超離散化と統計力学

@adamu_of_FUN

平成 31 年 3 月 19 日

1　はじめに

離散系の研究は日本物理学会においては領域 11 というセッションに分類される．応用数理の分野における新しい計算手法の開拓はそれが何を意味するのか，どのような意義があるのかといった疑問を乗り越える事は避けて通れない．本文献では，筆者である私が卒研で用いた超離散化という手法に関して，その他の分野だとどのように役立つのかといった質問を度々受けた．文献 [1] において，コラムとして超離散化と統計力学について軽く紹介されていたので，その議論を具体的に展開することを本文献の目的とする．

2　超離散化とは

超離散化について簡潔に述べると, 微分方程式を離散化し, max-plus を代数構造とする方程式への変換操作のことである. 超離散化の定義を述べる前に max-plus 代数におけるの定義を挙げた上で, 超離散化の方法について述べる.

2.1　max-plus 代数

この節では max-plus 代数についての定義 [1, 2, 6, 7] を述べる．本来は次の定義 1 を述べる前で，そもそもの話として max の記号の定義をするために，集合論における直積を定義するところから始めなければばならないのであるが，私自身ちゃんと理解できている自覚がないため，ここでは割愛させて頂くことにする．参考文献としては文献 [5, 7] が挙げられる．

定義 1　実数 a, b に関して

$$\max\{a,b\} = \begin{cases} a, & a \leq b \\ b, & b < a \end{cases} \tag{1}$$

と定める.

すなわち, 実数 a, b の 2 項演算 $\max(a, b)$ を a, b のうち大きい方の値をとる演算とする. ただし, $a = b$ のときは $\max(a, b) = a(= b)$ とする. max 演算において, 以下のような式が成立する.

$$\begin{gathered} \max\{a,b\} = \max\{b,a\}(\text{交換法則}) \\ \max\{\max\{a,b\},c\} = \max\{a,\max\{b,c\}\}(\text{結合法則}) \end{gathered} \tag{2}$$

これに加えて, 演算 $+$ を導入すると, 交換法則 $a + b = b + a$ や結合法則 $a + (b + c) = (a + b) + c$ が成立する. また, 実数上での和積に関する分配法則に対応して,

$$a + \max\{b,c\} = \max\{a+b, a+c\} \tag{3}$$

が成立する [6].

2.2　超離散化の定義

超離散化 [1, 7] とは, 離散化における手法の 1 つである. 通常の離散化は独立変数を離散化することであり, それに加えて超離散化は従属変数をも離散化し, 全ての変数を離散化してしまうことを指す.

超離散化では, 実数 ε, A, B に対して極限に関する次の公式を用いる.

$$\lim_{\varepsilon \to +0} \log \left(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon} \right) = \max(A, B) \tag{4}$$

証明

1)　$A < B$ の場合

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \to +0} \log \left(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon} \right) &= \lim_{\varepsilon \to +0} \left\{ \varepsilon \log \left(e^{A/\varepsilon} \left(1 + e^{(B-A)/\varepsilon} \right) \right) \right\} \\
&= \lim_{\varepsilon \to +0} \left\{ \varepsilon \log e^{A/\varepsilon} + \varepsilon \log \left(1 + e^{(B-A)/\varepsilon} \right) \right\} \\
&= \lim_{\varepsilon \to +0} \left\{ A + \varepsilon \log \left(1 + e^{(B-A)/\varepsilon} \right) \right\} \\
&= A + (B - A) \\
&= B
\end{aligned}$$

また, $A > B$ の場合も同様に示すことができる.

2)　$A = B$ の場合

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \to +0} \log \left(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon} \right) &= \lim_{\epsilon \to +0} \epsilon \log \left(2e^{A/\varepsilon} \right) \\
&= A + \lim_{\epsilon \to +0} \epsilon \log 2 \\
&= A
\end{aligned}$$

したがって, 上記の公式 (4) が成立することが示された. したがって,

$$\epsilon \log \left(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon} \right) \quad \stackrel{\epsilon \to +0}{\longrightarrow} \max(A, B) \tag{5}$$

ような極限操作のことを超離散化という.

