ガウス過程回帰とモンテカルロ法を用いた偏微分方程式の数値計算

井上 大輔 [1], 伊藤 優司 [1], 柏原 崇人 [2], 齊藤 宣一 [2], 吉田 広顕 [1]
[1] 株式会社豊田中央研究所，[2] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail : daisuke-inoue@mosk.tytlabs.co.jp

1 概要

Kolmogorov 偏微分方程式（Partial Differential Equation; PDE）は，さまざまな分野の現象を理解するために用いられる．既存の数値計算法には，得られた解の精度評価が必ずしも容易でない・計算コストがメッシュサイズに応じて急激に増加するなどの課題が残る．これらを克服するため，本講演では，Feynman–Kac（FK）公式を用いたモンテカルロ計算で近似された離散解を，ガウス過程回帰（Gaussian Process Regression; GPR）によって連続関数として構成する，新数値計算法を提案する．提案手法では，回帰結果の不確実性を計算できる GPR が解の精度評価を可能にし，メッシュを用いないモンテカルロ計算が計算コストを軽減する．我々は，数値解の不確実性の下界を解析し，求める解の精度に対して必要なモンテカルロ計算のサンプルサイズを予測することを可能にする．

2 問題設定

本研究で扱う Kolmogorov 方程式を下記で定義する：

$$
\begin{aligned}
&\partial_t v(t,x) + \frac{1}{2}\operatorname{tr}\left\{a(t,x)a(t,x)^\top \partial_{xx} v(t,x)\right\} + b(t,x)^\top \partial_x v(t,x) \\
&\qquad + c(t,x)v(t,x) + h(t,x) = 0, \qquad (t,x) \in [0,T) \times \mathbb{R}^d, \\
&v(T,x) = g(x), \qquad x \in \mathbb{R}^d,
\end{aligned}
$$

ここで，終端時刻 $T > 0$ に対して，$t \in [0,T]$ は時間を表し，$v : [0,T] \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ は方程式の変数を表す．関数 a, b, c, h は方程式の変数係数，g は終端条件を表す関数である．これらの関数はそれぞれ十分滑らかであると仮定する．本研究では，これらの既知の関数のもと，初期時間 $t = 0$ における解 $v(0,x)$ $(x \in \mathcal{X})$ を求めることを目標とする．ただし，$\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$ は解を求める領域を表す．

3 提案手法

まず，PDE の解の事前分布をガウス過程としてモデル化する；任意の観測点 $X = [x_1, \ldots, x_N]^\top \in \mathcal{X}^N$ に対して，$v_X \coloneqq [v(0,x_1), \ldots, v(0,x_N)]^\top$ の確率分布 $p(v_X|X)$ は，正定値カーネル k を用いて，平均 0，共分散 $k_{XX} \in \mathbb{R}^{N\times N}$ $([k_{XX}]_{ij} = k(x_i, x_j))$ の正規分布であるとする．つぎに，X 上の解の近似値を表すデータ U が，$U = [u_1(x_1), \ldots, u_M(x_1), \ldots, u_1(x_N), \ldots, u_M(x_N)]^\top$ として得られており，それぞれのデータは，次の関係を満たすとする：

$$
u_j(x_i) = v(0,x_i) + \xi_{i,j}, \quad i \in \{1,\ldots,N\},\ j \in \{1,\ldots,M\}, \tag{1}
$$

ただし，$\xi_{i,j}$ はそれぞれ独立な平均 0，分散 $r(x_i)$ の正規分布に従う雑音項である（関数 $r : \mathcal{X} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ は雑音の分散を表す）．雑音の影響を抑制するため，同一観測点 x_i における $u(x_i)$ の平均 $\overline{u}(x_i) \coloneqq \sum_{j=1}^{M} u_j(x_i)/M$ を用いたデータ $\overline{U} = [\overline{u}(x_1), \ldots, \overline{u}(x_N)]^\top$ に対して事後分布を計算すると，これも

