

Fokker-Planck 方程式に対する モーメント調整による陽的差分法

公立はこだて未来大学 システム情報科学部 田中健一郎

Ken'ichiro Tanaka

School of Systems Information Science, Future University Hakodate

ketanaka@fun.ac.jp

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数値解法を考える。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 はじめに

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

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \frac{\partial}{\partial x} (a(x) f(t, x)) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (b(x) f(t, x)) \quad (1)$$

$$f(0, x) = f_0(x) \quad (2)$$

の差分数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) 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

$$\mathbf{f}_i = A^i \mathbf{f}_0 \quad (i = 1, 2, \dots) \quad (3)$$

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) 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 (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¹を定義する関数 $T_\ell(x)$ ($\ell = 1, \dots, L$) に対し

$$\bar{T}_\ell = \int_{\mathbf{R}} T_\ell(x) f(x) dx \quad (4)$$

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

$$f_j = \frac{w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) - \bar{T} \rangle}}{\sum_{j=1}^M w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) - \bar{T} \rangle}} = \frac{w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) \rangle}}{\sum_{j=1}^M w_j f(x_j) e^{\langle \bar{\lambda}, T(x_j) \rangle}} \quad (5)$$

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、

$$\left| \int_{\mathbf{R}} f(x) g(x) dx - \sum_{j=1}^M f_j g(x_j) \right| = O(\max\{E_{g,M}, E_{1,M}, E_{T,M}\}) \quad (M \rightarrow \infty) \quad (6)$$

¹ 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

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

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

3 モーメント調整を用いた陽解法

提案手法を示す. まず与えられた Fokker-Planck 方程式 (1) から一般化モーメントの時間発展を計算し, 次に前節の (5) 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) の両辺に $T_\ell(x)$ を掛けて x に関し $\mathbf{R}$ で積分すると

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

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

$$\bar{T}_{\ell,i+1} = \bar{T}_{\ell,i} + \Delta t \sum_{j=1}^M \Delta x \{-T'_\ell(x_j) a(x_j) + T''_\ell(x_j) b(x_j)\} f_{i,j} \quad (7)$$

となる. 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 (7) 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 (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.

Step 1. (7) 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 f_i を「モーメント調整」したものを f_{i+1} とする. つまり (D) に倣って

$$\min_{\lambda \in \mathbf{R}^L} \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \lambda, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle} \quad (8)$$

を解き, この解を $\bar{\lambda}_{i+1}$ とおいて, (5) に倣って

$$f_{i+1,j} = \frac{f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle}}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{\ell,i+1} \rangle}} = \frac{f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) \rangle}}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) \rangle}} \quad (9)$$

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 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 f_i に (離散) Kullback-Leibler 情報量の意味で最も近いものを数値解 f_{i+1} として定める. そのため, この方法では, もはや (3) のような 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 (7) のみである. 式 (7) 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, (8) 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せない可能性がある. 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, 理論的に完全に示しているわけではない. ただ本稿では, 付録 A 節において, 厳密性を一部犠牲にして収束解析の方針を示してみた.

4 数値例

本節では, 方程式 (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

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) の具体例としては, 次のものを用いた.

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

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

また, 初期条件 (2) の f_0 は, 共通に

$$f_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}\right), \quad \sigma_0 = 0.2 \quad (10)$$

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,

$$\Delta t = 0.001, 0.002, \dots, 0.05 \quad (0.001 \text{ 刻みの } 50 \text{ 個の値}), \quad (11)$$

$$\Delta x = 0.01, 0.02, \dots, 0.35 \quad (0.01 \text{ 刻みの } 35 \text{ 個の値}) \quad (12)$$

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、

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

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、例 1 の $\Delta t = 0.05$, $\Delta x = 0.1$ に対する数値解を図 5-6 に示し、このうち (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 7-10 に示した²。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 11-14 に示した。図 7-8 と図 11-12 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 9-10 と図 13-14 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。

