連続最適化および関連分野に関する夏季学校
連続最適化への応用に向けた常微分方程式の数値解析入門
演習問題 解答例

佐藤 峻

2023 年 8 月 9 日

問題 1. Runge–Kutta 法の安定性関数が,

$$R(z) = \frac{\det(I - zA + z\mathbf{1}b^\top)}{\det(I - zA)}$$

を満たすことを示せ.

解答 1. まず, 安定性関数 R を素直に計算する. Dahlquist のテスト方程式に Runge–Kutta 法を適用すると,

$$X_i = 1 + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\lambda X_j$$

$$x_1 = 1 + h\sum_{i=1}^{s} b_i\lambda X_i$$

となり, x_1 を $z = h\lambda$ の関数で表したものが安定性関数 R である. 内部段 X_i を束ねたベクトルを X (つまり, $X = \begin{bmatrix} X_1 & \cdots & X_s \end{bmatrix}^\top$) と書くことにすると, 第一式は,

$$X = \mathbf{1} + \lambda hAX$$

と書ける. すなわち, $X = (I - zA)^{-1}\mathbf{1}$ である. これを第二式に代入すると,

$$R(z) = 1 + zb^\top(I - zA)^{-1}\mathbf{1} \tag{1}$$

を得る.

ブロック行列 M を

$$M = \begin{bmatrix} 1 & -b^\top \\ z\mathbf{1} & I - zA \end{bmatrix}$$

と定め, M の行列式を 2 通りの方法で評価すると,

$$\det M = \det(1) \times \det(I - zA + z\mathbf{1}b^\top),$$
$$\det M = \det(I - zA) \times \det\Big(1 + zb^\top(I - zA)^{-1}\mathbf{1}\Big)$$

を得るため, これを整理すると, 題意を得る.

問題 2. 任意の 1 次以上の精度をもつ陽的 Runge–Kutta 法について, その安定領域は有界であることを示せ.

解答 2. 1 次以上の精度をもつ陽的 Runge–Kutta 法の安定性関数 R は,

$$R(z) = 1 + z + \alpha_2 z^2 + \cdots + \alpha_s z^s$$

とかける ($|\alpha_s| \neq 0$ を満たすように s を選ぶ). 極座標表示 $z = r\exp(\mathrm{i}\theta)$ を用いると,

$$\begin{aligned} |R(z)| &\geq |\alpha_s|r^s - \big|1 + r\exp(\mathrm{i}\theta) + \cdots + \alpha_{s-1}r^{s-1}\exp((s-1)\mathrm{i}\theta)\big| \\ &\geq |\alpha_s|r^s - \big(1 + r + |\alpha_2|r^2 + \cdots + |\alpha_{s-1}|r^{s-1}\big) \end{aligned}$$

が成立する．最右辺は，実係数の多項式であり，最高次の係数が正であるため，ある R が存在して，任意の $r > R$ について，

$$|\alpha_s| r^s - \left(1 + r + |\alpha_2| r^2 + \cdots + |\alpha_{s-1}| r^{s-1}\right) > 1$$

が成立する．これより，安定領域 S は原点を中心とし，半径 R の円に含まれるため，有界である (したがって，A 安定ではない).

問題 3. μ-強凸 L-平滑関数に対する Nesterov の加速勾配法に相当する線形 2 段階法

$$x^{(k+2)} - (1+\gamma)x^{(k+1)} + \gamma x^{(k)} = h\Big((1-\gamma^2)g\big(x^{(k+1)}\big) - \gamma(1-\gamma)g\big(x^{(k)}\big)\Big)$$

の絶対安定領域 $S \subseteq \mathbb{C}$ について，$S \cap \mathbb{R}$ を L, μ を用いて表せ ($L \geq \mu > 0$ とする)．ここで，

$$\gamma \coloneqq \frac{1 - \sqrt{\frac{\mu}{L}}}{1 + \sqrt{\frac{\mu}{L}}} \in [0, 1)$$

である．

解答 3. 安定領域 S の定義は，

$$S = \{\, z \in \mathbb{C} \mid \pi(\zeta; z) \text{ が根条件を満たす．} \}$$

であったため，

$$S \cap \mathbb{R} = \{\, z \in \mathbb{R} \mid \pi(\zeta; z) \text{ が根条件を満たす．} \}$$

を考えればよい．与えられた線形 2 段階法について，

$$\pi(\zeta; z) = \zeta^2 - (1+\gamma)(1 + z(1-\gamma))\zeta + \gamma(1 + z(1-\gamma))$$

