

Explicit difference scheme by moment optimization for the Fokker-Planck equations

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2017-06-13 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 田中, 健一郎 メールアドレス: 所属:
URL	https://mu.repo.nii.ac.jp/records/540

Fokker-Planck 方程式に対する モーメント最適化を用いた陽的差分法

Explicit difference scheme by moment optimization for the Fokker-Planck equations

田中健一郎¹
Ken'ichiro Tanaka

概要

移流拡散過程の確率密度関数の時間発展を表す Fokker-Planck 方程式に対する差分値解法を考える。陽解法を考える場合、通常よく用いられる差分法では、数値解の発散を防ぐために時間・空間の離散化幅に制限が必要である。この制限を回避するためには陰解法などを用いる必要があるが、これは陽解法の場合よりは計算負荷が大きくなる。一方、田中・戸田 (2013) は、与えられた確率密度関数に対し、その一般化モーメントを保持したまま近似離散分布を導く方法を考案した。本研究では、この方法を Fokker-Planck 方程式の数値解法に応用し、通常よく用いられる差分法では数値解が発散するような時間・空間の離散化幅でも、陽解法のみで安定的計算を可能にする方法を提案する。

1 導入

移流拡散過程の確率密度関数 $f(t, x)$ の時間発展を表す Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \frac{\partial}{\partial x} (a(x)f(t, x)) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (b(x)f(t, x)) \quad (1.1)$$

$$f(0, x) = f_0(x) \quad (1.2)$$

の差分値解法について考える。ここで $t \geq 0, x \in \mathbf{R}$ である。以下、時間・空間の離散化幅をそれぞれ $\Delta t, \Delta x > 0$ とし、 $f(i \Delta t, j \Delta x)$ の近似解を f_{ij} とする。方程式 (1.1) の離散化に際し、時間 t に関して前進差分を用い、空間 x に対して適切な差分を用いると、この場合の差分スキームは然るべき行列 A を用いて $\mathbf{f}_{i+1} = A \mathbf{f}_i$ と表される。ここで $\mathbf{f}_i = (f_{i1}, \dots, f_{iM})^T$ である。これにより

$$\mathbf{f}_i = A^i \mathbf{f}_0 \quad (i = 1, 2, \dots) \quad (1.3)$$

のように数値解を求めるのが通常の陽解法である。なお、方程式 (1.1) のような移流方程式に対しては、空間差分に風上差分法と呼ばれる差分法を用いるのが有効であることが知られている。本稿では、通常の差分法としてこの風上差分法を考える。式 (1.3) のような陽解法が安定であるためには Δt と Δx の範囲に制限を設ける必要があり、その制限された範囲の外では数

¹ 武蔵野大学数理工学センター員 / 武蔵野大学工学部数理工学科准教授

値解が発散して無意味な計算になることはよく知られている．差分法においてこのような現象を防ぐためには陰解法などを用いるのが標準的であるが，この場合は一ステップの計算を行うたびに一次方程式を解く必要があり，陽解法に比べて計算負荷が大きくなる．そこで本研究では，陽解法の一ステップを後述する一般化モーメント調整により行うことで，通常の陽解法の場合より広い範囲の Δt と Δx に対しても安定的な計算をする方法を提案する．

2 連続分布の一般化モーメントを保つ離散近似法

提案手法を提示する準備として，与えられた連続分布を，その一般化モーメントを保持したまま離散近似する方法を説明する．この方法は田中・戸田 [1, 2] による．以下の結果は x の空間が多次元でも成り立つが，本稿では簡単のため 1 次元とする．

連続分布の確率密度関数 $f(x)$ が与えられたとし，適当な重みの列 $\{w_j\}_{j=1}^M \subset \mathbf{R}$ および，確率を考える領域内の離散点の列 $\{x_j\}_{j=1}^M \subset \mathbf{R}$ が与えられたとする．さらに，一般化モーメント²を定義する関数 $T_\ell(x)$ ($\ell = 1, \dots, L$) に対し

$$\bar{T}_\ell = \int_{\mathbf{R}} T_\ell(x) f(x) dx \quad (2.1)$$

の値が既知とする．ここで次の最適化問題を考える．

$$(P) \quad \min_{\{f_j\}} \sum_{j=1}^M f_j \log \frac{f_j}{w_j f(x_j)} \quad \text{s. t.} \quad \sum_{j=1}^M f_j T(x_j) = \bar{T}, \quad \sum_{j=1}^M f_j = 1, \quad f_j \geq 0.$$