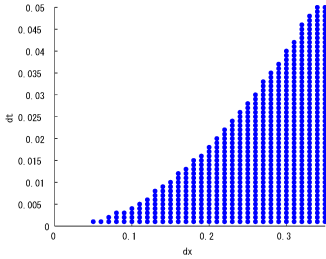


図 1: 例 1 に方法 (a) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域。

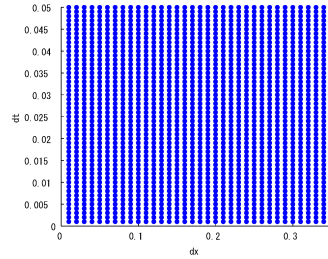


図 2: 例 1 に方法 (b) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域。

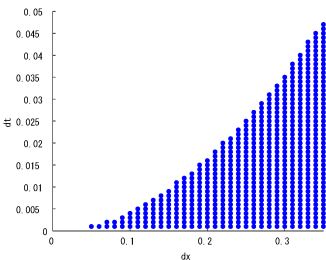


図 3: 例 2 に方法 (a) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域。

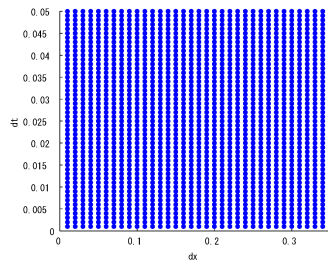


図 4: 例 2 に方法 (b) を適用した場合の $(\Delta t, \Delta x)$ に関する安定領域。

²講演時に示した図には一部誤りがあったため、修正してある。

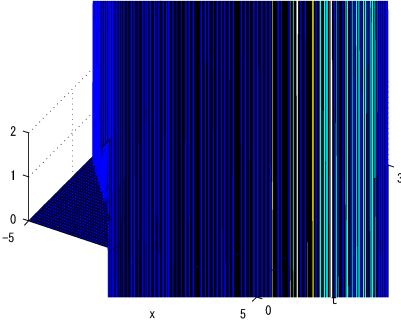


図 5: 例 1 に方法 (a) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の数値解.

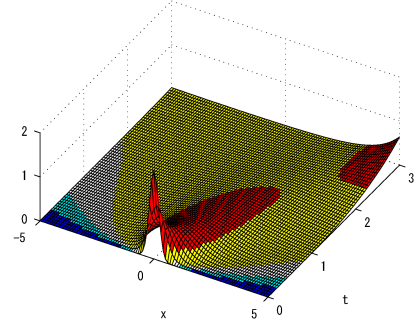


図 6: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の数値解.

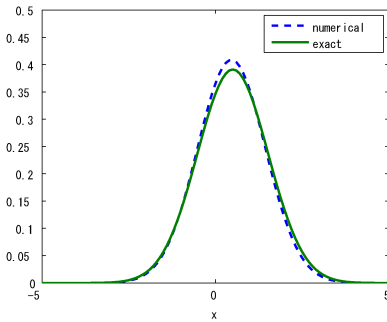


図 7: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 0.5$ における数値解と厳密解.

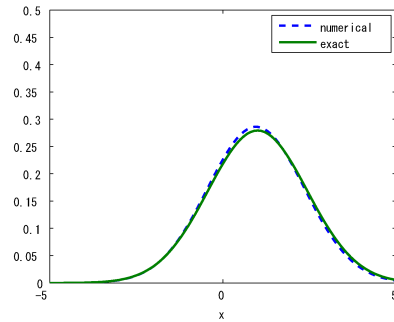


図 8: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 1.0$ における数値解と厳密解.

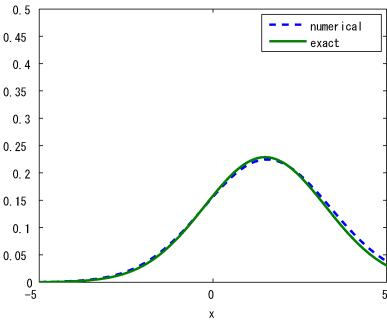


図 9: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 1.5$ における数値解と厳密解.

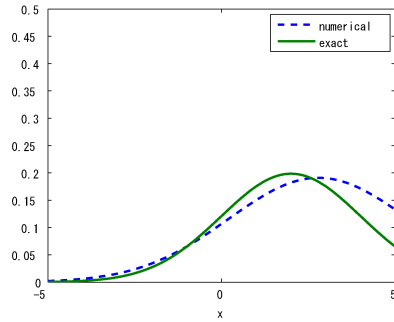


図 10: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.05, \Delta x = 0.1$ として適用した場合の $t = 2.0$ における数値解と厳密解.