また正規分布であることが示され，その平均 $\widetilde{u}$ と分散 $\widetilde{\sigma}$ は下記で与えられる [1]：

$$\widetilde{u}(x) = k_{xX}\left(k_{XX} + \frac{r_{XX}}{M}\right)^{-1}\overline{U}, \quad x \in \mathcal{X},$$
$$\widetilde{\sigma}^2(x) = k(x,x) - k_{xX}\left(k_{XX} + \frac{r_{XX}}{M}\right)^{-1}k_{Xx}, \quad x, x \in \mathcal{X}.$$

ただし，$k_{Xx} = k_{xX}^\top = [k(x_1, x), \ldots, k(x_N, x)]^\top$ と定義した．

つぎに，データ U と共分散行列 r_{XX} をモンテカルロ計算によって生成する．まず，データ U の近似値として，$\widehat{U} = [\widehat{u}_1(x_1), \ldots, \widehat{u}_M(x_1), \ldots, \widehat{u}_1(x_1), \ldots, \widehat{u}_M(x_N)]^\top$ を下記で定義する：

$$\widehat{u}_j(x_i) \coloneqq \int_0^T h(s, X(s; x_i))e^{-\int_t^s c(r, X(r;x_i))\mathrm{d}r}\mathrm{d}s + g(X(T; x_i))e^{-\int_t^T c(r, X(r;x_i))\mathrm{d}r},$$

ただし，$X(s; x)$ $(s \in [0,T])$ は $X(0) = x$ を出発し，Wiener 過程 $W_j(s)$ $(s \in [0,T],\ j \in \{1, \ldots, M\})$ によって駆動される次の確率微分方程式の強解を表す：

$$\mathrm{d}X(s) = b(s, X(s))\mathrm{d}s + a(s, X(s))\mathrm{d}W_j(s), \quad s \in [0,T].$$

また，共分散 r_{XX} の近似値として，$\{\widehat{u}_j(x_i)\}_{j\in\{1,\ldots,M\}}$ の不偏分散を N 個対角に並べた行列 $\widehat{r}_{XX}$ を用いる．FK 公式から，$\widehat{U}$ は U の不偏推定量であり [2]，さらに中心極限定理から，$\widehat{U}$ に対して同一観測点のデータを平均化したデータ $\check{U} = [\check{u}(x_1), \ldots, \check{u}(x_N)]^\top$ $(\check{u}(x_i) = \sum_{j=1}^M \widehat{u}_j(x_i)/M)$ は，分散が $\widehat{r}_{XX}$ である正規分布に近似的に従う．このことが $\check{U}$ をデータ $\overline{U}$ として用いることを正当化する．

4　理論結果

我々は，事後分散の下界をサンプルサイズによって特徴づける以下の定理を示した：

定理 1（[3]）　観測点 $X = [x_1, \ldots, x_N]^\top$ が既知の確率測度 ν からサンプルされるとする．データ U が (1) を満たし，また雑音の分散項 r に対して最小値 $r_{\min} = \min_{x\in\mathcal{X}} r(x) > 0$ が存在するとする．この時，任意の $\epsilon > 0$ に対してある $\tilde{N}(\epsilon) > 0$ が存在し，任意の $N > \tilde{N}$ に対して，

$$\Pr\left(\int_{\mathcal{X}} \widetilde{\sigma}^2(x)\mathrm{d}\nu(x) > (1-\epsilon)r_{\min}\sum_{p\in I}\frac{\lambda_p}{r_{\min} + NM\lambda_p}\right) = 1,$$

ここで，$\{\lambda_p\}_{p\in I}$ はカーネル k の測度 ν についての固有値であり，$I \subseteq \mathbb{N}$ はその番号集合を表す．

証明　紙幅の都合で割愛するが，GPR の漸近解析を分散が観測点依存の場合に拡張して得られる．

謝辞　本手法の理論解析にあたり，東京大学大学院数理科学研究科の小池祐太先生に有意義な助言をいただいた．記して謝意を表する．

参考文献

[1] P. Goldberg, C. Williams and C. Bishop: Regression with Input-dependent Noise: A Gaussian Process Treatment, in Advances in Neural Information Processing Systems, **10**, MIT Press (1997)

