \frac{1}{\Delta x}(\log f_{j+1}^n - \log f_j^n) \\ u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{\Delta x} \left\{ \log(e^{-\Delta x u_j^n} + e^{\Delta x u_{j+1}^n}) - \log(e^{-\Delta x u_{j-1}^n} + e^{\Delta x u_j^n}) \right\} \end{cases} \quad (9)$$

差分化のポイントは, それぞれの式を独立に差分化するのではなく, まず拡散方程式, Cole-Hopf 変換を差分化し, それをもとに差分 Burgers 方程式を導いて, 図式に矛盾が生じないようにすることである. $\Delta t/(\Delta x)^2 = 1/2$ を保ちつつ $\Delta x \rightarrow 0$ の極限を取ると, (9) の極限系として (8) が得られる.

さらに $f_j^n = \exp(F_j^n/\varepsilon)$, $\Delta x u_j^n = (U_j^n - 1/2)/\varepsilon$ の変数変換を用い, $\varepsilon \rightarrow +0$ の極限をとると, 超離散化された図式

$$\begin{cases} F_j^{n+1} = \max(F_{j+1}^n, F_{j-1}^n) \\ \downarrow U_j^n = F_{j+1}^n - F_j^n + 1/2 \\ U_j^{n+1} = U_j^n + \min(U_{j-1}^n, 1 - U_j^n) - \min(U_j^n, 1 - U_{j+1}^n) \end{cases} \quad (10)$$

が得られる. こうして, \max を和と考えると線形化可能な超離散 Burgers 方程式 ((10) の最下式) が得られた. もちろん, 衝撃波解等の解も同様に超離散化可能であり, すべては超離散拡散方程式から導くことができる. また, 超離散 Burgers 方程式は初期値分布を 0, 1 に限定すると, 任意の時刻で 0 か 1 のどちらかの値しかとらず, この制限条件の下でルール番号 184 の ECA (Elementary CA) に等価であり, 交通流のモデルとして上の図式が役に立っていることを注記しておく.

4 超離散化の意味

以上、少ない例であるが超離散化が機能する例を示した。では、いったい超離散化とは何をしているのであろうか。この節では超離散化の意味を既成の概念から再解釈することを試みる。

まず物理的に考えると、 $\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon} + \dots) = \max(A, B, \dots)$ は、統計力学における自由エネルギーの低温極限

$$\lim_{T \rightarrow +0} -kT \log \sum_n e^{-E_n/kT} = \min_n E_n$$

に等しいことが、公式 $\min(-A, -B, \dots) = -\max(A, B, \dots)$ よりわかる。すなわち超離散化を行うことによって、我々は方程式の「低温極限」を見ているのである。実は、すでに量子可積分系の分野で超離散極限と全く同じ極限が使われていて、そちらではクリスタル化 (crystalization) と呼ばれており、この物理解釈がそのまま生きている。我々のアプローチとの違いとしては、量子可積分系が statistics であるのに対し、我々の方は dynamics であることでぐらいい、背後で使われている数学は同じなのである。

二番目の解釈として、通常四則演算の代数から max-plus 代数への変換操作が超離散化であると考えられることもできる [4]。max-plus 代数とは、和を max、積を + にとる代数であり、通常四則演算と以下のような対応をもつ。

$$\begin{aligned} a + b &\leftrightarrow \max(A, B), \\ ab &\leftrightarrow A + B, \\ a + (b + c) = (a + b) + c &\leftrightarrow \max(A, \max(B, C)) = \max(\max(A, B), C) \\ &= \max(A, B, C), \\ a(bc) = (ab)c &\leftrightarrow A + (B + C) = (A + B) + C, \\ a(b + c) = ab + ac &\leftrightarrow A + \max(B + C) = \max(A + B, A + C). \end{aligned}$$

結合・分配法則が max-plus 代数でも成り立っているので、四則演算で構成された方程式 (差分方程式) と解 (多項式か級数) のセットがあれば、自動的に max-plus 代数に翻訳できるように思える。ところが、積 (max-plus 代数で +) の逆演算 (商) は - によって定義できるのに対し、和 (max-plus 代数で max) の逆演算 (差) が定義できない。たとえば

$$B = \max(A, 0)$$

を考えると、 $B > 0$ のときは $A = B$ となるが、 $B = 0$ のときは $A \leq 0$ であれば何でもよい。つまり上式は $A = \dots$ の形で書けないのである。しかしながら、その弱点に直面しなくてすむ問題については、前節までで示したように、差分系を max-plus 代数に翻訳することができ、できる場合にはたいへんうまくいくの

