

最適輸送法を用いた 偏微分方程式のソルバー

PDE solver using optimal transport

坂井 幸人

数物科学専攻 2 年

February 7, 2024

目次

- ① 研究目的
- ② 前提知識
- ③ The back-and-forth method
- ④ 実装と結果

研究背景

- U : 内部エネルギー
- $\nabla\varphi$: U によって生成される圧力勾配
- ρ : 質量密度 (確率測度) ($\rho \geq 0, \|\rho\|_{L_1} = 1$)

$$\begin{aligned}\partial_t \rho - \nabla \cdot (\rho \nabla \varphi) &= 0, \\ \varphi &= \delta U(\rho).\end{aligned}$$

⇒ 一般的に剛性かつ非線形であるため数値計算が困難

⇒ 効率的かつ正確にシュミレートしたい

研究背景

$$\begin{aligned}\partial_t \rho - \nabla \cdot (\rho \nabla \varphi) &= 0, \\ \varphi &= \delta U(\rho).\end{aligned}$$

$$U(\rho) = \frac{\gamma}{m-1} \int_{\Omega} \rho^m dx$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \Delta(\rho^m) \quad (m > 1, \gamma > 0)$$

研究目的

The back-and-forth method[2] を用いた偏微分方程式のソルバーが
多孔質勾配方程式 (porous medium equation)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \Delta(\rho^m) \quad (m > 1, \gamma > 0)$$

を他のソルバーより効率的に、幅広い条件で解けることを示す。

前提知識

最適輸送問題 (Monge の問題 (1871))

ある砂山から砂山 (測度 μ) と同じ体積の穴 (測度 ν) に砂を運ぶ (写像 T). 輸送にかかるコストは重さと移動距離に依存する時, コストを最小にする方法を求めよ.

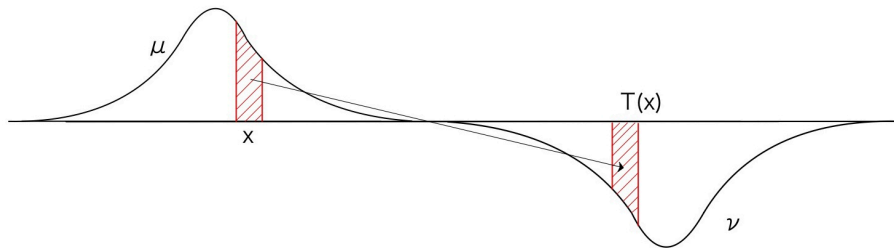


Figure: transport map

多孔質勾配方程式について考える：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \Delta(\rho^m) \quad (m > 1, \gamma > 0)$$

ただし内部エネルギー U は

$$U(\rho) = \frac{\gamma}{m-1} \int \rho^m dx$$

である。

⇒ 時間離散化によって近似解 ρ を求めたい

⇒ 多孔質勾配方程式を Wasserstein 距離を用いた
Wasserstein 勾配流として表現する

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \Delta(\rho^m) \quad (m > 1, \gamma > 0)$$

- $\tau > 0$
- $t_n := n\tau$

最小化問題

$$\rho_n \in \underset{\substack{\rho \geq 0 \\ \|\rho\|_{L^1} = 1}}{\operatorname{argmin}} \left(U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \rho_{n-1}) \right)$$

2-Wasserstein 距離

$$\frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) = \sup_{\varphi(x) + \psi(y) \leq \frac{1}{2\tau} |x-y|^2} \left(\int \varphi d\rho + \int \psi d\mu \right)$$

c-変換

$$\psi^c(x) := \inf_y \left(\frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \psi(y) \right)$$

を定義することで、

$$\varphi(x) + \psi(y) \leq \frac{1}{2\tau} |x - y|^2$$

の制約をなくし、一つの関数で表すことができる。

内部エネルギー U の Legendre 変換

$$U^*(\varphi) := \sup_{\substack{\rho \geq 0 \\ \|\rho\|_{L^1}=1}} \left(\int \varphi d\rho - U(\rho) \right)$$

を用いることで、最小化問題は以下の双対性を持つ:

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\rho \geq 0 \\ \|\rho\|_{L^1}=1}} \left(U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) \right) &= \sup \left(\int \varphi^c d\mu - U^*(-\varphi) \right) =: \sup J \\ &= \sup \left(\int \psi d\mu - U^*(-\psi^c) \right) =: \sup I \end{aligned}$$

The back-and-forth method

$$J(\varphi) := \int \varphi^c d\mu - U^*(-\varphi)$$

$$\nabla_H J(\varphi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\delta U^*(-\varphi) - T_{\varphi \#} \mu]$$

$$I(\psi) := \int \psi d\mu - U^*(-\psi^c)$$

$$\nabla_H I(\psi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\mu - T_{\psi \#}(\delta U^*(\psi^c))]$$

$$\psi \leftarrow \varphi^c$$

$$\varphi \leftarrow \psi^c$$

Algorithm

Algorithm: the back-and-forth method

Input μ and φ_0 , iterate until $\|\delta U^*(-\varphi) - T_{\varphi\#}\mu\|_{L^1(\Omega)} < \forall \varepsilon$:

$$\varphi_{k+\frac{1}{2}} = \varphi_k + \nabla_H J(\varphi_k)$$

$$\psi_{k+\frac{1}{2}} = (\varphi_{k+\frac{1}{2}})^c$$

$$\psi_{k+1} = \psi_{k+\frac{1}{2}} + \nabla_H I(\psi_{k+\frac{1}{2}})$$

$$\varphi_{k+1} = (\psi_{k+1})^c$$

$$\nabla_H J(\varphi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\delta U^*(-\varphi) - T_{\varphi\#}\mu]$$

$$\nabla_H I(\psi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\mu - T_{\psi\#}(\delta U^*(\psi^c))]$$

- H : 重み付き Sobolev 空間 H^1 に基づくノルム

\implies BFM によって最適な関数 φ_{n*} を求める

pushforward measure

$$\nabla_H J(\varphi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\delta U^*(-\varphi) - T_{\varphi\#} \mu]$$

$$\nabla_H I(\psi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\mu - T_{\psi\#}(\delta U^*(\psi^c))]$$

$T_{\varphi\#} \mu$ は μ から ρ へ輸送する写像 T による pushforward measure である ($T_{\varphi\#} \mu = \rho$)。

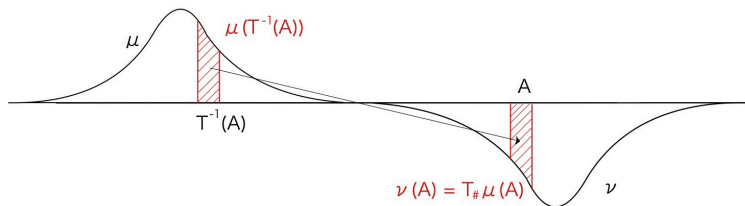


Figure: pushforward measure

BFM の解から最小化問題の解の復元

多孔質勾配方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \Delta(\rho^m) \quad (m > 1, \gamma > 0)$$

の最小化問題

$$\rho_n \in \underset{\substack{\rho \geq 0 \\ \|\rho\|_{L^1} = 1}}{\operatorname{argmin}} \left(U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \rho_{n-1}) \right)$$

は、BFM から得られた解 φ_{n*} を利用して、

$$\rho_{n*}(x) = \delta U^*(-\varphi_{n*}) = \left(\frac{m-1}{m\gamma} \max(-\varphi_{n*}, 0) \right)^{\frac{1}{m-1}}$$

で求めることができる

実装

多孔質勾配方程式 ($m = 2, \gamma = 10^{-3}$)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \Delta(\rho^m)$$

- the back-and-forth method を用いたソルバー
- Berger, Brezis, Rogers[1] によって提案された BBR スキームのソルバー
- Euler 陽解法

を用いて計算する

ただし厳密解は Barenblatt solution を用いる

$$\rho(t, x) = \max \left(\frac{1}{t^{\frac{1}{3}}} \left(C - \frac{1}{12} \frac{|x|^2}{t^{\frac{2}{3}}} \right), 0 \right)$$