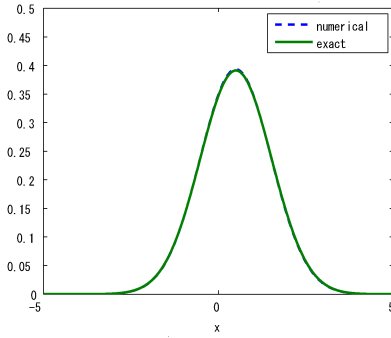


図 11: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 0.5$ における数値解と厳密解.

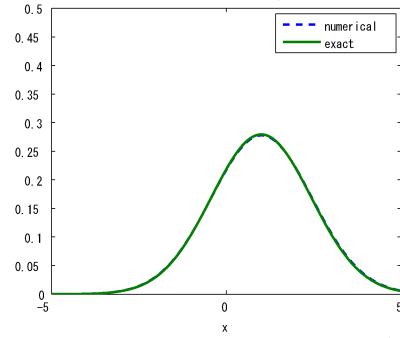


図 12: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 1.0$ における数値解と厳密解.

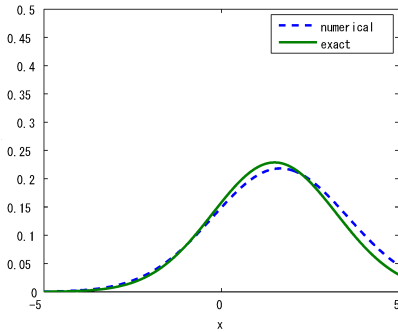


図 13: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 1.5$ における数値解と厳密解.

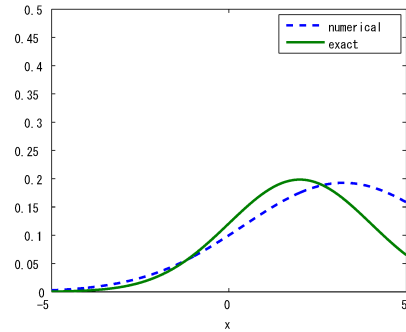


図 14: 例 1 に方法 (b) を $\Delta t = 0.01, \Delta x = 0.01$ として適用した場合の $t = 2.0$ における数値解と厳密解.

5 おわりに

本稿では、Fokker-Planck 方程式 (1) を初期条件 (2) のもとで解くための陽的な差分数値解法として、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 (7) 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 (9) 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 (8) 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。

謝辞

本研究は、学術研究助成基金助成金 若手研究 (B) (課題番号：24760064) の助成を受けた。

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: Error estimate and convergence analysis of moment-preserving discrete approximations of continuous distributions, submitted, arXiv:1308.3753, August 2013.

A 提案手法の収束解析

本節では、提案手法の収束解析を、厳密性を犠牲にした議論により行う。完全に厳密な議論は今後の課題である。関数 $g: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ に対して線形汎関数 $D_{i,M}$ を

$$D_{i,M} g := \int_{\mathbf{R}} g(x) f(i \Delta t, x) dx - \sum_{j=1}^M \Delta x g(j \Delta x) f_{ij} \quad (13)$$

と定め、評価対象の誤差としてその作用素ノルム

$$E_{i,M} := \|D_{i,M}\| = \sup_{\|g\| \leq 1} |D_{i,M}(g)| \quad (14)$$

を採用する。ここで関数のノルム $\|\cdot\|$ は $\mathbf{R}$ 上の sup ノルムとし、式 (14) の sup は滑らかな有界関数 g 全体に渡ってとるものとする³。 $E_{i,M}$ の評価を i に関して逐次的に行うため、 $E_{i+1,M} - E_{i,M}$ の評価を考える。三角不等式より

$$\begin{aligned} E_{i+1,M} - E_{i,M} &= \|D_{i+1,M}\| - \|D_{i,M}\| \\ &\leq \|D_{i+1,M} - D_{i,M}\| = \sup_{\|g\| \leq 1} |D_{i+1,M} g - D_{i,M} g| \end{aligned} \quad (15)$$

となるため、 $D_{i+1,M} g - D_{i,M} g$ の評価を考える。以下 $x_j = j \Delta x$ とおく。

$$\begin{aligned} &D_{i+1,M} g - D_{i,M} g \\ &= \int_{\mathbf{R}} g(x) \{f((i+1) \Delta t, x) - f(i \Delta t, x)\} dx - \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) \{f_{i+1,j} - f_{ij}\} \end{aligned}$$