ここで $T(x) = (T_1(x), \dots, T_L(x))$ および $\bar{T} = (\bar{T}_1, \dots, \bar{T}_L)$ とおいた．これは，厳密な一般化モーメント \bar{T} を持つ離散分布 $\{f_j\}$ で，元の連続分布の離散化 $\{w_j f(x_j)\}$ に Kullback-Leibler 情報量の意味で最も近いものを求める問題である．

この問題 (P) の解は，適当な仮定のもとで一意に存在し，その Fenchel 双対問題

$$(D) \quad \min_{\lambda \in \mathbf{R}^L} \sum_{j=1}^M w_j f(x_j) e^{\langle \lambda, T(x_j) - \bar{T} \rangle}$$

の解 $\bar{\lambda} \in \mathbf{R}^L$ を用いて

$$f_j = \frac{w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) - \bar{T} \rangle}}{\sum_{j=1}^M w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) - \bar{T} \rangle}} = \frac{w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) \rangle}}{\sum_{j=1}^M w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) \rangle}} \quad (2.2)$$

と書けることが分かっている [1]．ここで $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は \mathbf{R}^L における内積を表す．さらに，この離散分布 $\{f_j\}$ の f に対する「弱位相の意味での」誤差は， $\{w_j\}$ と $\{x_j\}$ によって定まる数値積分公式の誤差にのみ依存する．つまり有界連続関数 g に対し，

$$\left| \int_{\mathbf{R}} f(x) g(x) dx - \sum_{j=1}^M f_j g(x_j) \right| = O(\max\{E_{g,M}, E_{1,M}, E_{T,M}\}) \quad (M \rightarrow \infty) \quad (2.3)$$

² x の冪に限らないという意味でこの言葉を用いている．

となることが分かっている [2]. ここで

$$E_{g,M} = \left| \int_{\mathbf{R}} f(x) g(x) dx - \sum_{j=1}^M w_j f(x_j) g(x_j) \right|,$$

$$E_{1,M} = \left| \int_{\mathbf{R}} f(x) dx - \sum_{j=1}^M w_j f(x_j) \right|,$$

$$E_{T,M} = \left\| \int_{\mathbf{R}} f(x) T(x) dx - \sum_{j=1}^M w_j f(x_j) T(x_j) \right\|$$

である. ここで $\|\cdot\|$ は \mathbf{R}^L におけるノルムを表す.

3 モーメント最適化を用いた陽解法

提案手法を示す. まず与えられた Fokker-Planck 方程式 (1.1) から一般化モーメントの時間発展を計算し, 次に前節の (2.2) のように離散分布を定める方法を応用する. 以下, $x_j = j \Delta x$ ($j = 1, \dots, M$) とおく.

3.1 一般化モーメントの時間発展の計算

一般化モーメントの時間依存を明示し $\bar{T}_\ell(t)$ ($\ell = 1, \dots, L$) と表す. 方程式 (1.1) の両辺に $T_\ell(x)$ を掛けて x に関し \mathbf{R} で積分すると

$$\frac{d}{dt} \bar{T}_\ell(t) = \int_{\mathbf{R}} \{-T'_\ell(x) a(x) f(t, x) + T''_\ell(x) b(x) f(t, x)\} dx \quad (3.1)$$

となる. これを時間・空間に関し離散化する. 時間に対して前進差分を用い, 空間に対しては, 積分を中点則により近似すると

$$\bar{T}_{\ell,i+1} = \bar{T}_{\ell,i} + \Delta t \sum_{j=1}^M \Delta x \{-T'_\ell(x_j) a(x_j) + T''_\ell(x_j) b(x_j)\} f_{ij} \quad (3.2)$$

となる³. ここで $\bar{T}_\ell(i \Delta t)$ の近似値を $\bar{T}_{\ell,i}$ とおいた. 必要に応じ, 式 (3.2) でより高次の時間差分を用いることもできるが, いずれにしても今回は陽解法を考えることにする.

3.2 提案手法

式 (1.3) のような陽解法で起きうる数値解の発散を回避するため, 次の方法を考える. \mathbf{f}_i と $\bar{T}_{\ell,i}$ ($\ell = 1, \dots, L$) まで求めたとし, \mathbf{f}_{i+1} を以下の手順で定める.

