

コルモゴロフ型方程式の数値解析に於ける ランダム粒子法のロバストネスについて

京都工芸繊維大学 小川 重義 (OGAWA Shigeyoshi)¹

1 KPP 方程式に対するランダム勾配法

線形、非線形を問わず拡散現象の担い手としての（仮想的）粒子集団を考え、その軌跡の確率的シミュレーションを通じて、該当する非線形偏微分方程式の数値近似解を構成する手法を「ランダム粒子法」という。元来、数値解析の分野において、いわゆる「確率・統計的手法」なるものは、変数の次元数が高い場合を除き、その精度や効率の点でそれ程高い評価を受けるものではなかった。しかし、ランダム粒子法に基づく確率論的手法では空間を格子で分割する必要が無いためこれに関わる作業から解放されることになり、従って特に非線形方程式の数値解析において、従来の有限差分法や有限要素法等の「決定論的手法」をそれらの点で凌駕するものであることが知られている。

ところでランダム粒子法については多くの研究結果が報告されているが、一つ気になることがある。それは、成功した数値実験例の報告において、どのような乱数が使用されたのかについて言及しているものが少ないことである。それ故、我々には実験の成功が幸運によるものなのかはたまた、近似手法の質の良さによるものなのかという疑問が常に残ることになる。一般に確率・統計的手法では（疑似）乱数の大量使用を前提としており、乱数の質の善し悪しは当然手法の有効性に大きな影響を与えうるものである。それ故、用いる確率・統計的近似の手法が使用乱数の分布の偏り（理論的に要求されるものからの）に対してどの程度の頑強性を有するか否かを検討しておくことは極めて重要なことであろう。

¹ogawa@ipc.kit.ac.jp

本稿では、Puckette のランダム勾配法を例に取り、粒子法のもつこうしたロバストネスとその程度についての理論的検証結果を、小川の最近の研究 ([3]) に基づいて紹介しておきたい。

1.1 Puckette の方法

議論を始めるために、まづ Puckette [5] が提唱した「ランダム勾配法」と主な結果を簡単に見ておくことにしよう。

次のようなコルモゴロフ型方程式の初期値問題についてその数値近似解を構成することが目的である。

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) = \nu \partial_x^2 u(t, x) + f(u(t, x)), & (0 < t \leq T) \\ u(0, x) = u^0(x) \quad \text{where } u^0(x) \text{ is such that,} \\ \quad 1 - u^0 \in \text{probability distribution function.} \end{cases} \quad (1)$$

ここに、 $f(x)$ は微分可能な実数値関数で以下のようなものとする：

$$(f) \quad 0 \leq f(x) \leq \exists A, \quad \text{supp } f \subset [0, 1].$$

(註 1) Puckette [5] では本来の Kolmogorov 方程式、即ち： $f(x) = x(1-x)$ の場合を扱っているが、ここでは議論にもう少し一般性を持たせて、条件 (f) を満たすものを対象 (cf.[2]) とする。我々にとって肝要なことは、初期値問題 (1) において、「1-分布関数」なる形の関数を初期データとして与えれば、解も同様な形の減少関数の中で定まるという環境である。

ランダム勾配法は基本的に次の2つの考えに基づいて構成されている、

[1] 離散化：

1. 時間区間 $[0, T]$ を K -個の分点、 $j \cdot \Delta t$ ($\Delta t = \frac{T}{K}$, $1 \leq j \leq K$) で分割し、時間ステップ $j \cdot \Delta t$ 毎に近似解、 $\tilde{u}^j(x)$ を構成していく。

2. 求める近似解を含め、全ての「1-分布関数」なる形の減少関数 $G(x)$ を階段関数 $G(x) = \sum_{i=1}^N w_i \cdot H(X_i - x)$ の形で近似表現する。
導入する粒子個数 N とその初期位置 X_i ($1 \leq i \leq N$) は適当に設定する。
3. $t = j \cdot \Delta t$ における近似解, $\tilde{u}^j(x) = \sum_i H(X_i^j - x) \cdot w_i^j$, を構成するには時間ステップの進行に従って、粒子の位置 X_i^j とその重み w_i^j を定めていけばよい。(粒子の位置とその重みの決定は次のようになされる)