³本来は g の関数空間をきちんと定義すべきである。

$$\begin{aligned}
&= \Delta t \int_{\mathbf{R}} g(x) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} (a(x) f(i \Delta t, x)) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (b(x) f(i \Delta t, x)) \right\} dx \\
&\quad + \frac{(\Delta t)^2}{2} \int_{\mathbf{R}} g(x) \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} (t_{i,x}^*, x) dx - \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) \{f_{i+1,j} - f_{ij}\} \\
&= \Delta t \left[\int_{\mathbf{R}} \{-g'(x) a(x) + g''(x) b(x)\} f(i \Delta t, x) dx \right. \\
&\quad \left. - \sum_{j=1}^M \Delta x \{-g'(x_j) a(x_j) + g''(x_j) b(x_j)\} f_{ij} \right] + \frac{(\Delta t)^2}{2} \int_{\mathbf{R}} g(x) \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} (t_{i,x}^*, x) dx \\
&\quad + \Delta t \sum_{j=1}^M \Delta x \{-g'(x_j) a(x_j) + g''(x_j) b(x_j)\} f_{ij} - \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) \{f_{i+1,j} - f_{ij}\} \\
&= \Delta t D_{i,M} \{-g'(\cdot) a(\cdot) + g''(\cdot) b(\cdot)\} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \int_{\mathbf{R}} g(x) \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} (t_{i,x}^*, x) dx \\
&\quad + \Delta t \sum_{j=1}^M \Delta x \{-g'(x_j) a(x_j) + g''(x_j) b(x_j)\} f_{ij} - \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) \{f_{i+1,j} - f_{ij}\} \quad (16)
\end{aligned}$$

となる。この式 (16) の最後の二項は、 $g = T_\ell$ ($\ell = 1, \dots, L$) の場合には、式 (7) および

$$\bar{T}_{\ell,i+1} = \sum_{j=1}^M \Delta x T_\ell(x_j) f_{i+1,j}, \quad \bar{T}_{\ell,i} = \sum_{j=1}^M \Delta x T_\ell(x_j) f_{i,j}, \quad (17)$$

より、0 になることが分かる。そこで予備考察として、まずこの場合を次の小節で考える。

A.1 $g = T_\ell$ ($\ell = 1, \dots, L$) の場合

式 (16) より

$$D_{i+1,M} T_\ell - D_{i,M} T_\ell = D_{i,M} \{-T'_\ell(\cdot) a(\cdot) + T''_\ell(\cdot) b(\cdot)\} + O((\Delta t)^2) \quad (18)$$

となる。ここで仮定として、ある定数 $C > 0$ に対し

$$|D_{i,M} \{-T'_\ell(\cdot) a(\cdot) + T''_\ell(\cdot) b(\cdot)\}| \leq C |D_{i,M} T_\ell| \quad (19)$$

が成り立つとする⁴。すると (18) より

$$\begin{aligned}
|D_{i+1,M} T_\ell| - |D_{i,M} T_\ell| &\leq |D_{i+1,M} T_\ell - D_{i,M} T_\ell| \leq C |D_{i,M} T_\ell| + O((\Delta t)^2) \\
\implies |D_{i+1,M} T_\ell| &\leq (1 + \Delta t C) |D_{i,M} T_\ell| + O((\Delta t)^2) \quad (20)
\end{aligned}$$

となるので、 t を定数として、

$$|D_{i,M} T_\ell| \leq (1 + \Delta t C)^i (|D_{0,M} T_\ell| + C^{-1} O(\Delta t)) + C^{-1} O(\Delta t)$$

⁴直観的には、 $-T'_\ell(\cdot) a(\cdot) + T''_\ell(\cdot) b(\cdot)$ と T_ℓ に対する「数値積分」の誤差のオーダーが同程度、という条件である。これは、両者の有界性や滑らかさの性質が同じなら成り立つと考えられる。

$$\rightarrow e^{tC} |D_{0,M} T_\ell| \quad (i \Delta t = t, i \rightarrow \infty, \Delta t \rightarrow 0) \quad (21)$$

が成り立つ。 $|D_{0,M} T_\ell|$ は、初期条件の分布 f_0 のもとでの T_ℓ に対する数値積分（中点則）の誤差であるので、適当な意味での $M \rightarrow \infty, \Delta x \rightarrow 0$ の極限で 0 になると考えてよい。以上のように、 $|D_{i,M} T_\ell|$ の収束性は示されると考えられる。また、以上と同様にして、 g が $T_1, \dots, T_L$ の線形結合で書ける場合も同様にして $|D_{i,M} g|$ の収束が示されると考えられる。