The back-and-forth method の数値解

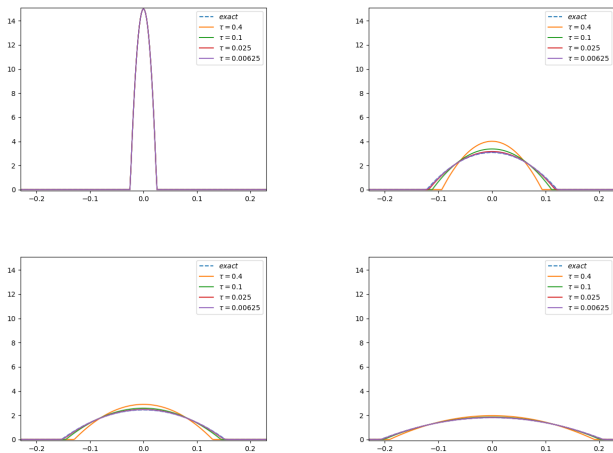


Figure: 時刻 $t = 0, 0.4, 0.8, 2.0$ における時間ステップ τ に対するグラフ

BBRスキームの数値解

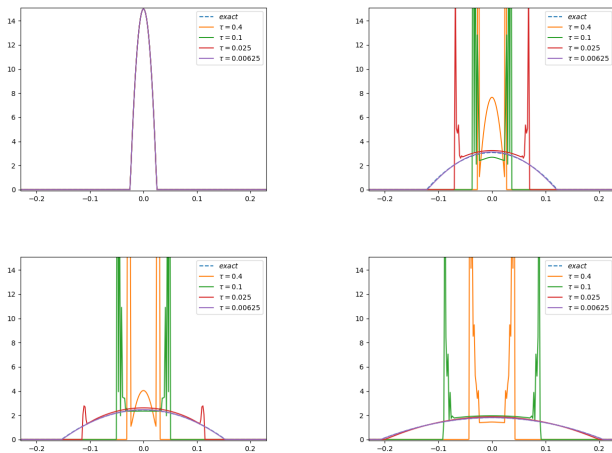


Figure: 時刻 $t = 0, 0.4, 0.8, 2.0$ における時間ステップ τ に対するグラフ

計算速度と誤差比較

Table: Errors and calculation times(grid size 512, $\varepsilon = 10^{-3}$)

τ	N_τ	the back-and-forth method		BBR scheme	
		Error	Time(s)	Error	Time(s)
0.4	5	8.68×10^{-2}	0.069	7.19×10^{-1}	0.000342
0.2	10	5.74×10^{-2}	0.139	6.37×10^{-1}	0.00067
0.1	20	3.61×10^{-2}	0.162	4.97×10^{-1}	0.00131
0.05	40	2.15×10^{-2}	0.17	2.98×10^{-1}	0.00275
0.025	80	1.25×10^{-2}	0.198	1.16×10^{-1}	0.00495
0.0125	160	7.66×10^{-3}	0.214	3.77×10^{-2}	0.0102
0.00625	320	5.06×10^{-3}	0.245	1.02×10^{-2}	0.0202
0.0001	20000	1.81×10^{-2}	3.7	1.25×10^{-4}	1.54

まとめ

- ① 大きい τ でも近似ができる
 - ▶ $\rho_*(x) = \delta U^*(-\varphi_*)$ で ρ を再現する
 - ▶ c -変換によって制約条件がない
- ② grid size に対して適切な τ と ε を取る必要がある
 - ▶ BFM ループの終了条件 $\|\delta U^*(-\varphi) - T_{\varphi\#}\mu\|_{L^1(\Omega)} < \forall \varepsilon$ を満たさないため

今後の展望としては多孔質勾配方程式の m の値を大きくすること、2・3次元などで考えることなどが挙げられる

参考文献

- [1] Alan E. Berger, Haim Brezis, and Joël C. W. Rogers.
A numerical method for solving the problem $u_t - \delta f(u) = 0$.
RAIRO. Analyse numérique, 13(4):297–312, 1979.
- [2] Matt Jacobs, Wonjun Lee, and Flavien Léger.
The back-and-forth method for Wasserstein gradient flows.
ESAIM Control Optim. Calc. Var., 27:Paper No. 28, 35, 2021.