[2] Operator Splitting : 初期値問題 1 の解を $F_t u_0(x)$ で表す。

1. まづ、単位ステップ Δt 当たりの作用素 $F_{\Delta t}$ を積 $D_{\Delta t} \cdot R_{\Delta t}$ で近似する。ただし、作用素 D_t, R_t はそれぞれ次のものである、即ち：
 $D_t v(x)$ は初期値問題、 $\partial_t u = \nu \partial_x^2 u$, $u(0, x) = v(x)$ の解を与え、
 $R_t u(x)$ は常微分方程式の初期値問題、 $\frac{d}{dt} v = f(v)$, $v(0, x) = u(x)$ の解を与える。
2. ついで、各作用素 $D_{\Delta t}, R_{\Delta t}$ を適当な数値積分作用素、 $\tilde{D}_{\Delta t}, \tilde{R}_{\Delta t}$ で近似する。 $\tilde{D}_{\Delta t}$ が粒子の位置 X_i^j を、また $\tilde{R}_{\Delta t}$ がそれぞれの重みを定める手順を指定することになる。

(註 2) Puckette [5] では、 $\tilde{D}_{\Delta t}$ として正規乱数で生成されるランダムウォークによる近似を、また $\tilde{R}_{\Delta t}$ として常微分方程式のオイラー差分に基づく近似法を採用している。近似計算の手順を具体的に表現すれば、以下のようなになる。但し、上記の単調減少型の関数 $g(x)$ に対してその近似階段関数を \tilde{g} の如く上に " \sim " をつけて表す。

♡ Algorithm :

- 1) N 個の粒子の初期位置 $\{x_1^0 < x_2^0 < \dots < x_N^0\}$ を次のように定め、

$$x_i^0 = u_0^{-1}(1 - i/N) \quad (1 \leq i \leq N - 1), \quad x_N^0 = u_0^{-1}\left(\frac{1}{2N}\right), \quad \text{ついで、}$$

初期データ $u^0(x)$ の近似関数を、 $\tilde{u}_0(x) := \sum_i H(x_i^0 - x)w_i^0$,

($w_i^0 = 1/N$) で定める ($H(x)$ は Heaviside 関数)。

- 2) j -step 目の近似解、 $\tilde{u}^j(x) = \sum_i H(X_i^j - x)w_i^j$, ($0 \leq j \leq K$) が定まったとして、 $(j+1)$ -step 目の $\tilde{u}^{j+1}(x) = \sum_i H(X_i^{j+1} - x)w_i^{j+1}$ を以下 (r) とその次の手順 (d) で決定する。

$$(r) \quad \tilde{v}^{j+1}(x) := \tilde{R}_{\Delta t} \tilde{u}^j(x) = \sum_i H(X_i^j - x)w_i^{j+1},$$

$$\text{ここに } w_i^{j+1} = w_i^j + \Delta t \{f(\tilde{u}_i^j) - f(\tilde{u}_{i+1}^j)\},$$

$$(d) \quad \tilde{u}^{j+1}(x) := \tilde{D}_{\Delta t} \tilde{v}^{j+1}(x) = \sum_i H(X_i^{j+1} - x)w_i^{j+1},$$

但し、 $\tilde{u}_i^j = \tilde{u}^j(X_i^j)$, また、 $\{\eta_i^j : 1 \leq j \leq K, 1 \leq i \leq N\}$ は $N(0, 2\nu \cdot \Delta t)$ に従う *i.i.d* 列。

- 3) X_i^{j+1} ($1 \leq i \leq N$) を大きさの順に並べ、ラベル i を付け替える。
- 4) 上の操作を $(j+1) = K$ となるまで続ける。

1.2 収束性についての既知の結果

上記の近似法の収束性について Puckette [5] は次の結果を得ている。

Theorem 1.1 $0 < \nu \leq 1$, $0 < \Delta t < 1$ とする。また時間刻み Δt は粒子数 N に応じて $\Delta t = O(N^{-1/4})$, と設定されているものとする。

る。

初期データ $u^0(x)$ が条件： $u^0 \in C^1$, $\partial_x u^0 \in L^1 \cap L^\infty$ を満たす時、パラメーター ν , Δt , N に依存しない適当な正定数 C_0, C_1, C_2 が存在して次の評価が成り立つ。

$$(p1) \quad E\|u(T, \cdot) - \tilde{u}^K(\cdot)\|_1 \leq \\ \left(1 + \frac{T}{C_0}\right) [e^T \|u^0 - \tilde{u}^0\|_1 + C_1 \sqrt{\nu} \Delta t + C_2 \frac{\ln N}{N^{1/4}}]$$

$$(p2) \quad \text{Var}(\|u(T, \cdot) - \tilde{u}^K(\cdot)\|_1) \leq \\ \left(1 + \frac{T}{C_0}\right) [e^T \|u^0 - \tilde{u}^0\|_1 + C_1 \sqrt{\nu} \Delta t + C_2 \frac{\ln N}{N^{1/4}}]^2 .$$

