数理解析研究所講究録
第 836 巻 1993 年 191-199



# 非線形拡散のモンテカルロ・シミュレーション

小川 重義 (京都工芸繊維大学)

**1, 序.** 次のような非線形拡散方程式の初期値問題の数値解法について統計数学からの接近法とその有効性について考えてみたい：

$$
(1)\quad \begin{cases} \partial_t u(t,x)+\partial_x\{a(t,x,H(x:u(t)))\cdot u\} = \frac{1}{2}\partial_x\partial_x\{(b(t,x,H(x:u(t))))^2\cdot u\} \\ u(0,x)=f(x)\ , \end{cases}
$$

$a(t,x,y)$, $b(t,x,y)$ $((t,x,y)\in[0,T]\times\mathbf{R}^1\times\mathbf{R}^1)$, $f(x)$ 及び $H(x)$ は実数値関数であり，特に $f(x)$ は以下の話との関係で確率分布密度関数としておく．即ち，

$$
(2)\qquad f(x)\geq 0\ ,\qquad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx=1.
$$

方程式 (1) で表される拡散現象の粒子レベルでの運動は次の (Itô 型) 確率微分方程式で記述されると見なされる．( (3) で定まる $u(t,x)$ は，存在するならば，初期値問題 (1) の解を与えると言う意味で.)

$$
(3)\quad \begin{cases} dX_t(\omega)=a(t,X_t,H(X_t:u(t)))dt+b(t,X_t,H(X_t:u(t)))dW_t \\ X_0(\omega)=\xi(\omega)\quad (\xi\sim f(x)dx) \\ u(t,x)dx=P\{X_t\in[x,x+dx)\} \end{cases}
$$

ここに，$W_t(\omega)$, $(\omega\in\Omega,\ t\geq 0)$ は適当な確率空間 $(\Omega,F,P)$ 上で与えられたブラウン運動であり，$\xi(\omega)$ は $f(x)$ を分布密度とする確率変数である．

この様な拡散粒子系のモンテカルロ・シミュレーションを通じて初期値問題 (1) の数値解を得ることの有効性ついて考えてみるのは統計的理論の応用として極めて興味深い問題である．本稿ではそうした主題への第一歩として (3) で表される非線形拡散過程の数値近似に焦点を当てて議論を進めていくことにする． その前に (1) 或は (3) のやや特殊な型の方程式をモ

デルとした理由を説明しておこう．即ち我々は，統計的手法の適用を意図する限り，これらが次のような「普通の」方程式よりもより現実に即したモデルであると考えるからである．

$$(1)' \quad \begin{cases} \partial_t u(t,x) + \partial_x\{a(t,x,u(t,x))\cdot u\} = \frac{1}{2}\partial_x\partial_x\{(b(t,x,u(t,x)))^2\cdot u\} \\ u(0,x) = f(x)\ , \end{cases}$$

$$(3)' \quad \begin{cases} dX_t(\omega) &= a(t,X_t,u(t,X_t))dt + b(t,X_t,u(t,X_t))dW_t \\ X_0(\omega) &= \xi(\omega) \quad (\xi \sim f(x)dx) \\ u(t,x)dx &= P\{X_t \in [x,x+dx)\} \end{cases}$$

実際，(3)' の数値解を求めることを考えてみると，その手順は以下のようになるであろう；

($1_{st}$) 定められた分割 $\Delta = \{t_k = k\cdot h\ (h = T/N), k = 0,1,\cdots,N\}$ に応じて方程式 (3)' を差分化する．

($2_{nd}$) $\overline{X}_0 = \xi(\omega)$ とおく．

($3_{rd}$) $k$−step 目の近似値，$\overline{X}_k$ が得られたとして $(k+1)$−step 目 $\overline{X}_{k+1}$ を求めるために，差分式に於て必要となる諸係数を $\overline{X}_k$ の標本値を基に算出する．