さらに、超離散化は特異点の解析であると解釈することもできる。この解釈を、次式に示す可積分差分方程式（Quispel 系の一例）で説明しよう [5]。

$$x_{n+1}x_n^2x_{n-1} = x_n + 1 \quad (11)$$

いま、 δ を 0 に近い微小量とし、この方程式の初期値を $x_0 = 1, x_1 = \delta$ にとったときに得られる x_n のパターンを漸近評価すると、以下のようなになる。

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
1	δ	$\frac{1}{\delta^2}$	δ	1	$\frac{2}{\delta}$	$\frac{\delta}{2}$	$\frac{2}{\delta}$	1	δ

周期 8 でこのパターンは繰り返され、零点が x_1, x_3, x_6 に、発散点が x_2, x_5, x_7 に現れている。変数変換 $x_n = e^{X_n/\epsilon}$ によって (11) の超離散化を行うと

$$X_{n+1} + 2X_n + X_{n-1} = \max(0, X_n) \quad (12)$$

が得られる。さらに $\delta = e^{-K/\epsilon}$ ($K > 0$) と考えて、 $x_0 = 1, x_1 = \delta$ に対応する初期値 $X_0 = 0, X_1 = -K$ を用いると、 X_n のパターンは以下のようなになる。

X_0	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9
0	$-K$	$2K$	$-K$	0	K	$-K$	K	0	$-K$

つまり、(12) で有限値のパターンが (11) では零点・発散点を含むパターンに対応するのである。このことは変数変換 $x_n = e^{X_n/\epsilon}$ を考えれば当たり前である。したがって超離散化は元の系の特異点を解析していることになる。

以上のことから、超離散化が全く新しい数学的操作・概念を提出したのではないことがわかる。しかしながら、既成のものにあてはめることはできるが、その用いられ方が今までにないものであり、新しいものの見方を提案していると筆者は考えている。

5 超離散化の応用

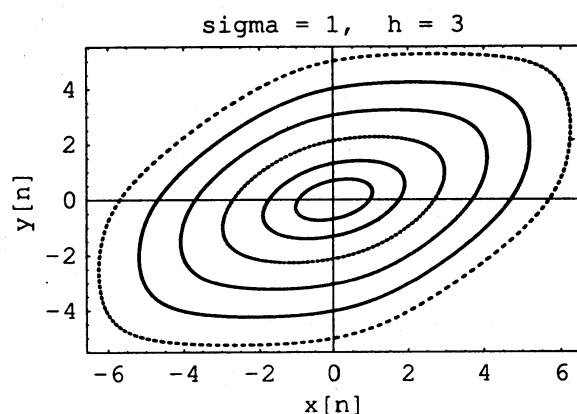
超離散化は公式 (3) を用いて方程式・解を変換するだけの操作であり、方程式の特別な性質を前提にしない。そこで、解のふるまいに特徴的な構造がある方程式に超離散化を適用し、その構造を離散的に際立たせることによって新しい見方ができないであろうか。このような考えにもとづいて行われた試みを 2 つ以下に紹介する。

5.1 カオス系

少し長い前置きとして、次式の可積分マッピングを考える。

$$x_{n+1} = \frac{x_n}{y_n}, \quad y_{n+1} = y_n \frac{h + x_{n+1}}{h + 1/x_{n+1}} \quad (13)$$

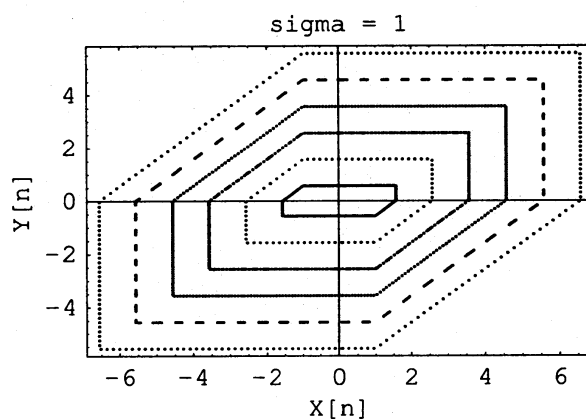
ここで h は定数である。このマッピングの相平面における軌道は、次図のように初期値によってきれいに分離している。



変換 $x_n = e^{X_n/\epsilon}$, $y_n = e^{Y_n/\epsilon}$, $h = e^{1/\epsilon}$ によって、この方程式の超離散化をとると

$$X_{n+1} = X_n - Y_n, \quad Y_{n+1} = Y_n + \max(1, X_{n+1}) - \max(1, -X_{n+1}) \quad (14)$$