一般化すると, $A_1, ..., A_n$ の場合,

$$\lim_{\varepsilon \to +0} \varepsilon \log \left(e^{A_1/\varepsilon} + e^{A_2/\varepsilon} + \ldots + e^{A_n/\varepsilon} \right) = \max \{A_1, A_1, ..., A_n\} \tag{6}$$

が成立する. 超離散化によって得られる数式は max という演算と+(四則演算における加法) の 2 つの演算で記述される. 代数学的には max を加法, +を乗法とする環の構造になっている [6].

2.3　超離散化

超離散化をするためにはモデル式をまず差分形式に変換する必要がある．例えば，非線形な微分方程式系では超離散化の手段の 1 つにトロピカル差分化という方法があり, トロピカル差分化による超離散化 [1, 3, 6, 7] について述べる. 以下，次の放物型の偏微分方程式の場合で考える.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) - g(u) \tag{7}$$

ただし, $u = u(x, t)$, α は拡散係数, $f(u), g(u)$ である. これを超離散化するためには, まず差分形式にする必要があるので, j, n をそれぞれ時間と空間の座標として, $\Delta t = t/j, \Delta x = x/n$ とすると,

$$\frac{u_n^{j+1} - u_n^j}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{n+1}^j - 2u_n^j + u_{n-1}^j}{(\Delta x)^2} + f\left(u_n^j\right) - g\left(u_n^j\right) \tag{8}$$

と差分化できる．ここで, 以下 2 つの置き換えを行う．

$$m(u_n^j)=\frac{1}{2}(u_n^{j+1}+u_n^{j-1}) \tag{9}$$

また, $f\left(u_n^j\right)-g\left(u_n^j\right)$ を

$$u_n^j\frac{f\left(u_n^j\right)-g\left(u_n^j\right)}{u_n^j+\Delta tg\left(u_n^j\right)} \tag{10}$$

とおいて, $\frac{1}{2}=\alpha\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ とすると,

$$u_{n+1}^j=m(u_n^j)\frac{\left(f\left(u_n^j\right)+\Delta tg\left(u_n^j\right)\right)}{\left(f\left(u_n^j\right)+\Delta tg\left(u_n^j\right)\right)} \tag{11}$$

を得る．この差分化の方法をトロピカル差分化 [7] という．したがって, 時間刻みのパタメータ $\Delta t=\varepsilon$ とすると

$$u_{n+1}^j=m\left(u_n^j\right)\frac{m\left(u_n^j\right)+\epsilon f\left(m\left(u_n^j\right)\right)}{m\left(u_n^j\right)+\epsilon g\left(m\left(u_n^j\right)\right)} \tag{12}$$

と離散化ができる．ただし, ε は時間刻みの変数である．この式は超離散化することが可能である．まず, $\varepsilon=\exp(E/\lambda), u_n^j=\exp\left(U_n^j/\lambda\right), f\left(u_n^j\right)=\exp\left\{F\left(U_n^j\right)/\lambda\right\}, g\left(u_n^j\right)=\exp\left\{G\left(U_n^j\right)/\lambda\right\}$
と変数変換を行い, さらに,$\lambda\to+0$ の極限をとる．このとき行なっているのが,

$$\lim_{\lambda\to+0}\lambda\log\left(e^{U/\lambda}+e^{V/\lambda}\right)=\max(U,V) \tag{13}$$

という極限操作 [3] である．(9) の超離散化は,

$$M\left(U_n^j\right)=\max\left(U_n^{j+1},U_n^{j-1}\right) \tag{14}$$

である．これを用いると, (12) より

$$e^{U_{n+1}^j/\lambda}=e^{M(U_n^j)/\lambda}\frac{e^{(M(U_n^j)-E)/\lambda}+e^{F(M(U_n^j))/\lambda}}{e^{(M(U_n^j)-E)/\lambda}+e^{G(M(U_n^j))/\lambda}} \tag{15}$$

両辺の対数をとり,

$$\frac{U_{n+1}^j}{\lambda}=\frac{M\left(U_n^j\right)}{\lambda}+\log\left\{M\left(U_n^j\right)-E,F\left(M\left(U_n^j\right)\right)\right\}-\log\left\{M\left(U_n^j\right)-E,G\left(M\left(U_n^j\right)\right)\right\} \tag{16}$$