冒頭に記したように、乱数 $\{\eta_i^j\}$ が正規分布 $N(0, 2\nu\Delta t)$ に従うという仮定がこの手法の有効性にとってどの程度に重要なものなのかを検討するのがこの稿の目的である。

2 Perturbation

2.1 乱数分布のずれ

モンテカルロ法の計算機による実行においては、必要とされる（疑似）乱数はシステムが供給する $(0, 1)$ 上の一様乱数（以下、対応する確率変数を $\{\xi_i^j\}$ で表すことにする）に必要な加工を施して用いられるのが一般的であることに鑑み、次のような設定でこの問題を考えてみたい。

♠ 問題： 疑似乱数 $\{\eta_i^j\}$ が変形して $N(0, 2\nu\Delta t)$ とは異なる分布 P_{psi} を持つ (i.i.d) 乱数 $\{\xi_i^j\}$ になった時、ランダム粒子法にはどのような影響があるであろうか？ 但し、変質した乱数 $\{\xi_i^j\}$ は以下の要件は満たしているものとする。

♠ 仮定 H :

$$(r1) \quad \xi = \sqrt{2\nu\Delta t}\xi', \quad \xi' \sim \Psi(0, 1)$$

$$(r2) \quad |\xi_i^j| < \exists M \cdot \sqrt{2\nu\Delta t} \text{ P-a.s. } (\forall(i, j))$$

$$(例 1) \quad \xi = \sqrt{12\nu\Delta t} \cdot \zeta, \quad \zeta \sim U(-1/2, 1/2)$$

$$(例 2) \quad \xi = \sqrt{2\nu\Delta t} \cdot \zeta, \quad \zeta = \pm 1 \text{ with proba. } 1/2$$

2.2 主な結果

一般の分布 Ψ の標準正規分布 Φ からのズレを表す尺度として距離, $\delta(\Psi, \Phi) := \int_{R^1} |\Psi^{-1}(x) - \Phi^{-1}(x)| dx$ を導入する。 Ψ^{-1} , Φ^{-1} はそれぞれの分布関数の逆関数である。

我々の結果は以下の通りである。

Theorem 2.1 (*Ogawa [3]*) *Algorithm* で実行されるランダム粒子法において、正規乱数 $\{\eta_i^j\}$ の代わりに条件 (H) を満たす乱数 $\{\xi_i^j\}$ を用いた場合、得られる近似解 (前と同じ記号 $\tilde{u}^j(x)$ で表す) は以下の評価を満たす :

$$(o1) \quad E\|u(T, \cdot) - \tilde{u}^K(\cdot)\|_1 \leq (1 + \frac{T}{C_0})[e^T \|u^0 - \tilde{u}^0\|_1 \\ + C_1\sqrt{\nu\Delta t} + C_2 \frac{\ln N}{N^{1/4}} + C_3\sqrt{2\nu\Delta t}^{-1} \cdot \delta(\Psi, \Phi)]$$

$$(o2) \quad \text{Var}(\|u(T, \cdot) - \tilde{u}^K(\cdot)\|_1) \leq (1 + \frac{T}{C_0})[e^T \|u^0 - \tilde{u}^0\|_1 \\ + C_1\sqrt{\nu\Delta t} + C_2 \frac{\ln N}{N^{1/4}} + C_3\sqrt{2\nu\Delta t}^{-1} \cdot \delta(\Psi, \Phi)]^2$$

ここに C_3 は C_0, C_1, C_2 同様パラメータ $\nu, \Delta t, N$ に依存しない正定数である。

(註 3) 定理の表現が、 $\sqrt{\Delta t}^{-1}$ を含んだ上からの評価であるため、我々の結果はランダム粒子法のロバストネスを無条件に肯定するものにはなっていない。しかし、少なくとも近似の精度を保つ為に整えるべき環境を教えるものではある。例えば、この定理において我々は時間刻み幅 Δt と粒子数 N との間に、関係式： $\Delta t = O(N^{-1/4})$ が成り立つことを前提にしている。従ってこの定理によれば、乱数分布のずれを、 $\delta(\Psi, \Phi) = O(N^{-3/8})$ の程度に留める限り、純正の正規乱数を使った場合と同程度の精度が保証されることがわかる。