[2] J. Yong and X. Y. Zhou: Stochastic Controls, Springer (1999)

[3] D. Inoue, Y. Ito, T. Kashiwabara, N. Saito and H. Yoshida: An Uncertainty-aware, Mesh-free Numerical Method for Kolmogorov PDEs, arXiv:2405.05626 (2024)

非有界領域問題に対する高速数値解法

繁田 岳美 [1]
[1] 昭和薬科大学 応用数学研究室
e-mail : shigeta@ac.shoyaku.ac.jp

1 概要

2 次元非有界領域における Poisson 方程式の Dirichlet 問題を考える．等角写像により非有界領域の境界を円に写像し，人工円形境界を導入することで，非有界領域を外部部分領域と内部部分領域に分割する．Dirichlet–Neumann 交代法（D-N 法）より，最適な緩和係数を用いて，2 つの部分領域における境界値問題を交互に少ない反復回数で解く．外部部分領域問題を基本解近似解法 (MFS) と高速 Fourier 変換 (FFT) を適用することで効率的に解く．数値実験を通して，本提案手法の有用性を示す．

2 D-N 法と可変最適緩和係数

2 次元平面 $\boldsymbol{R}^2$ を複素平面 $\boldsymbol{C}$ と同一視する．複素平面 $\boldsymbol{C}$ において，Ω を単連結非有界領域とし，その境界を Γ とする．このとき，次の Poisson 方程式の外部 Dirichlet 問題を考える: 以下を満たす $u \in H^1(\Omega)$ を求めよ:

$$-\Delta u = f \quad \text{in} \quad \Omega; \qquad u = g \quad \text{on} \quad \Gamma; \qquad u(z) = O(|z|^{-1}) \quad \text{as} \quad |z| \to \infty.$$

ここに，$f \in L^2(\Omega)$ と $g \in H^{1/2}(\Gamma)$ は既知の関数で，f の台 $\operatorname{supp} f := \overline{\{z \in \boldsymbol{C} : f(z) \neq 0\}}$ は有界であると仮定する．

等角写像 $w = \mathcal{F}(z)$ $(z = x + iy,\, w = \xi + i\eta)$ により，Ω を $\widetilde{\Omega} := \{w \in \boldsymbol{C} : |w| > R\}$ $(R > 0)$ に写像すると，上式は次のように同値変形される [1]:

$$-\Delta_w U = |\mathcal{F}'(z)|^{-2} \widetilde{f} \quad \text{in} \quad \widetilde{\Omega}; \qquad U = \widetilde{g} \quad \text{on} \quad \widetilde{\Gamma} := \partial\widetilde{\Omega}; \qquad U(w) = O(|w|^{-1}) \quad \text{as} \quad |w| \to \infty.$$

ここに，$\Delta_w := \partial^2/\partial\xi^2 + \partial^2/\partial\eta^2$, $U(w) := u(z)$, $\widetilde{f}(w) = f(z)$, $\widetilde{g}(w) = g(z)$ である．

関数 $\widetilde{f}$ の台を囲むような人工円形境界 $\widetilde{\Gamma}_0 := \{w \in \boldsymbol{C} : |w| = R_0\}$ $(R_0 > R)$ を導入することで，領域 $\widetilde{\Omega}$ を内部部分領域 $\widetilde{\Omega}_1$ と外部部分領域 $\widetilde{\Omega}_2$ に分割する．$l = 1, 2$ に対して，U の $\widetilde{\Omega}_l$ への制限を $U_l := U|_{\widetilde{\Omega}_l}$ とおき，部分領域 $\widetilde{\Omega}_l$ の境界 $\widetilde{\Gamma}_0$ における外向き単位法線を n_l とおくと，次の D-N 法 [2] を得る:

Step 0. 初期推定値として境界値 $\lambda^{(0)} \in H^{1/2}(\widetilde{\Gamma}_0)$ を与え，$k := 0$ とおく．