³ なお, ここでは $f(t, x)$ が $x \rightarrow \pm\infty$ で十分速く 0 に収束し, 式 (3.1) の積分を有限区間 $[x_1, x_M]$ で打ち切っても良い近似になるという前提を置いている. 実際にこのことが保証されるための a, b, f_0, T に関する条件は本稿では論じず, 今後の課題とする.

Step 1. (3.2) で $\bar{T}_{\ell,i+1}$ ($\ell = 1, \dots, L$) を求める. これが陽解法の部分である.

Step 2. $\bar{T}_{\ell,i+1}$ で \mathbf{f}_i を「モーメント調整」したものを \mathbf{f}_{i+1} とする. つまり (D) に倣って

$$\min_{\lambda \in \mathbf{R}^L} \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \lambda, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle} \quad (3.3)$$

を解き⁴, この解を $\bar{\lambda}_{i+1}$ とおいて, (2.2) に倣って

$$f_{i+1,j} = \frac{f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle}}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle}} = \frac{f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) \rangle}}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) \rangle}} \quad (3.4)$$

と更新する. 実際の数値計算では最右辺の式を用いる.

この方法では, 次のような仕組みで 1 時点先の数値解 \mathbf{f}_{i+1} を計算している; まず Step 1 で 1 時点先の一般化モーメント $\bar{T}_{\ell,i+1}$ を通常の差分法で計算し, 次に Step 2 で, 一般化モーメント $\bar{T}_{\ell,i+1}$ を持つ離散分布のうち, 数値解 \mathbf{f}_i に (離散) Kullback-Leibler 情報量の意味で最も近いものを数値解 \mathbf{f}_{i+1} として定める. そのため, この方法では, もはや (1.3) のような \mathbf{f}_{i+1} の更新式は使っておらず, 実質的な時間発展の計算は Step 1 の式 (3.2) のみである. 式 (3.2) には右辺に Δt と Δx の冪の比が現れないため, 時間発展の計算の安定性が, これらの比に依存しないであろうことが期待される.

なお, (3.3) を解く際, λ の初期値や終了条件に工夫をしないと, 計算時間が長くなり陽解法の利点が活かさない可能性がある. この部分に対する工夫は今後の課題である. また, この方法に対しては, 数値解の安定性や, $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ とした場合の厳密解への収束性が, 理論的に完全に示せているわけではない. これについては, 文献 [3] に, 収束解析の方針を示してある. ただし, これには厳密性に欠ける部分があるため, 完全な収束解析は今後の課題である.

4 数値実験

本節では, 方程式 (1.1) の具体例に対して,

- (a) 時間: 前進差分, 空間: 風上差分 による方法,
- (b) 提案手法

⁴ この問題は, $\lambda \in \mathbf{R}^L$ の関数

$$F(\lambda) = \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \lambda, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle}$$

に対し, λ が \mathbf{R}^L 内の点を全てとりうる際の $F(\lambda)$ の最小値を求める問題である. ここで F は一般には非線形関数となる. このような問題は非線形計画問題 (非線形最適化問題) と呼ばれ, 数理計画法の分野では標準的な問題である. 解を求める数値計算法には色々あるが, 主なものとして **Newton 法** がある. 今回の場合は F が凸関数なので扱いやすく, Newton 法で比較的容易に解が求められる. ここでは実際には Newton 法を少し調整したものを用いている.

をそれぞれ適用し、数値解が安定的に計算できる $(\Delta t, \Delta x)$ の範囲を数値的に調べた結果を示す。方程式 (1.1) の具体例としては、次のものを用いた。

例 1 方程式 (1.1) で $a(x) \equiv -1, b(x) \equiv 1$ としたもの

例 2 方程式 (1.1) で $a(x) = -(2-x)/2, b(x) \equiv 1$ としたもの

また、初期条件 (1.2) の f_0 は、共通に

$$f_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}\right), \quad \sigma_0 = 0.2 \quad (4.1)$$