2.3 証明の概略 1

前に示した理由により、議論に現れる諸乱数の数学モデルとしての確率変数、 $\{\eta_i^j\}$, $\{\xi_i^j\}$ は全て計算機が発生する一様乱数を表す確率変数 $\{\zeta_i^j\}$ を加工したものが供給されていると見なしても議論の展開や手法の有効性になんらの制約を科するものではない。そこで、次のことを仮定 (H) につけ加える、

$$(r3) \quad \xi_i^j = \sqrt{2\nu\Delta t}\Psi^{-1}(\zeta_i^j), \quad \eta_i^j = \sqrt{2\nu\Delta t}\Phi^{-1}(\zeta_i^j)$$

♡ 近似の誤差, $E(N, \Delta t)$ の内訳を見ると :

$$\begin{aligned} (i) \quad E(N, \Delta t) &:= \|F_{\Delta t}^K u^0(\cdot) - (\tilde{D}_{\Delta t} \tilde{R}_{\Delta t})^K \tilde{u}^0(\cdot)\|_1 \\ &\leq \|F_{\Delta t}^K u^0 - (D_{\Delta t} R_{\Delta t})^K u^0\|_1 \\ &\quad + \|(D_{\Delta t} R_{\Delta t})^K u^0 - (D_{\Delta t} R_{\Delta t})^K \tilde{u}^0\|_1 \\ &\quad + \|(D_{\Delta t} R_{\Delta t})^K \tilde{u}^0 - (\tilde{D}_{\Delta t} \tilde{R}_{\Delta t})^K \tilde{u}^0\|_1 \\ &= E_1 + E_2 + E_3 \end{aligned}$$

(ii) E_1 (Splitting error), E_2 (離散化による誤差) そして E_3 (数値近似による誤差) のなかで E_3 がランダムな量である。

(iii) 前二者については次の評価が成り立つ：

- $E_1 \leq C_1 \Delta t$
- $E_2 \leq e^T \|u^0 - \tilde{u}^0\|_1$

乱数分布のずれに影響されるのは第3項 E_3 のみであり、従ってこの項について調べればよい。

♡ 更に誤差, $E_3(N, \Delta t)$ の内訳を見ると：

(i) E_3

$$= \left\| \sum_{j=0}^{K-1} (DR)^{K-j-1} D(R - \tilde{R})\tilde{u}^j + (DR)^{K-j-1} (D - \tilde{D})\tilde{R}\tilde{u}^j \right\|_1$$

(ii) $\|DR\| < e^T$ に注意して、

$$E_3 \leq e^T \sum_{j=0}^{K-1} \{ \|(R - \tilde{R})\tilde{u}^j\|_1 + \|(D - \tilde{D})\tilde{v}^j\|_1 \}$$

(iii) よって、項 $\|R\tilde{u}^j - \tilde{R}\tilde{u}^j\|_1$, $\|D\tilde{v}^j - \tilde{D}\tilde{v}^j\|_1$ の評価を求めることに帰着する。

♡ $\tilde{R}_{\Delta t}$: 近似操作 $\tilde{R}_{\Delta t}$ として、Euler Scheme を採用した場合、次の評価が成り立つことに注意する。

$$\sup_x |R_{\Delta t}\tilde{u}(x) - \tilde{R}_{\Delta t}\tilde{u}(x)| = \exists C_1(\Delta t)^2$$

♡ $\|R_{\Delta t}\tilde{u} - \tilde{R}_{\Delta t}\tilde{u}\|_1$ を評価するためには、粒子集団の拡がり具合を見積もる必要がある。乱数の正規性を手放すのかわりに有界性を仮定した見返りとして、次の結果を得ることができる。

Proposition 2.1 粒子の初期位置 X_i^0 ($1 \leq i \leq N$) が全て区間 $[-B, B]$ に収まるように正数 B をとる。このとき $\forall \gamma > 1$ に対して次の評価が成り立つ：

$$(R) \quad P(\|R_{\Delta t} \tilde{u}^j - \tilde{R}_{\Delta t} \tilde{u}^j\|_1 > 2C_1 L_\gamma (\Delta t)^2) \leq \frac{2}{N^\gamma},$$

ここに、 $L_\gamma = B + \gamma \sqrt{4\nu t (\ln N)}$.

