確率モデルによる拡散過程のシミュレーション

森　まどか　(指導教員：吉田裕亮)

1　はじめに

拡散とは，粒子，熱，運動量などが自発的に散らばり広がる物理現象である．この現象は着色した水を無色の水に滴下したときや，煙が空気中に広がるときなど，日常よく見られる．これらは，化学反応や外力ではなく，流体の乱雑な運動の結果として起こるものである．言わば拡散は輸送現象の一種と言え，拡散方程式と呼ばれる方程式で表現されている．

本研究では，さまざまな自然現象のもとになっている拡散現象及び拡散過程について，その根底となっている確率微分方程式を利用し，確率モデルを用いた数値シミュレーションを行う．ここでは，我々の生活にも身近な自然現象のひとつである，部屋のほこりの拡散についてシミュレーションを行った結果を示したい．

2　拡散過程

決定論的な系の時系列を記述する際には，微分方程式が用いられる．それに対し，ランダムな系の時系列を記述する場合に用いられるものとして確率微分方程式がある．その中で，特別な性質を持つモデルの一つとして拡散過程が挙げられ，一般に以下のような拡散方程式として与えられる．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \Big(F(\phi, \vec{r}) \nabla \phi(\vec{r}, t) \Big)$$

ただし，$\phi(\vec{r}, t)$ は位置 $\vec{r}$ と時刻 t における拡散物質の密度，$F(\phi, \vec{r})$ は位置 $\vec{r}$ における密度 ϕ の集団的な拡散係数，∇ は空間微分作用素である．

拡散過程は，ブラウン運動 B_t，ドリフト関数 $\mu(x,t)$，拡散係数 $\sigma(x,t)$ を用いて与えられる確率微分方程式

$$dX_t = \mu(X_t, t)dt + \sigma(X_t, t)dB_t$$

で表すことができる．すなわち，拡散過程は拡散係数とドリフト関数の 2 つのパラメータによって特徴付けられているといえる．

3　確率微分方程式のモデル

拡散現象をシミュレーションするために，正方格子に分割した領域を考える．

前節で述べた通り，拡散過程は拡散係数とドリフト関数で特徴づけられる．これら 2 つのパラメータを正方格子上で以下のように表現する．

3.1　拡散係数の変化

拡散係数を正方格子上では，図 1 のように点が上下左右に動く確率の大小で表現する．ただし，全方向に等確率に点が移動するように設定する．例えば，図 1 の p (ただし，$0 \leq p \leq \frac{1}{4}$) の値を与える場合，$p$ の値が増すにつれて点は移動しやすくなる．つまり，p の値を大きくすればするほど拡散係数は大きく設定される．

3.2　ドリフト関数の変化

ドリフト関数を正方格子上では，図 2 のように，点が各方向に動く確率を変化させることで表現する．この確率配分の比率によって，どの方向に進みやすくなるかが定まる．確率が高い方向にほど，点は移動しやすい．例えば，図 2 において，$p = s = 0.3, r = q = 0.1, t = 0.2$ とした場合，点は，p, s の方向へ進みやすくなり，左下にドリフトがかかったといえる．

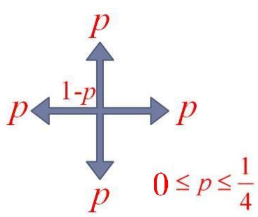

図1

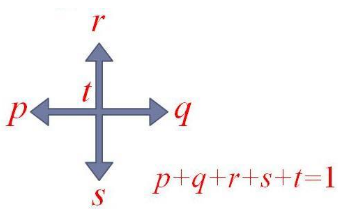

図2

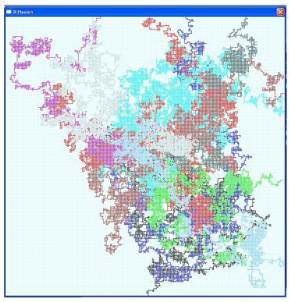

図3：拡散係数の変化

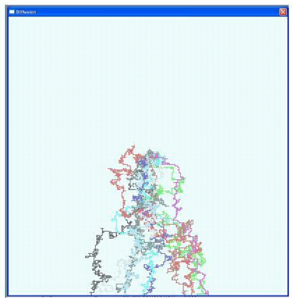

図4：ドリフト関数の変化

4　拡散過程をシミュレーションする手順

1. 正方格子を用意.
2. 原点に多数の粒子 (例：100.000 個) を用意する．各粒子は，単位時間ごとに最隣接の格子点に移動するか，現時点の格子点に留まるかのいずれかを繰り返す．この際，粒子は一様乱数を発生させ，各格子点に設定されている確率に従い動かされる．
3. 指定した条件を満たしたときに終了する．

   例）ステップ数の上限に到達した場合，
   　　壁に到達した場合

5　拡散のシミュレーション

単位時間に一度ずつ衝撃を受けるブラウン運動において，4 の手順に従って，$t = 0$ で原点にいた多数の粒子が $t = n$ の際どのように存在しているかを以下に記す．図 5 は，n 単位時間後のときの粒子の状態，図 6,7 はその際の点の位置をヒストグラムで表現したものである．