とした。時刻 t の計算範囲を $[0, 3]$ 、空間 x の計算範囲を $[-5, 5]$ とし、

$$\Delta t = 0.001, 0.002, \dots, 0.05 \quad (0.001 \text{ 刻みの } 50 \text{ 個の値}), \quad (4.2)$$

$$\Delta x = 0.01, 0.02, \dots, 0.35 \quad (0.01 \text{ 刻みの } 35 \text{ 個の値}) \quad (4.3)$$

のそれぞれに対して数値解 $\{f_{ij}\}$ の計算を行い、これらが不正な値にならないような $(\Delta t, \Delta x)$ の組を列挙した。ここで、 $\{f_{ij}\}$ の値が不正でない条件は、

$$\max_j |f_{i_* j}| \text{ が非数値でなく、かつ } 0 < \max_j |f_{i_* j}| < \max_j |f_{0j}|$$

が成り立つこととした。ここで i_* は時間方向のインデックス i の最大値 ($3/\Delta t$ の小数点以下を四捨五入したもの) である。なお、(b) の提案手法に用いる $T(x)$ としては、いずれの例に対しても、 $T_1(x) = x, T_2(x) = x^2$ を用いた。また、計算は全て MATLAB[®] による倍精度浮動小数点数演算で行った。

以上の数値実験の結果を図 1-4 に示す。これらより、今回実験した範囲では、(a) の方法が不安定な場合でも、(b) の提案手法は安定に数値解を計算できることが分かる。さらに、(b) の提案手法による $t = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ における数値解を、厳密解と共に図 5-8 に示した。また、 $\Delta t, \Delta x$ をより小さくすることによる近似精度の変化を見るため、例 1 の $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ に対する (b) の提案手法による数値解を、同じく $t = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ について、厳密解と共に図 9-12 に示した。図 5-6 と図 9-10 を比較すると、後者の方が精度が向上していることが見て取れる一方で、図 7-8 と図 11-12 を比較すると、後者の方が精度が悪化、もしくは精度が向上しない結果になっている。これは、 $t = 1.5, 2.0$ の場合は、分布の「中央部分」が計算区間から外れていくことによる影響が出ているためと推定される。

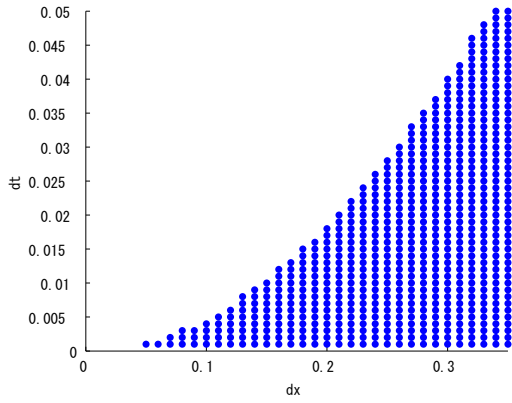


図 1 例 1 に方法 (a) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域.

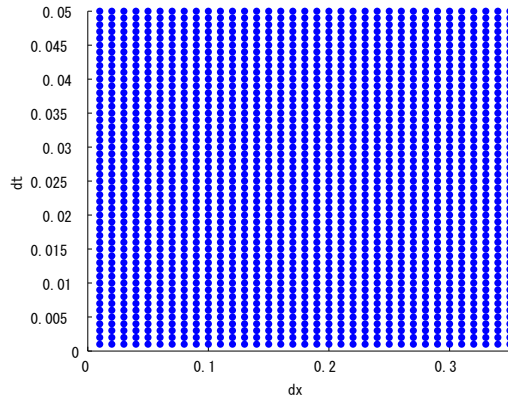


図 2 例 1 に方法 (b) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域.

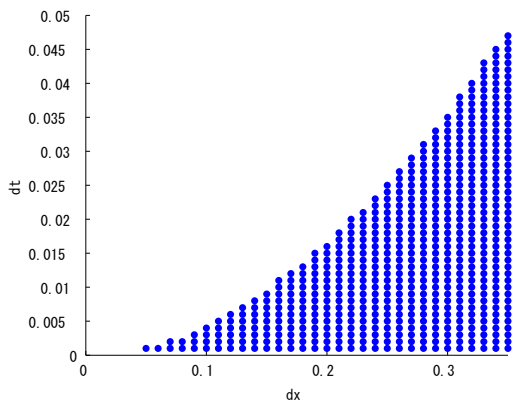


図 3 例 2 に方法 (a) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域.