♡ 項 $d^j = \|D_{\Delta t} \tilde{v}^j - \tilde{D}_{\Delta t} \tilde{v}^j\|_1$ の評価。

$$\heartsuit \quad d^j \leq \|(D_{\Delta t} - E_j \tilde{D}_{\Delta t}) \tilde{v}^j\|_1 + \|(\tilde{D}_{\Delta t} - E_j \tilde{D}_{\Delta t}) \tilde{v}^j\|_1$$

$$E_J(\cdot) = E(\cdot | X_i^l, 1 \leq i \leq N, 1 \leq l \leq j).$$

♡ bias 項については次の評価：

$$\text{Lemma 2.1} \quad E\|(D_{\Delta t} - E_j \tilde{D}_{\Delta t}) \tilde{v}^j\|_1 = \exists C \sqrt{\Delta t} \delta(\Phi, \Psi)$$

♡ fluctuation 項については次の各点評価が得られる：

Lemma 2.2

$$P(|\tilde{D}_{\Delta t} \tilde{v}^j(x) - E_j \tilde{D}_{\Delta t} \tilde{v}^j(x)| \geq \alpha N \bar{w}^j) \leq 2e^{-2N\alpha^2}, \quad (\alpha > 0)$$

ここに、 $\bar{w}^j = \max_i w_i^j$.

この2個の Lemma2.1, Lemma2.2 から次の評価：

Proposition 2.2

$$P(\|D_{\Delta t} \tilde{v}^j - \tilde{D}_{\Delta t} \tilde{v}^j\|_1 > \gamma F_1(N, \Delta t)) \leq \frac{C''}{N^\gamma}, \quad \forall \gamma \geq 1,$$

ただし、 $F_1(N, \Delta t) = C_4[\sqrt{\ln N}(\Delta t)^2 + \sqrt{\Delta t} \delta(\Psi, \Phi)]$

♡ 更に、Proposition 2.1 と Proposition 2.2 を組み合わせて、誤差項 E_3 に対する次の評価：

Proposition 2.3

$$P(|E_3| \geq \gamma F(N, \Delta t)) \leq \frac{C_1}{N^\gamma} \quad \forall \gamma \geq 1,$$

$$F(N, \Delta t) = 2C_4 T e^T [\ln N \cdot N^{-1/4} + \sqrt{\Delta t}^{-1} \delta(\Psi, \Phi)].$$

♡ E_1, E_2 に対する誤差評価（既出）と上の Proposition 2.3 より定理 2.1 を導くのはよく知られた操作である。

（後記） Puckette のランダム粒子法の拡張や改良については多くの研究がなされつつあるようである。しかし、本稿で取り上げた「乱数分布のずれに対するロバストネス」についての研究報告の存在を筆者は寡聞にして知らない。この方法に限らず、一般に確率・統計的手法の実際的応用に際してはこうした研究が不可欠であると考えている。数値解析という実際的であるべき主題において、こうした視点からの検討の重要性にふれた研究が殆ど見られないというのはちょっとした驚きであり、そのことが今回の研究につながった。

参考文献

[1] Kolmogorov, Petrovsky et Piscounov: Étude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique, *Bull. Univ. État Moscou, S'er. A, Math. Mécan.*, t.1, fasc.6, 1937

[2] 亀高 惟倫: 「非線形偏微分方程式」, 産業図書, 1977

- [3] Ogawa,S.: On a robustness of the random particle method applied to the Cauchy problem of Kolmogorov equation, *in preparaton*, (1995),
- [4] Ogawa,S.: Monte Carlo Simulation of Nonlinear Diffusion Processes, II, *Japan J. Indust.Appl.Math.* 1994,
- [5] Puckette,E.G.: Convergence of a Random Particle Method to Solutions of the Kolomogorov Equation, *Math.of Comput.*, vol.52, No.186, pp.615-645, 1989,
- [6] Hald,O.H.: Convergence of random methods for a reaction-diffusion equation, *SIAM J.Sci.Statist.Comput.*, vol.7, pp.1371-1386, 1981
- [7] Bernard,P.,Talay,D. and Tubaro,L.: Rate of convergence of a stochastic particle method for the Kolmogorov equation with variable coefficients, *preprint*, 1993
- [8] Roberts,S.: Convergence of a random walk method for the Burgers equation, *Math.of Comput.*, vol.52, No.186, pp.647-673, 1989