5.1　ドリフト関数が 0 の場合

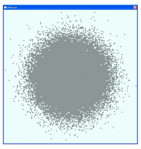
図5

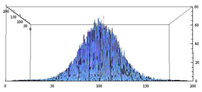
図6

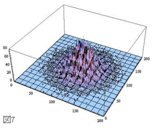
図7

図 6,7 より，全方向に等確率に拡散していく場合，正規分布の形をとるといえる．

5.2　ドリフト関数が 0 でない場合

原点からの距離に比例して動きにくくなるようドリフトをかけた．

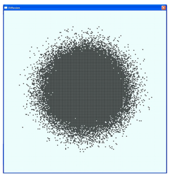
図8

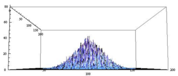
図9

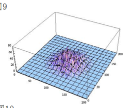
図10

確率をわずかに変えるだけで，5.1 の図 6 に見られる正規分布の形は崩れる．

6　ホコリの粒子のシミュレーション

6.1　ホコリの粒子の拡散現象

5 章で行ったシミュレーションでは，ステップ数を増やし続けると，中心部にあった粒子が徐々に拡散していき，用意した座標をはみ出してしまう．ここでは，正方格子上の枠を壁と見なし，壁まで粒子が到達した場合，その壁で粒子が跳ね返るようなモデルを構成した．これを表現するため，壁と見なした座標において，これ以上進むことのできない方向への確率を 0 とする．また，座標によって，粒子が 1 ステップで移動する距離を以下のように変えた．各点の座標から最も近い距離にある壁を 2 つ選び，各壁からの距離の合計 D を決めた．D がある一定の距離 T までは，粒子の動きを活発にし，そのある一定の距離よりも短い距離であれば，粒子の動きを小さくするように設定した．

以下の図 11 は初期状態，図 12 は十分に時間がたった状態である．

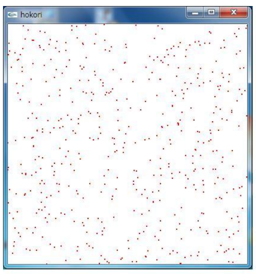

図11

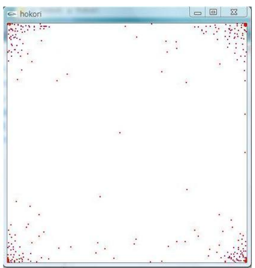

図12

粒子が隅にたまる様子が表現できた．

6.2　ホコリの粒子の拡散現象（領域内に壁がある場合）

6.2 で行うシミュレーションでは，正方格子内に壁を加え，複雑な形をした部屋のモデルを考えることにする．粒子が現在いる座標から最も近い 2 つの壁を選び，距離の合計 D を計算し，粒子の動きに変化をつけた．

実験結果は以下のようになる．

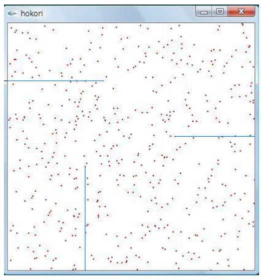

図13

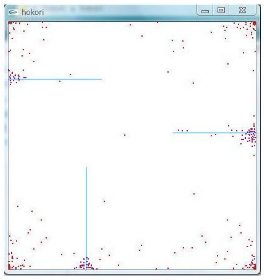

図14

6.3　ホコリの粒子の拡散現象（領域内に障害物がある場合）

6.3 では，正方格子内に障害物を用意し，ほこりのシミュレーション行った際の粒子の動きを見る．ここでは，障害物を下図のような正方形の形状のものとする．

実験結果は以下のようになる．

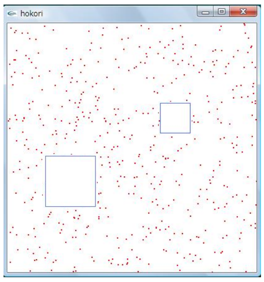

図15

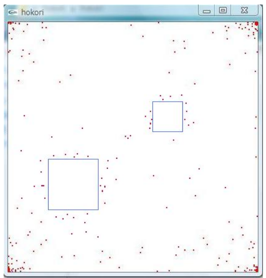

図16

7　まとめと今後の課題

拡散現象は，多数の粒子のランダムウォークによって表現した．拡散係数，ドリフト関数の 2 つを設定さえすれば，様々なシミュレーションを行うことができるとわかった．今回は単純な 2 次元モデルによるシミュレーションを行ったが，他の形状の領域でシミュレーションを行ったり，あるいは 3 次元領域を作り出すことで，より複雑なシミュレーションをすることが課題である．

8　参考文献

1. ＪＡＶＡによるモンテカルロ・シミュレーションの世界，http://www.ishikawa-lab.com/index.html