($4_{th}$) 上の操作を $k = N-1$ となるまで繰り返す．

ここで問題になるのは3番目の手順である．方程式が非線形で，解 $X_t$ そのものの分布密度 $u(t,x)$ が係数に含まれるためにこの量を近似解 $\overline{X}_k(\omega)$ の（独立な）標本 $\{\overline{X}^i_k(\omega);\ 1\le i\le N_0\}$ から推定しなければならない．これは統計学に於て Density Estimation (cf.[5]) の問題として古くから研究されているものである．直ちに思い付くものとして経験分布，

<u>**例**</u> $\mathbf{M}u(t_k,dx) = \dfrac{1}{N_0}\{\text{Nr.of Samples } X^i_k \in [x,x+dx),\ (1\le i\le N_0)\}$

による推定法がある．理論的には $N_0 \longrightarrow \infty$ に応じて $\mathbf{M}u(t_k,\cdot) \longrightarrow u(t_k,\cdot)$ となるがこれによって連続量 $u(t_k,x)$ の良い近似が得られるとは期待しがたい．実際にはこれに基づく次のような推定法[1]が一般的である．

$$(4) \quad H(x;\mathbf{M}u(t)) \ (= u(t,x) \text{ の推定量}) = \int_{-\infty}^{\infty} H(x-y)\mathbf{M}u(t,dy) .$$

ここに，$H(x)$ は適当に滑らかな可積分実数値関数である．ここで，$N_0 \longrightarrow \infty$ の極限状態を考えるとき我々は方程式 (3)(或は (1)) ではなくて (3)' ((1)') を扱っていることを知るのである．確率微分方程式の数値解析についての研究は古くからある（２５年以上の歴史 cf.[3]）が本稿のように非線形拡散に関するものは極めて少ない（筆者の知る限りない）．非線形現象解析の重要性から見れば少なからず意外なことであるがそれなりに問題点の多い主題であることも推察できよう．本稿はその様な分野での試みの一つである．
以下 Ogawa[5] に基づき，確率微分方程式 (3) の離散化と数値解の精度について最近の結果を紹介し更に実際の運用面における問題点等について考えてみる．尚，簡単のために空間変数 $x$ の次元が１である場合を考えるが展開される議論は演算上の適当な修正のもとにそのまま多次元の場合にまで適用可能である．

## 2, SDE の離散近似

**2.1.** 確率微分方程式 (3) 離散化と数値近似解の収束性について考える．その前に (3) の解について基本的なことを調べておこう．

<u>**仮定:**</u> 諸係数に次の仮定をおく．

(A,1) $a(t,x,u)$, $b(t,x,u)$ $((t,x,u) \in [0,T] \times \mathbf{R}^1 \times \mathbf{R}^1)$ are uniformly (in $t$) Lipschitz continuous in $(x,u)$

(A,2) $\exists C > 0,\ |a(t,x,y)| + |b(t,x,y)| \le C(1+|x|+|y|)\ \ \forall (t,x,y).$

[1] いわゆる，Kernel 法である．

(A,3) $H(x)$ $(x \in R^1)$ は区分的に滑らかであり有界な台を持つ.

(A,4) $\exists p \geq 1$ such that $E|\xi|^{2p} < +\infty$.

(A,5) $a(t,x,u)$, $b(t,x,u)$ は $t$ について $\alpha$-Hölder, 即ち;
$\exists C > 0$ such that
$|a(t,x,u) - a(s,x,u)| + |b(t,x,u) - b(s,x,u)| \leq C|t-s|^{\alpha}$.

**Proposition 1.** 仮定 (A,1)-(A,4) の下で次のことが言える.

(i) 方程式 (3) は任意の初期値 $\xi(\omega)$ に対して一意的な強い解 $X_t(\omega)$ を持ち,

(ii) 次の評価を満たす:

(a) $E|X_t|^{2p} \leq (1 + E|\xi|^{2p})e^{Ct}$

(b) $E|X_t - X_s|^{2p} \leq C_2(1 + E|\xi|^{2p})|t-s|^p$ .