Step 1. 部分領域 $\widetilde{\Omega}_2$ における外部 Dirichlet 問題を解く:

$$\Delta_w U_2^{(k)} = 0 \quad \text{in} \quad \widetilde{\Omega}_2; \qquad U_2^{(k)} = \lambda^{(k)} \quad \text{on} \quad \widetilde{\Gamma}_0; \qquad U_2^{(k)}(w) = O(|w|^{-1}) \quad \text{as} \quad |w| \to \infty.$$

Step 2. 部分領域 $\widetilde{\Omega}_1$ における内部混合境界値問題を解く:

$$-\Delta_w U_1^{(k)} = \widetilde{f} \quad \text{in} \quad \widetilde{\Omega}_1; \qquad \frac{\partial U_1^{(k)}}{\partial n_1} = -\frac{\partial U_2^{(k)}}{\partial n_2} \quad \text{on} \quad \widetilde{\Gamma}_0; \qquad U_1^{(k)} = \widetilde{g} \quad \text{on} \quad \widetilde{\Gamma}.$$

Step 3. 与えられた緩和係数 $\alpha^{(k)}$ を用いて，人工境界 $\widetilde{\Gamma}_0$ 上における境界値を更新する:

$$\lambda^{(k+1)} := \alpha^{(k)} U_1^{(k)}|_{\Gamma_0} + (1 - \alpha^{(k)}) \lambda^{(k)} \quad \text{on} \quad \widetilde{\Gamma}_0.$$

Step 4.　$k := k+1$ とおき，Step 1 へ戻る．

定理 1（可変最適緩和係数 [3]）　数列 $\{p_j\}_{j=0}^{\infty}$ を $p_j := (R_0^{2j} - R^{2j})/(R_0^{2j} + R^{2j})$ $(j = 0, 1, 2, \ldots.)$ で定める．このとき，可変最適緩和係数は $\alpha^{(k)} = 1/(p_{k+1}+1)$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ で与えられ，反復境界値 $\lambda^{(k)}$ は真の $U|_{\widetilde{\Gamma}_0}$ へ L^2 ノルムの意味で収束する: $\lim_{k\to\infty} \|U - \lambda^{(k)}\|_{L^2(\widetilde{\Gamma}_0)} = 0$.

3　MFS と FFT による数値解法

本節では，D-N 法の Step 1 における数値解法を述べる．簡単のため $U_2^{(k)}$ と $\lambda^{(k)}$ を u と λ のように添え字を省略して表記する．MFS [4] に基づくと，解 U は次式で近似される:

$$U(w) \approx U_N(w) := \sum_{j=1}^{N} \alpha_j G_j(w), \qquad \forall w \in \overline{\widetilde{\Omega}_2}. \tag{1}$$

ここに，N 個の源点 $\{\zeta_j\}_{j=1}^N$ は $\zeta_j := \rho_0 e^{2\pi i (j-1)/N}$ $(0 < \rho_0 < R_0)$ で与えられ，基底関数 $\{G_j\}_{j=1}^N$ は $G_j(w) = O(|w|^{-1})$ $(|w| \to \infty)$ を満たすように，$G_j(w) := \log|w - \zeta_j| - \log|w|$ により定義される [5]．このとき, 近似関数 (1) は Laplace 方程式と無限遠点での条件 $U(w) = O(|w|^{-1})$ $(|w| \to \infty)$ を満たすので，選点法により境界条件 $U_N|_{\widetilde{\Gamma}_0} = \lambda$ を近似的に満たすように $\{\alpha_j\}_{j=1}^N$ を求めればよい:

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j G_j(w_k) = \lambda(w_k), \qquad k = 1, 2, \ldots, N. \tag{2}$$

ここに，選点 $\{w_k\}_{k=1}^N$ は $w_k := R_0 e^{2\pi i (k-1)/N}$ で与えられる．連立 1 次方程式 (2) の係数行列は巡回行列であるので，FFT を用いて効率的に $\{\alpha_j\}_{j=1}^N$ を求めることができる [6].