A.2 一般の場合

式 (16) の最後の二項の一般の場合の評価は、厳密ではないが、ある仮定のもとで、以下の B 節での準備を基に C 節の (40) で与えられると考えられる。よって式 (20) と同様に

$$\begin{aligned} E_{i+1,M} - E_{i,M} &\leq \Delta t C E_{i,M} + C' (\Delta t)^2 + C''' (\Delta t)^2 \\ \Rightarrow E_{i+1,M} &\leq (1 + \Delta t C) E_{i,M} + (C' + C''') (\Delta t)^2 \end{aligned} \quad (22)$$

が得られるので、 $E_{i,M}$ についても式 (21) と同様の評価が得られ、これより $E_{i,M}$ の収束性も示されると考えられる。

B 最適化問題 (8) の解の評価

式 (16) の最後の二項を評価するための準備として、最適化問題 (8) の解 $\bar{\lambda}_{i+1}$ を評価する。 $\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} = 1$ であることに注意すると、(8) は

$$\min. \quad \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} (e^{\langle \lambda, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} - 1) \quad (23)$$

と同等である。目的関数の指数関数の部分に対して、正の実数 a に対して不等式

$$e^z - 1 \geq z + \frac{1}{2} (\max\{0, \min\{z, a\}\})^2 \quad (24)$$

が成り立つことを用いると、任意の $\lambda \in \mathbf{R}^L$ に対して

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} (e^{\langle \lambda, T(j \Delta x) - \bar{T}_{i+1} \rangle} - 1) &\geq \left\langle \lambda, \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} \{T(x_j) - \bar{T}_{i+1}\} \right\rangle + C_{M,a,i}(\lambda^*) \|\lambda\|^2 \\ &= \langle \lambda, \bar{T}_i - \bar{T}_{i+1} \rangle + C_{M,a,i}(\lambda^*) \|\lambda\|^2 \\ &\geq \langle \lambda, \bar{T}_i - \bar{T}_{i+1} \rangle + C_{a,i} \|\lambda\|^2 \end{aligned} \quad (25)$$

となる。ここで $\lambda^* = \lambda / \|\lambda\|^2$ かつ

$$C_{M,a,i}(\lambda^*) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} (\max\{0, \min\{\langle \lambda^*, T(j \Delta x) - \bar{T}_{i+1} \rangle, a\}\})^2 \geq C_{a,i} > 0 \quad (26)$$

である．式 (25) を用いて最適解 $\bar{\lambda}_{i+1}$ の範囲は

$$\begin{aligned}\bar{\lambda}_{i+1} &\in \{\lambda \mid \langle \lambda, \bar{T}_i - \bar{T}_{i+1} \rangle + C_{a,i} \|\lambda\|^2 \leq 0\} \\ &\subset \{\lambda \mid -\|\lambda\| \|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\| + C_{a,i} \|\lambda\|^2 \leq 0\} \\ &\implies \|\bar{\lambda}_{i+1}\| \leq C_{a,i}^{-1} \|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\|\end{aligned}\quad (27)$$

のように絞ることができるので， Δt が小さければ $\|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\|$ も小さく，よって $\bar{\lambda}_{i+1}$ も小さいと考えられる．

C 式 (16) の最後の二項の評価

まず式 (16) の最後の項を，Step 2 の (9) を用いて評価する．

$$\begin{aligned}f_{i+1,j} - f_{ij} &= \frac{f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}} - f_{ij} \\ &= \left(\frac{1}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}} - 1 \right) f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} + \left(f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} - f_{ij} \right)\end{aligned}$$

より，

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) \{f_{i+1,j} - f_{ij}\} \\ &= \left(\frac{1}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}} - 1 \right) \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} \\ &\quad + \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} (e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} - 1)\end{aligned}\quad (28)$$

となる．まずこの (28) の第一項は，

$$\begin{aligned}&\left| \frac{1}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}} - 1 \right| \left| \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} \right| \\ &\leq \left| \frac{1}{\sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}} - 1 \right| \left\{ \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} \right\} \\ &= \left| 1 - \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} \right| = \left| \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} (1 - e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}) \right|\end{aligned}\quad (29)$$