が得られ、相平面の軌道は次図のようになる。



このマッピングは x_n (X_n), y_n (Y_n) の 2 変数を含むので、可積分であるということは保存量がひとつ存在することになる。(14) の保存量は、上の図の多角形軌道を観察し、多角形を \max で表現することにより、

$$\max(X_n - Y_n, Y_n - X_n, 1 + Y_n, 1 - Y_n, X_n, -X_n) = \text{const.} \quad (15)$$

であることが容易に分かる。そこで、超離散化の際の変換を逆にたどることにより、この保存量を元の (13) の x_n, y_n で表すと、

$$\frac{x_n}{y_n} + \frac{y_n}{x_n} + h \left(y_n + \frac{1}{y_n} \right) + x_n + \frac{1}{x_n} = \text{const.} \quad (16)$$

となる。ただし、たとえば $\max(0, A) = \max(0, A - 1, A/2, A)$ というように、ひとつの \max には等価な表現がたくさん存在し、変換を逆にたどる道筋は一意的で

はない。上で行った (15) から (16) へのたどり方は、非常にナイーブなものである。ところが、(16) が (13) の保存量になっていることが容易に確認できる。少なくとも筆者は (14) の保存量によるヒントなしに、(13) の保存量を導出することは不可能であり、「逆たどり」のナイーブさを考慮しても、超離散化を経由する保存量の計算方法は有効であるように思える。

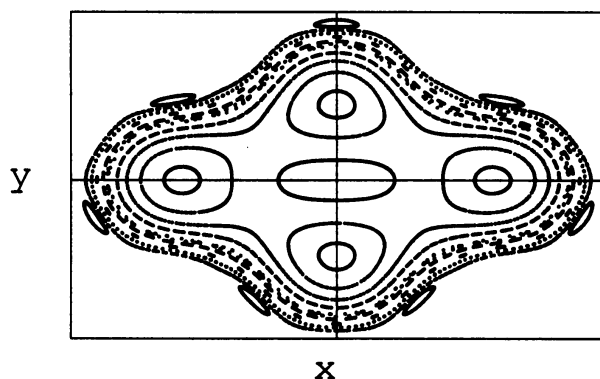
この手法を今度はカオスマッピング

$$x_{n+1} = \frac{x_n}{y_n^3}, \quad y_{n+1} = y_n \frac{h + x_{n+1}}{h + 1/x_{n+1}} \quad (17)$$

に適用する [6, 7]. 軌道の図を見やすくするため、まず $x_n/y_n^{3/2} \rightarrow x_n, y_n \rightarrow y_n$ の変数変換を行って、

$$x_{n+1} = \frac{x_n}{y_n^3} \left(\frac{h + x_n/y_n^{3/2}}{h + y_n^{3/2}/x_n} \right)^{-3/2}, \quad y_{n+1} = y_n \frac{h + x_n/y_n^{3/2}}{h + y_n^{3/2}/x_n} \quad (18)$$

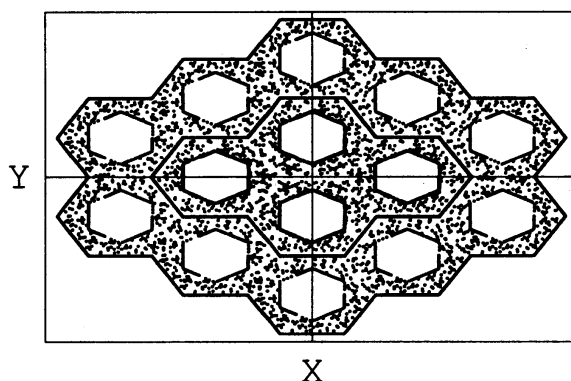
を得る。このときの軌道は次図のようになる。



次に変換 $x_n = e^{X_n/\epsilon}, y_n = e^{Y_n/\epsilon}, h = e^{H/\epsilon}$ により超離散化を行うと、

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= X_n - 3Y_n - \frac{3}{2} \left\{ \max(H, X_n - \frac{3}{2}Y_n) - \max(H, \frac{3}{2}Y_n - X_n) \right\} \\ Y_{n+1} &= Y_n + \max(H, X_n - \frac{3}{2}Y_n) - \max(H, \frac{3}{2}Y_n - X_n) \end{aligned} \quad (19)$$

が得られる。この軌道は次図である。



(18) と (19) の軌道の類似性は非常に強い。そして (19) の軌道は各領域が多角形によって区切られていることがわかる。これら多角形を \max と X_n, Y_n を用いて表現することは常に可能であり、それから (18) の軌道の大域的な性質を導くことができるのである。