Step 2 における境界値問題には，任意の適切な数値解法を適用すればよい．数値計算例は発表時に示す.

参考文献

[1] Liu, X.-Y. et al.: Conformal mapping for the efficient solution of Poisson problems with the Kansa-RBF method, Journal of Scientific Computing, **71** (2017), pp. 1035–1061.

[2] Yu, D.: Discretization of non-overlapping domain decomposition method for unbounded domains and its convergence, Chinese Journal of Numerical Mathematics and Applications, **18**, 4 (1996), pp. 93–102.

[3] Shigeta, T.: Mathematically improved convergence analysis for the non-overlapping domain decomposition method, Engineering Analysis with Boundary Elements, **166** (2024), 105805.

[4] Mathon, R. and Johnston, R. L.: The approximate solution of elliptic boundary-value problems by fundamental solutions, SIAM Journal on Numerical Analysis, **14**, 4 (1977), pp. 638–650.

[5] Katsurada, M.: A mathematical study of the charge simulation method II, Journal of the Faculty of Science, the University of Tokyo, Section 1A Mathematics, **36** (1989), pp. 135–162.

[6] Davis, P. J.: Circulant Matrices, Second edition, AMS Chelsea Publishing (2012)

局所的な結合項を持つ平均場ゲーム方程式に対する一般化された条件付き勾配法について

中村 遥河 [1], 齊藤 宣一 [2]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科 M2, [2] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail : nakamura-haruka@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

ある領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 上の，相互依存によって行動するエージェントの動態を記述する系として知られるマルチエージェントシステムは，そのエージェントの総数が大きい場合に計算量が非常に多くなり，数値計算が困難になる．そこで，この相互作用を「あるエージェントから見た周りの密度」により近似し，その密度分布を制御するという手法が考えられた．平均場ゲーム方程式（MFG）はその代表例であり，これは密度分布を記述する Fokker–Planck (FP) 方程式と，制御入力を記述する Hamilton–Jacobi–Bellman (HJB) 方程式からなる．

2 問題設定と課題

本稿で扱う MFG は次のようなものである：$T > 0, \nu > 0$ を定数, $\Omega = [0, 1]^d, Q = (0, T) \times \Omega$ とする．u, m を未知関数として,

$$\begin{cases} \text{(HJB)} \quad \begin{cases} -\partial_t u - \nu\Delta u + H(\cdot,\cdot,\nabla u) = \gamma & \text{in } Q, \\ u(T,\cdot) = g & \text{in } \Omega, \end{cases} \\ \qquad\qquad \boldsymbol{v}(t,x) = -\nabla_p H(t,x,\nabla u) \qquad\qquad (t,x) \in Q, \\ \text{(FP)} \quad \begin{cases} \partial_t m - \nu\Delta m + \operatorname{div}(m\boldsymbol{v}) = 0 & \text{in } Q, \\ m(0,\cdot) = m_0 & \text{in } \Omega, \end{cases} \\ \qquad\qquad \gamma(t,x) = f(t,x,m(t,x)) \qquad\qquad (t,x) \in Q. \end{cases} \tag{MFG}$$

m は密度分布，$\boldsymbol{v}$ は密度分布の制御入力である．終端，初期条件 $g, m_0 : \Omega \to \mathbb{R}$ と Hamiltonian $H : Q \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，及び $f : Q \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は既知とする．境界条件としては，周期境界条件か斉次 Neumann 境界条件を課す．また，本稿では，この γ ないし f を結合項と呼ぶことにする．

MFG に対する，一般化された条件付き勾配法 (GCG 法) の収束解析が Lavigne らによりなされている [1]．当該論文では結合項を $f : Q \times \mathcal{D}_1(\Omega) \to \mathbb{R}$ と考え，ある $C_1 > 0$ が存在して

$$|f(t,x,m_2) - f(t,x,m_1)| \le C_1 \|m_2 - m_1\|_{L^2(\Omega)} \qquad ((t,x) \in Q, m_1, m_2 \in \mathcal{D}_1(\Omega))$$