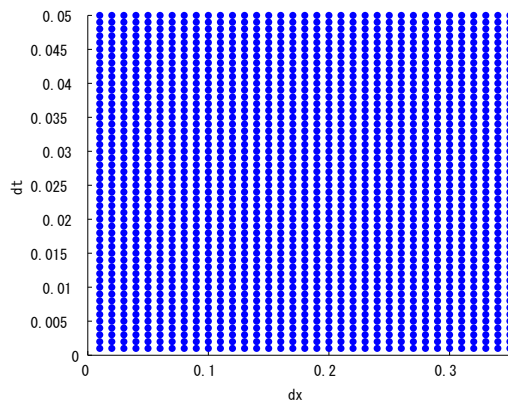


図 4 例 2 に方法 (b) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域.

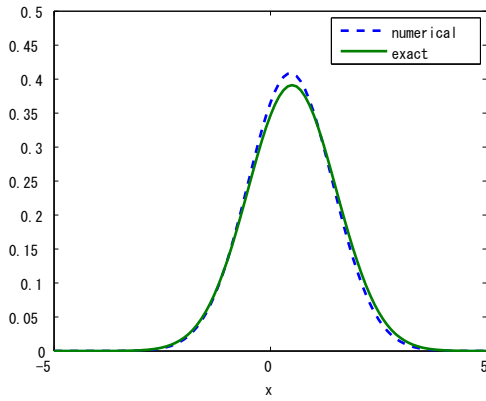


図 5 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 0.5$ における数値解と厳密解.

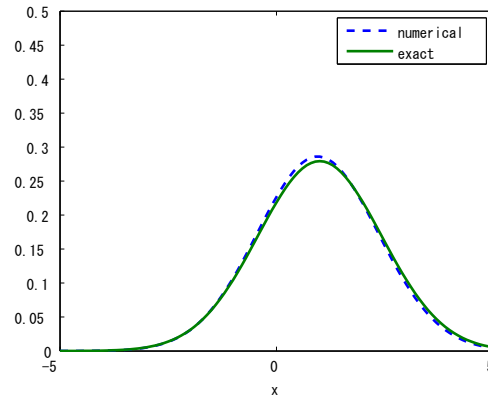


図 6 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 1.0$ における数値解と厳密解.

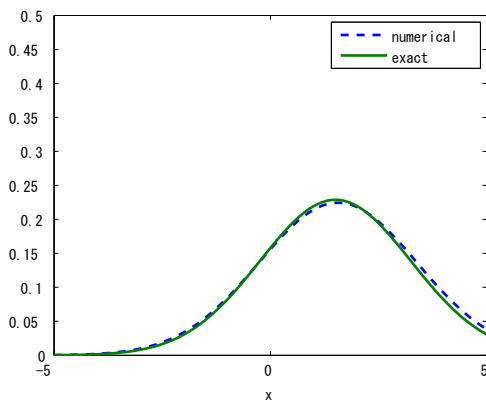


図 7 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 1.5$ における数値解と厳密解.

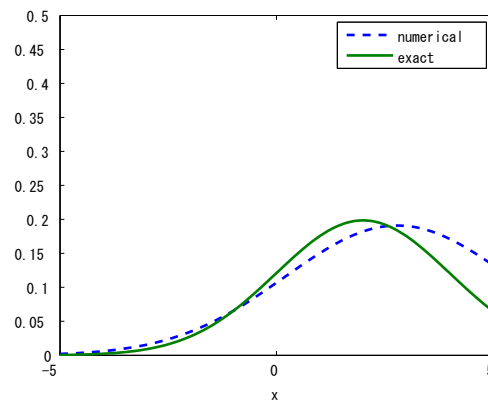


図 8 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 2.0$ における数値解と厳密解.

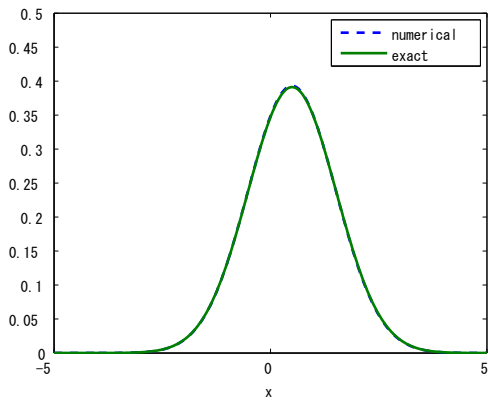


図 9 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 0.5$ における数値解と厳密解.