5.2 楕円関数

次の例は楕円関数に関するものである。まず Jacobi の楕円関数 cn と楕円テータ関数には、たとえば次式のような関係がある。

$$\text{cnu} = \theta_0(0)\theta_2(v)/\theta_2(0)\theta_0(v)$$

ここで $u = \pi(\theta_3(0))^2 v$, $k = (\theta_2(0)/\theta_3(0))^2$, $\tau = \omega_1/\omega_3$ である (記号の詳しい説明はたとえば [8] を参照)。さらに、テータ関数に対して以下のようにパラメータ ε を導入する。なお、 $\theta_0(v)$ についてのみ説明を行うが、他のテータ関数についても同様である。まず、ヤコビの虚数変換の公式

$$\theta_0(v) = \sqrt{\frac{i}{\tau}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-i\pi(v-(j+1/2))^2/\tau}$$

より $\tau = i\varepsilon\pi/p$ とすれば

$$\theta_0(v) = \sqrt{\frac{p}{\pi\varepsilon}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-p(v-(j+1/2))^2/\varepsilon}$$

が得られる。すると $\varepsilon \sim +0$ の場合に

$$(\theta_0(v))^2 \sim \frac{p}{\pi\varepsilon} \left(e^{-p(\{v\}-1/2)^2/\varepsilon} + e^{-p(\{v\}+1/2)^2/\varepsilon} \right)^2$$

と評価できる。ただし、 $\{v\}$ は $\{v\} = v - [v]$ で定義され、 v の小数部分を表す。

他のテータ関数についても同様の評価を行うと、楕円関数 cn について

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log cn^2(pv/\varepsilon) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log(e^{-2p\{v\}/\varepsilon} + e^{-2p(1-\{v\})/\varepsilon}) \\ &= -2p \min(\{v\}, 1 - \{v\}) \end{aligned}$$

が成立する。この極限公式を用いると、次式の Quispel 系

$$x_{n+1}x_n^2x_{n-1} = \alpha + \beta x_n \quad (20)$$

とその解

$$x_n = a + b cn^2(\xi n; k) \quad (21)$$

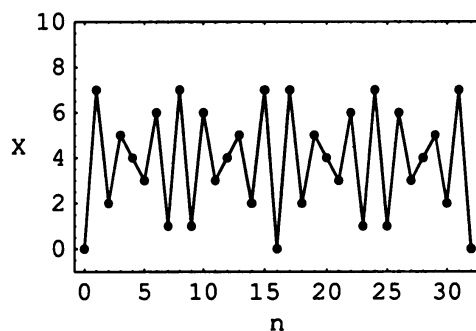
の超離散化を行うことができ、 $x_n = e^{X_n/\varepsilon}$ 等の変数変換により、方程式

$$X_{n+1} + 2X_n + X_{n-1} = \min(2p, X_n + 2q) \quad (22)$$

とその解

$$X_n = p \min\left(\frac{q}{p}, 2\left\{\frac{q}{2p}n\right\}, 2 - 2\left\{\frac{q}{2p}n\right\}\right) \quad (23)$$

のセットが得られる（詳しくは [9] を参照）。ただし、 p, q は $2/3 < q/p < 1$ を満たすパラメータである。このときに p, q を自然数にとると、 X_n は最大周期が $2p$ の整数値関数になる。以下に $p = 8, q = 7$ のときの解のプロットを示す。



整数値の周期関数が連続の楕円関数から導き出されるのは興味深い。数論や情報理論の分野でしばしば登場する mod 関数もこのような楕円関数の超離散化として自然に現れるなら、それら分野で新しい解析方法が得られるのではないだろうか。

参考文献

- [1] Wolfram S 1986 *Theory and Applications of Cellular Automata* (Singapore: World Scientific)

- [2] Tokihiro T, Takahashi D, Matsukidaira J and Satsuma J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3247
- [3] Nishinari K and Takahashi D 1998 *J. Phys. A* **31** 5439
- [4] Baccelli F, Cohen G, Olsder G J and Quadrat J P 1992 *Synchronization and Linearization* (John Wiley & Son)
- [5] Takahashi D and Kajiwara K 1999 solv-int/9903012
- [6] 木村欣司 早稲田大学理工学部情報学科平成 10 年度卒業論文
- [7] Hirota R, Iwao M, Ramani R, Takahashi D, Grammaticos B and Ohta Y 1997 *Phys. Lett. A* **236** 39
- [8] 森口繁一他 岩波数学公式集 III
- [9] Takahashi D, Tokihiro T, Grammaticos B, Ohta Y and Ramani A 1997 *J. Phys. A* **30** 7953