両辺に λ を乗じて,

$$U_{n+1}^j=M\left(U_n^j\right)+\lambda\log\left\{M\left(U_n^j\right)-E,F\left(M\left(U_n^j\right)\right)\right\}-\lambda\log\left\{M\left(U_n^j\right)-E,G\left(M\left(U_n^j\right)\right)\right\} \tag{17}$$

となる．ここで，超離散化の公式 (4) より, 離散モデル (12) の超離散化は,

$$U_{n+1}^j=M\left(U_n^j\right)+\max\left\{M\left(U_n^j\right)-E,F\left(M\left(U_n^j\right)\right)\right\}-\max\left\{M\left(U_n^j\right)-E,G\left(M\left(U_n^j\right)\right)\right\} \tag{18}$$

となる [3]. このように, 放物型の偏微分方程式を超離散化する方法は文献 [1, 3, 7] で用いられている.

3 統計力学での超離散系

まず結論から先に述べると，超離散化は統計力学における低温極限と考えることに相当する．ここでは，温度 T，体積 V，粒子数 N での分配関数の定義を

$$Z(T,V,N)=\sum_i e^{-E_i/k_BT} \tag{19}$$

とする [4]．ただし，$E_i(i=1,2,\cdots)$ はエネルギー固有値，k_B は Boltzmann 定数である．(19) の両辺の対数を取ると，

$$\log Z(T, V, N) = \log \sum_i e^{-E_i/k_B T} \tag{20}$$

逆温度 $\frac{1}{k_B T} = \beta$ として，(20) の両辺を β で微分すると，

$$\begin{aligned} \frac{d \log Z}{d\beta} &= \frac{1}{Z}\frac{dZ}{d\beta} \\ &= \frac{1}{Z}\left\{\sum_i (-E_i) e^{-\beta E_i}\right\} \\ &= -\sum_i E_i p_i \\ &= -< E > \end{aligned} \tag{21}$$

途中で p_i が現れるのは，いま注目する系がエネルギー固有状態 i をとる確率は p_i は正確に記述すると，

$$p_i^{(can,\beta)} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)} \tag{22}$$

となるからである [4]．ここで話を元に戻すと，(21) の左辺は

$$\frac{d}{d\beta} = \frac{d}{d(1/k_B T)} = -k_B T^2 \frac{1}{dT} \tag{23}$$

とも書けるので，

$$< E >= k_B T^2 \left(\frac{d \log Z}{dT}\right)_{V,\,N} \tag{24}$$

がいえるので，(21) は

$$\frac{d}{dT}\frac{-k_B T \log Z}{T} = -\frac{< E >}{T^2} \tag{25}$$

ここで (26) とギブスヘルムホルツの式：

$$\left(\frac{d}{dT}\left(\frac{F}{T}\right)\right)_{V,\mathrm{N}} = -\frac{U(T, V, N)}{T} \tag{26}$$

を比較してみると，$U = < E >$ がいえるので，

$$\therefore F = -k_B T \log \sum_i e^{-E_i/k_B T} \tag{27}$$

となる [4]．これがヘルムホルツ自由エネルギーと定義されるものである．(27) において，温度 T を絶対温度に近づけると，

$$\begin{aligned} \lim_{T\to+0} F &= -\max_i(E_i) \\ &= \min(E_i) \end{aligned} \tag{28}$$

となる．この式が意味していることは，最低エネルギーの固有状態が実現可能であるということであり，この絶対温度に近づける操作が超離散化に相当するということなのである．

参考文献

[1] 広田良吾，高橋大輔，差分と超離散，共立出版 (2003).

[2] 高井重昌，max-plus 代数ってなに?，システム/制御/情報，Vol.44，No.1，pp.39 − 40(2000).

[3] 村田実貴生，非可積分系の離散化と超離散化,，数理解析研究所講究録別冊，B41:85-99(2013).

[4] 田崎晴明，統計力学 I，培風館 (2013).

[5] 松坂和夫，集合・位相入門，岩波書店 (1996).

[6] 安部秀哉，超離散化による反応拡散系のセルオートマトン化，公立はこだて未来大学 卒業論文 (2019).

[7] 大森祥輔，時空間パターン形成現象に対する超離散化法を用いた解析，早稲田大学大学院先進理工学研究科物理学及応用物理学専攻，博士論文 (2016).