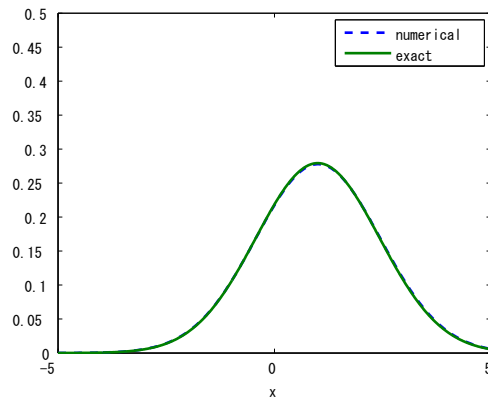


図 10 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 1.0$ における数値解と厳密解.

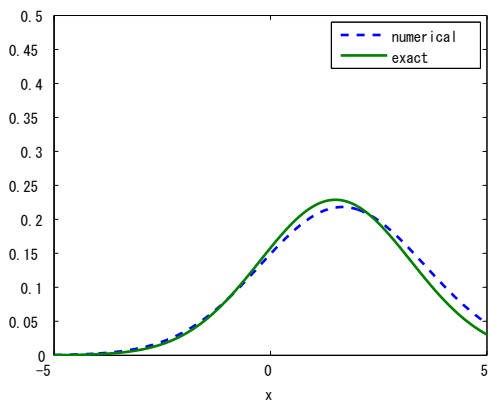


図 11 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 1.5$ における数値解と厳密解.

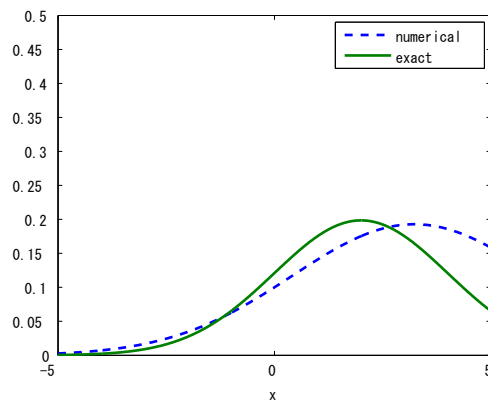


図 12 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 2.0$ における数値解と厳密解.

5 結語

本稿では、Fokker-Planck 方程式 (1.1) を初期条件 (1.2) のもとで解くための陽的な差分値解法として、第 2 節で提示した一般化モーメントを保持する連続分布近似法を用いる方法を提案した。この方法は、まず 1 時点先の一般化モーメント $\bar{T}_{\ell, i+1}$ を通常の差分法 (3.2) で計算し、次に一般化モーメント $\bar{T}_{\ell, i+1}$ を持つ離散分布のうち、数値解 \mathbf{f}_i に (離散) Kullback-Leibler 情報量の意味で最も近いものを式 (3.4) のように求め、これを数値解 \mathbf{f}_{i+1} とするという仕組みである。また、数値実験により、通常よく用いられる風上差分法では数値解が発散するような時間・空間の離散化幅でも、提案方法では安定的計算が可能になる例が示された。今後の課題として、最適化問題 (3.3) を解く際の効率化や、数値解の安定性および、 $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ とした場合の厳密解への収束性を理論的に完全に示すこと、また、より複雑な解を持つ Fokker-Planck 方程式への適用可能性の検討などが挙げられる。

参考文献

- [1] Ken'ichiro Tanaka, Alexis Akira Toda: Discrete approximations of continuous distributions by maximum entropy, *Economics Letters*, Vol. 118, Issue 3 (2013), pp. 445–450.
- [2] Ken'ichiro Tanaka, Alexis Akira Toda: Discretizing Distributions with Exact Moments: Error Estimate and Convergence Analysis, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 53, Issue 5 (2015), pp. 2158–2177 (doi:10.1137/140971269).
- [3] 田中健一郎 : Fokker-Planck 方程式に対するモーメント調整による陽的差分法, 京都大学数理解析研究所講究録, 印刷中.

(原稿提出: 2016 年 11 月 25 日; 修正稿提出: 2017 年 1 月 20 日)