(略証) 命題1の前半部は逐次近似法に基づく通常の方法で検証される. 後半部については, まず $p=1$ の場合には成立していることと方程式 (3) が次のように書けることに注意する:

$$(5) \qquad \begin{cases} dX_t &= \tilde{a}(t,X_t)dt + \tilde{b}(t,X_t)dW_t, \\ X_0(\omega) &= \xi(\omega), \end{cases}$$

ここに

$$\tilde{a}(t,x) = a(t,x,E'H(x - X_t(\omega'))), \ \tilde{b}(t,x) = b(t,x,E'H(x - X_t(\omega'))).$$

ところが, 仮定 (A,1)-(A,3) よりこれらの新しい係数 $\tilde{a}(\cdot)$, $\tilde{b}(\cdot)$ は次の性質を持つことが分かる.

$(A,1)'$ $\exists C > 0$ such that $|\tilde{a}(t,x) - \tilde{a}(t,y)| + |\tilde{b}(t,x) - \tilde{b}(t,y)| \leq C|x-y|$.

$(A,2)'$ $\exists C > 0$ such that $|\tilde{a}(t,x)|^2 + |\tilde{b}(t,x)|^2 \leq C(1 + |x|^2)$.

これより後は標準的な議論 (cf.[1]) にしたがって後半部の結論

が得られる．　　　　　$Q.E.D.$

上記の書換え（i.e.(3) $\rightarrow$ (5)）に注意すれば更に次の結果が得られる（証明は Kanagawa[2] とほぼ同様の議論で与えられる）．

**Proposition 2.**　　$\forall\epsilon > p$ に対して；

$$E[\max_{0\le k\le N-1}\sup_{t_k\le t\le t_{k+1}}|X_t - X_{t_k}|^{2p}] \le h^p(\log\frac{1}{h})^{\epsilon}, \quad (t_k = k\cdot h,\ h = T/N)$$

2.2. Euler-Maruyama **近似.**　方程式 (3) を次のように離散化する．

$$(6)\quad \begin{cases} Y_0^h(\omega) &= \xi(\omega), \\ Y_{k+1}^h(\omega) &= Y_k^h(\omega) + a(t_k, Y_k^h, H(Y_k^h : \mathbf{M}\overline{u}(t_k)))\cdot h \\ & \qquad + b(t_k, Y_k^h, H(Y_k^h : \mathbf{M}\overline{u}(t_k)))\cdot \Delta_k W \\ Y_t^h(\omega) &= Y_k^h(\omega) + \dfrac{t-t_k}{h}\cdot\Delta_k Y^h, \quad for\ \ t\in[t_k, t_{k+1}) \end{cases}$$

ここに，$\Delta_k W = W(t_{k+1}) - W(t_k)$, $\Delta_k Y^h = Y_{k+1}^h - Y_k^h$ また $\mathbf{M}\overline{u}(t)$ は $Y_t^h(\omega)$ の temporal distribution $\overline{u}(t,\cdot)$ の大きさ $N_0$ の標本 $\{Y_t^h(\omega^i), i = 1, 2, \cdots, N_0\}$ of $Y_t^h(\omega)$ から構成される Monte-Carlo estimate である．

近似過程 $Y_t^h(\omega)$ は方程式 (3) に Euler 差分法を適用して得られる離散解を折れ線接続したものであり，故丸山儀四郎先生の先駆的業績 ([4]) にちなんでこの様な近似は Euler-Maruyama 近似と称されている．　さて，この Scheme は Monte-Carlo Estimator $\mathbf{M}\overline{u}(t_k,\cdot)$ を具体的に与えて初めて実行可能なものとなる．　Monte-Carlo estimator として経験分布（前出の例）を当てるのはその一例であるが，以後の議論に於て本質的であるのは Estimator の形ではなくて精度であるから，ここではどの様な Estimator $\mathbf{M}\overline{u}$ を使用するかは特定せずただ次の要請 (H) を満たすものであることだけを仮定して議論を進めることにする．