となることが仮定されている．ここで，$\mathcal{D}_1(\Omega)$ は Ω 上の確率密度関数の全体である．しかし，数値計算においては $f(t,x,m) = m(t,x)$ のような，m に局所的に依存する場合が扱われることが多く，そのような場合に適用することができない．そこで，本研究では，f を $f : Q \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ と考え，

$$|f(t,x,m_2(x)) - f(t,x,m_1(x))| \le C_1 \|m_2 - m_1\|_{L^\infty(\Omega)}$$

を仮定して，その収束性について得られた結果を報告する．

なお，[1] では相互作用を考慮した，より一般的な MFG を扱っており，本研究もその場合に直ちに拡張できるが，煩雑になるのを避けるために今回は簡単な場合を扱う．

3　MFG の最適化問題としての解釈と一般化された条件付き勾配法

Hamiltonian H は，ある $L : Q \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を用いて，その Legendre 変換により与えられる：

$$H(t,x,\boldsymbol{p}) := L^*(t,x,-\boldsymbol{p}) = \sup_{\boldsymbol{q}\in\mathbb{R}^d} [(-\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})_{\mathbb{R}^d} - L(t,x,\boldsymbol{q})] \qquad ((t,x)\in Q, \boldsymbol{p}\in\mathbb{R}^d).$$

また，$F : [0,T] \times \mathcal{D}_1(\Omega) \to \mathbb{R}$ が存在して，$t \in [0,T]$ と $m_1, m_2 \in \mathcal{D}_1(\Omega)$ に対して

$$F(t,m_2) - F(t,m_1) = \int_0^1 \int_\Omega f\left(t,x,sm_2(x)+(1-s)m_1(x)\right)[m_2(x)-m_1(x)]\,dx\,ds$$

を満たすと仮定する．このとき，(MFG) の解 $(\overline{m},\overline{\boldsymbol{v}})$ は，$\boldsymbol{w} = m\boldsymbol{v}$ の変数変換を通じて

$$\mathcal{J}(m,\boldsymbol{w}) := \int_Q m(t,x) L\left(t,x,\frac{\boldsymbol{w}(t,x)}{m(t,x)}\right) dx\,dt + \int_\Omega g(x)m(T,x)\,dx + \int_0^T F(t,m)\,dt$$

に対する最適化問題の解となる [2]：

$$(\overline{m},\overline{\boldsymbol{w}}) = \operatorname*{argmin}_{(m,\boldsymbol{w})\in\mathcal{R}} \mathcal{J}(m,\boldsymbol{w}). \tag{$\mathcal{P}$}$$

ただし $\mathcal{R}$ は，大雑把にいうと $\partial_t m - \nu\Delta m + \operatorname{div}\boldsymbol{w} = 0, m(0,\cdot) = m_0$ を満たし，$\boldsymbol{w} = m\boldsymbol{v}$ なる $\boldsymbol{v} \in L^\infty(Q;\mathbb{R}^d)$ が存在するような組 $(m,\boldsymbol{w})$ からなる．

このようにして MFG を最適化問題として解釈したことで GCG 法が適用できる．GCG 法ではコスト汎関数の部分線形化を考える必要がある．$\mathcal{J}$ の部分線形化を，結合項 γ が与えられる毎に

$$\mathcal{Z}[\gamma](m,\boldsymbol{w}) := \int_Q m(t,x) L\left(t,x,\frac{\boldsymbol{w}(t,x)}{m(t,x)}\right) dx\,dt + \int_\Omega g(x)m(T,x)\,dx + \int_Q \gamma(t,x)m(t,x)\,dx\,dt$$

とかく（3 項目は $\int_0^T F(t,m)\,dt$ の線形化）．そして，$(\mathcal{P})$ に対する次の subproblem を考える：

$$\operatorname*{minimize}_{(m,\boldsymbol{w})\in\mathcal{R}} \mathcal{Z}[\gamma](m,\boldsymbol{w}). \tag{$\mathcal{P}[\gamma]$}$$