となる．ここである $0 < \theta < 1$ に対し

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

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle + \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} \frac{e^{\theta \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}}{2} \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle^2 \\
&= \langle \bar{\lambda}_{i+1}, \bar{T}_i - \bar{T}_{i+1} \rangle + \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} \frac{e^{\theta \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}}{2} \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle^2
\end{aligned} \quad (30)$$

となることと (27) の評価を用いると,

$$\begin{aligned}
&\left| \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} (1 - e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}) \right| \\
&\leq C_{a,i}^{-1} \|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\|^2 \left(1 + C_{a,i}^{-1} \sum_{j=1}^M \Delta x f_{ij} \frac{e^{\theta \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle}}{2} \|T(x_j) - \bar{T}_{i+1}\|^2 \right)
\end{aligned} \quad (31)$$

となる.

次に (28) の第二項の評価のために, 前節の評価を踏まえて, 解 $\bar{\lambda}_{i+1}$ の近似 $\tilde{\lambda}_{i+1}$ として (25) 右辺の最小解

$$\tilde{\lambda}_{i+1} = (2C_{a,i})^{-1} (\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i) \quad (32)$$

を採用する. これを (28) の第二項に用いると,

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} (e^{\langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} - 1) \\
&= \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle + \epsilon_{M,i,\theta}^{(2)} \\
&\approx \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} \langle \bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i, (2C_{a,i})^{-1} (T(x_j) - \bar{T}_{i+1}) \rangle + \epsilon_{M,i,\theta}^{(2)} \\
&= \left\langle \bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i, \sum_{j=1}^M g(x_j) \{ (2C_{a,i})^{-1} \Delta x f_{ij} (T(x_j) - \bar{T}_{i+1}) \} \right\rangle + \epsilon_{M,i,\theta}^{(2)}
\end{aligned} \quad (33)$$

となる. ただし $0 < \theta < 1$ として,

$$\epsilon_{M,i,\theta}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) f_{ij} e^{\theta \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle} \langle \bar{\lambda}_{i+1}, T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle^2 \quad (34)$$

である. ここで (33) の $\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i$ の部分に (7) を用いると,

$$(\text{式 (33) 最右辺}) = \Delta t \sum_{k=1}^M \Delta x \{ -g_1(x_k) a(x_k) + g_2(x_k) b(x_k) \} f_{ik} + \epsilon_{M,i,\theta}^{(2)} \quad (35)$$

となる. ここで

$$g_1(x_k) = \sum_{j=1}^M g(x_j) \{ (2C_{a,i})^{-1} \Delta x f_{ij} \langle T'(x_k), T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle \} \quad (36)$$

$$g_2(x_k) = \sum_{j=1}^M g(x_j) \{ (2C_{a,i})^{-1} \Delta x f_{ij} \langle T''(x_k), T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle \} \quad (37)$$

である．ここで仮定として， $T(x) = (T_1(x), \dots, T_L(x))^T$ が適切に選ばれていて，

$$g(x) \approx \sum_{j=1}^M g(x_j) \{ (2C_{a,i})^{-1} \Delta x f_{ij} \langle T(x), T(x_j) - \bar{T}_{i+1} \rangle \} \quad (38)$$

が良い関数近似になっているとする⁵．すると，

$$(\text{式 (33) 最右辺}) \approx \Delta t \sum_{k=1}^M \Delta x \{ -g'(x_k) a(x_k) + g''(x_k) b(x_k) \} f_{ik} + \epsilon_{M,i,\theta}^{(2)} \quad (39)$$

となる．また， $\epsilon_{M,i,\theta}^{(2)}$ は，式 (30) の第二項の評価 (31) と同様にして， $O(\|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\|^2)$ であることが分かる．

以上，(28)，(31)，(39) から，式 (16) の最後の二項は，

$$\begin{aligned} & \left| \Delta t \sum_{j=1}^M \Delta x \{ -g'(x_j) a(x_j) + g''(x_j) b(x_j) \} f_{ij} - \sum_{j=1}^M \Delta x g(x_j) \{ f_{i+1,j} - f_{ij} \} \right| \\ & \lesssim C''' \|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\|^2 \leq C''' (\Delta t)^2 \end{aligned} \quad (40)$$

と評価できる．ここで $C''', C''' > 0$ はある定数である．また， $\|\bar{T}_{i+1} - \bar{T}_i\| = O(\Delta t)$ は (7) より従う．

⁵ここも厳密でない部分であるが，右辺が $T_1(x), \dots, T_L(x)$ の線形結合になっていることに注意．