仮定 (H), $\mathbf{M}\overline{u}(t_k) = \overline{u}(t_k, dx) + \epsilon_h(t_k, dx)$ ここに，$\epsilon_h(\cdot)$ は次のような random measure である;

$$E(\int |\epsilon_h(t, dx)|)^{2p} < Ch^{2p\eta}, \qquad \text{for some} \quad \eta > 0.$$

**(注)** 仮定 (H) は次の事を意味している；

$$E(|H(x; \mathbf{M}\overline{u}(t_k)) - H(x; \overline{u}(t_k))|^{2p}) \le C \cdot h^{2p\eta}, \ \text{ for } \ \forall H(\cdot) \in C^1.$$

## 2.3. 結果.

議論の便宜上次のような補助的近似過程を考える．

$$\begin{cases} Z_t^h(\omega) = Z_k^h(\omega) + \overline{a}(t_k, Z_k^h)(t - t_k) + \overline{b}(t_k, Z_k^h)(W(t) - W(t_k)), \ (t_k \le t \le t_{k+1}) \\ Z_0^h(\omega) = \xi(\omega), \quad Z_k^h = Z_{t_k}^h(\omega) \quad (k = 0, 1, \cdots, N) \end{cases}$$

ここに，$\overline{c}(t, x) = c(t, x, H(x; \mathbf{M}\overline{u}(t_k))) \quad (c(\cdot) = a(\cdot), b(\cdot))$ .

この $Z_\cdot^h(\omega)$ に対しては Proposition 1 より次の評価が得られる（証明は略す，Ogawa[5] を参照されたい）．

**Proposition 3.**

(7); $$E\{\sup_{0 \le t \le T} |X_t - Z_t|^{2p}\} \le Ch^\gamma, \qquad \gamma = p \cdot (2\alpha \wedge 1 \wedge 2\eta).$$

更にこれと Proposition 2 を組み合わせて次の結果が得られる．

**Theorem.**

$\forall \epsilon > p$ に対して $E(\sup_{0 \le t \le T} |X_t - Y_t^h|^{2p}) \le Ch^\gamma \cdot (\log \frac{1}{h})^\epsilon.$

（略証） 定義より $Y_k^h = Z_k^h$, $(\forall k)$ であることに注意すれば，

Proposition 2, 3 と次の不等式より結論が得られる．

$$E(\sup_{0\le t\le T}|X_t - Y_t^h|^{2p})$$

$$\le CE[\max_{0\le k\le N-1}\sup_{t_k\le t\le t_{k+1}}|X_t - X_{t_k}|^{2p} + \max_{0\le k\le N-1}\{|X_{t_k} - Y_k^h|^{2p} + |Y_{k+1}^h - Y_k^h|^{2p}\}]$$

$$\le C\{E(\max_k \sup_{t_k\le t\le t_{k+1}}|X_t - X_{t_k}|^{2p}) + E(\max_k |X_{t_k} - Y_k^h|^{2p})\}$$

$$\le C\{h^\gamma(\log\frac{1}{h})^\epsilon + h^\gamma\} \le Ch^\gamma(\log\frac{1}{h})^\epsilon \qquad Q.E.D.$$

この結果によれば，当然予想されたことではあるが，Monte-Carlo estimator $\mathbf{M}\overline{u}$ の精度(即ち 指数 $\eta$) が近似過程の精度に大きな影響を与えていることが分かる． 例えば，Estimator として経験分布に基ずくもの（前出の例）を採用した場合は$\eta = 1/2$ と見積ることが出来，更に諸係数 $a(t,x,u)$, $b(t,x,u)$ が $t$ について滑らかであるとすれば; $E\{\sup_t|X_t - Y_t^h|^{2p}\} \le C\cdot h^p$. となりこれは通常の SDE ( i.e. 線形拡散過程の場合）に適用した Euler 法の精度である． 逆に言えば，$\eta \le 1/2$ であるようなときはこれ以上に差分法の精度を上げても余り意味がない．