GCG 法のアルゴリズムを述べる．まず，最適化問題 $(\mathcal{P})$ の初期推測値 $(\overline{m}_0,\overline{\boldsymbol{w}}_0)$ を与える．一般に，k ステップ目における推測値 $(\overline{m}_k,\overline{\boldsymbol{w}}_k)$ が得られたら，結合項 $\gamma_k = f(\cdot,\cdot,\overline{m}_k)$ を用いて，$(\mathcal{P}[\gamma_k])$ の解 $(m_k,\boldsymbol{w}_k)$ を得る．そして，ステップサイズ $\delta_k \in [0,1]$ を選び，

$$(\overline{m}_{k+1},\overline{\boldsymbol{w}}_{k+1}) = (1-\delta_k)(\overline{m}_k,\overline{\boldsymbol{w}}_k) + \delta_k(m_k,\boldsymbol{w}_k)$$

で推測値を更新する．本研究では，[1] の三つのステップサイズ δ_k の選び方について主に扱い，上述の仮定の下で得られた結果を報告する．さらに，数値実験によりその妥当性を検討する．

参考文献

[1] P. Lavigne and L. Pfeiffer, Generalized Conditional Gradient and Learning in Potential Mean Field Games. Appl Math Optim 88, 89 (2023).

[2] J. F. Bonnans, S. Hadikhanloo and L. Pfeiffer, Schauder estimates for a class of potential mean field games of controls. Appl. Math. Optim., 83:1431–1464 (2021).

ある固有ベクトルの表現法を用いた 有界領域上の固有値問題の数値解析

笠井　博則 [1]
[1] 福島大学共生システム理工学類
e-mail : kasai@sss.fukushima-u.ac.jp

1　概要

仮想領域法による定常問題の研究は [1],[2] などが知られているが、いずれも有限要素近似で議論されており、差分法を直接扱っていない。差分法での仮想領域法は様々な計算では用いられているが、一般的な線形微分作用素の固有値問題の収束を扱った例を見つけていない。

本発表では、有界領域 Ω 上の線形微分作用素の固有値問題をいわゆる「仮想領域法」と差分法で近似計算するとき、「仮想領域法」で用いられるパラメータによる収束とその速さを考える。この問題の考察には、仮想領域法が領域に対する制限作用素と関連していることから射影行列を用いた議論と、行列の固有値が具体的に与えられたときにその固有値に対する固有ベクトルを与える公式（命題 3）を用いる。ここでは、記述の簡単のため差分法を対象としているが、射影行列を用いた議論と命題 3 は他の離散化での固有値問題に対しても同様に使えると考える。

2　問題の準備

$\Omega \subset \mathbf{R}^2$ を滑らかな境界をもつ有界領域、R を $\Omega \subset R$ を満たす長方形領域とする。また、$\tilde{\mathcal{L}}$ を R 上の関数に対する線形作用素（微分作用素）、$\mathcal{L}$ を Ω 上の関数に対する線形作用素（微分作用素）で、$\mathcal{L} = \tilde{\mathcal{L}}|_\Omega$ を満たすものとする。 このとき、次の命題が知られている。

命題 1　$u(x, y)$ は Ω 上の関数、$\tilde{u}(x, y)$ は R 上の関数とするとき線形作用素 $-\mathcal{L}$ の固有値問題

$$\lambda u + \mathcal{L}u = 0 \quad \text{in} \quad \Omega$$

の解は、μ が十分小さいとき線形作用素 $-\tilde{\mathcal{L}} + \frac{1}{\mu}\chi_{R\backslash\Omega}$ の固有値問題

$$\lambda\tilde{u} + \tilde{\mathcal{L}}\tilde{u} + \frac{1}{\mu}\chi_{R\backslash\Omega}\tilde{u} = 0 \quad \text{in} \quad R$$