この定理の副産物として容易に次のことが分かる．

**Corollary.** $\gamma > 1$ となるほどに，条件 (A,4) における $p(>1)$ が十分大きく取れれば， $\lim_{h\to 0}\sup_t|X_t - Y_t^h| = 0$, (P-a.s.) が成り立つ．

（略証） 実際， $\gamma > 1$ ならば $\sum_N(\log N)^\epsilon/N^\gamma$ であるから， $\sum_N\sup_{0\le t\le T}|X_t - Y_t^h|^{2p} < +\infty$, (P-a.s.) となり，これより結論を得る．

**3, 後記.** 以上の議論に従えば近似解 $\{Y_k^h\ (k = 0, 1.\cdots, N_0)\}$ を構成する手順は次のようになるであろう．

**step 0** Set $h := T/N,\ t_k := kh,\ \Delta_k W := W(t_{k+1}) - W(t_k)$

**step 1** Generate *sufficiently* many random numbers $\{\xi(\omega^i); 1 \le i \le N_0\}$, each of which follows the same law $f(x)dx$.

**step 2** Set $Y_0^h(\omega^i) := \xi(\omega^i),\ H(x; \mathbf{M}\overline{u}(0)) := \int H(x-y)f(y)dy$

$\overline{c}(0,x) := c(0,x,H(x;\overline{u}(0))), (c = a, b)$

**step 3** Compute $Y_k^h(\omega^i), (k \ge 1)$ by the formula

$Y_k^h = \overline{a}(t_{k-1}, Y_{k-1}^h)h + \overline{b}(t_{k-1}, Y_{k-1}^h)\Delta_{k-1}W + Y_{k-1}^h.$

**step 4** Compute Function, $H(x; \mathbf{M}\overline{u}(t_k)) := \sum_{i=1}^{N_0} H(x - Y_k^h(\omega^i))/N_0$

**step 5** Compute Function, $\overline{c}(t_k, x) := c(t_k, x, H(x; \mathbf{M}\overline{u}(t_k)))$

**step 6** Set $k = k+1$

**step 7** Return to *step 3* while $k \le N$.

さてこれまで近似過程の精度に関する結果を見てきたのであるが，それでは分布密度関数 $u(t,x)$ の近似については如何なることが言えるのであろうか？　これについては既に上記 Step 4 (or (4)) で implicite にその推定値を Kernel 法により求める一例が示されている．Kernel $K(\cdot)$ の形が具体的に与えられたとしてこれが近似値としてどの様な精度を持つものであるかを見るのは今の場合それ程難しくない．一般にこれは Density Estimation の問題であると同時に解の性質の研究にも関係する極めて興味深い問題であるが，この主題についてはまた稿を改めて議論することにしたい．
尚, 本稿を纏めるに当たり Density Estimation の問題について，早稲田大学理工学部の草間時武教授から参考文献を始め貴重な助言を頂き大変参考になりました．改めて謝意を表する次第です．

## 参考文献；

[1] Friedman,A.; "Stochastic Differential Equations and Applications", Acedmic Press (1976), New York.

[2] Kanagawa,S.; Yokohama Math.Journ. Vol.36, pp81-85,(1988)

[3] Kloeden,P.E. and Platen,E. ; Stochastic Hydrol.Hydraul. 3, pp.155-178, (1989)

[4] Maruyama,G.; Rend.Circ.Mat. Palermo 4 pp41-49, (1955)

[5] Ogawa,S.; Monte Carlo Simulation of Nonlinear Diffusion Processes, *to appear* , (1991)

[6] Silverman,B.W.; "Density Estimation for Statistics and Data Analysis", Chapman and Hall (1986), New York