で近似される。ただし、$\chi_{R\backslash\Omega}$ は領域 $R\backslash\Omega$ での定義関数（制限作用素）

関数の離散化に対応するベクトルを次のように定義する。長方形領域 R 上に点 (x_j, y_j) $(j = 1, 2, \cdots, N)$ をとり、これらの点上での関数 $u(x_j, y_j)$ の値を成分とする N 次ベクトルを $\mathbf{u}$ とする。このとき、$\tilde{\mathcal{L}}u(x, y)$ は行列 $\tilde{L}$ を用いて $L\mathbf{u}$ と近似されるものとする。領域 R 上の関数 $u(x, y)$ を領域 Ω 上に制限する作用素の離散化は、$u(x, y)$ の値からなるベクトル $\mathbf{u}$ に対して、行列 K を用いて

$$(K\mathbf{u})_j = \begin{cases} (\mathbf{u})_j & (x_j, y_j) \in \Omega \\ 0 & (x_j, y_j) \notin \Omega \end{cases} \qquad (j = 1, 2, \cdots, N)$$

と表される。　領域 R 上での恒等作用素に対応する行列は単位行列であり、$R\backslash\Omega$ 上への制限作用素は $M = I - K$ と表される行列に対応することになる。このときの行列 K, M は射影行列の性質 $I = K + M, K^2 = K, M^2 = M$ を満たす。

このような準備のもとで、N 次行列 $-L-\frac{1}{\mu}M$ の固有値問題

$$\lambda\mathbf{u}+L\mathbf{u}+\frac{1}{\mu}M\mathbf{u}=\mathbf{0}$$

の解は、領域 Ω 上に制限した問題に対応する

$$\lambda K\mathbf{u}+KLK\mathbf{u}+M=K\mathbf{0}+M$$

の解に近いことが期待される。

N 次行列 $-L-\frac{1}{\mu}M$ の固有ベクトル・固有ベクトルは、領域 Ω に制限された固有値問題に対応する行列の固有値・固有ベクトルとは数も異なることになるが、そのようになる原因・減った固有値はどのようなものに対応するかなどについて、当日の発表の中で紹介する。

3　補題

次の命題 2, 3 を道具として用いる。

命題 2　射影行列 K, M に関する演算 A, B を n 次正方行列、I を n 次の単位行列、K, M を射影行列（$I=K+M, K^2=K, M^2=M$）とするとき、以下の性質を満たす。$|A|$ は行列 A の行列式を表す。

・$A=MAM+KAK+MAK+KAM$
・$(KAK+M)^{-1}=K(KAK+\alpha M)^{-1}K+M$　　・$(MAM+K)^{-1}=M(MAM+\alpha K)^{-1}M+K$
・$(I+MAK)^{-1}=(I-MAK)$　　・$(I+KAM)^{-1}=(I-KAM)$
・$(MAM+K)(M+KBK)=(MAM+KBK)$
・$(MAM+KBK)^{-1}\quad=M(MAM+K)^{-1}M+K(M+KBK)^{-1}K$
・$|I+MAK|=|I+KAM|=1$
・$|I+\mu MAM|=1+O(\mu),$　　・$|I+\mu KAK|=1+O(\mu)$
・$|MAM+KBK|=|MAM+K||M+KBK|$

命題 3　A を n 次正方行列、λ を A の固有値とするとき、(ほぼ) 任意の $\mathbf{u}$ に対し、

$$\lim_{\varepsilon\to 0+}\varepsilon\left((\lambda+\varepsilon)I-A\right)^{-1}\mathbf{u}$$

は λ に対する固有ベクトルになっている。

…………………………………………………………………………………………

…………………………………………………………………………………………

参考文献

[1] Zhou, Guanyu; Saito, Norikazu, Analysis of the fictitious domain method with penalty for elliptic problems Jpn. J. Ind. Appl. Math. 31 (2014), no. 1, 57–85.

[2] Saito, Norikazu; Zhou, Guanyu, Analysis of the fictitious domain method with an L2 -penalty for elliptic problems Numer. Funct. Anal. Optim. 36 (2015), no. 4, 501–527.