である．この (ζ に関する) 2 次関数の根を調べればよい．記述を簡単にするために，$\hat{z} = 1 + z(1-\gamma)$ を導入し，

$$\hat{\pi}(\zeta; \hat{z}) = \zeta^2 - (1+\gamma)\hat{z}\zeta + \gamma\hat{z}$$

を考えることにする．

まずは，根条件の 2 つ目に当たる，重解の場合を処理しておく．重解になるのは，$(1+\gamma)^2\hat{z}^2 = 4\gamma\hat{z}$ の場合であり，これは，(A) $\hat{z} = 0$, (B) $\hat{z} = \frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}$ の 2 通りのみである．(A) の場合については，根も 0 であるため，絶対値は 1 未満であり，考えなくてよい．(B) の場合については，根は $\frac{2\gamma}{1+\gamma}$ であり，任意の $\gamma \in [0, 1)$ に対して 1 未満であるため，考えなくてよい．

続いて，重解でない場合に，根の絶対値が 1 以下になる条件を考える．2 次関数 $\hat{\pi}$ の根 $\zeta_\pm$ は，

$$\zeta_\pm = \frac{(1+\gamma)\hat{z} \pm \sqrt{(1+\gamma)^2\hat{z}^2 - 4\gamma\hat{z}}}{2}$$

と書ける (複号同順)．ここで，(i) $\hat{z} \in \left(0, \frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}\right)$ のとき根 $\zeta_\pm$ は (共役) 複素数であり，(ii) $\hat{z} < 0$ あるいは (iii) $\hat{z} > \frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}$ のときは実根である．それぞれの場合について検討する．

(i) $\hat{z} \in \left(0, \frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}\right)$ の場合.
根の絶対値の 2 乗を考えると，

$$|\zeta_\pm|^2 = \left(\frac{(1+\gamma)\hat{z}}{2}\right)^2 + \frac{4\gamma\hat{z} - (1+\gamma)^2\hat{z}^2}{4} = \gamma\hat{z}$$

であるため，$|\zeta_\pm| \leq 1$ は，$\hat{z} \leq 1/\gamma$ と同値である．$\frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2} < 1 < \frac{1}{\gamma}$ であるため，$\hat{z} \in \left(0, \frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}\right)$ を満たす全ての $\hat{z}$ において，根の絶対値は 1 以下である．

(ii) $\hat{z} < 0$ の場合.
符号に注意すると,

$$\max\{|\zeta_+|, |\zeta_-|\} = |\zeta_-| = \frac{-(1+\gamma)\hat{z} + \sqrt{(1+\gamma)^2\hat{z}^2 - 4\gamma\hat{z}}}{2}$$

である．これが 1 以下になる必要十分条件は，整理すると $\hat{z} \geq -\frac{1}{1+2\gamma}$ である．つまり，$\hat{z} \in \left[-\frac{1}{1+2\gamma}, 0\right)$ を満たす全ての $\hat{z}$ において，根の絶対値は 1 以下である．

(iii) $\hat{z} > \frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}$ の場合.
符号に注意すると,

$$\max\{|\zeta_+|, |\zeta_-|\} = |\zeta_+| = \frac{(1+\gamma)\hat{z} + \sqrt{(1+\gamma)^2\hat{z}^2 - 4\gamma\hat{z}}}{2}$$

である．これが 1 以下になる必要十分条件は，整理すると $\hat{z} \leq 1$ である．つまり，$\hat{z} \in \left(\frac{4\gamma}{(1+\gamma)^2}, 1\right]$ を満たす全ての $\hat{z}$ において，根の絶対値は 1 以下である．

以上の考察を総合すると，$\hat{z} \in \left[-\frac{1}{1+2\gamma}, 1\right]$ を満たす全ての $\hat{z}$ において，根条件は満たされる．よって，$\hat{z}$ の定義より，

$$\begin{aligned} S \cap \mathbb{R} &= \left\{ z \in \mathbb{R} \;\middle|\; -\frac{1}{1+2\gamma} \leq 1 + z(1-\gamma) \leq 1 \right\} \\ &= \left\{ z \in \mathbb{R} \;\middle|\; -\frac{2(1+\gamma)}{(1+2\gamma)(1-\gamma)} \leq z \leq 0 \right\} \\ &= \left\{ z \in \mathbb{R} \;\middle|\; -\frac{2\bigl(1+\sqrt{\frac{\mu}{L}}\bigr)}{3-\sqrt{\frac{\mu}{L}}}\sqrt{\frac{L}{\mu}} \leq z \leq 0 \right\}. \end{aligned}$$

問題 4. 写像 $g\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ は L-Lipschitz 連続とする．任意の $x_0, y_0 \in \mathbb{R}^d$ に対して，$x, y\colon [0,T) \to \mathbb{R}^d$ が,

$$\begin{aligned} &\dot{x}(t) = g(x(t)) \quad (t \in (0,T)), && x(0) = x_0, \\ &\dot{y}(t) = g(y(t)) \quad (t \in (0,T)), && y(0) = y_0 \end{aligned}$$

を満たすとき,

$$\|x(t) - y(t)\| \leq \exp(Lt)\|x_0 - y_0\| \qquad (t \in (0,T))$$

が成立することを示せ.

解答 4. 関数 $e(t) \coloneqq \|x(t) - y(t)\|^2$ について,

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e(t) &= 2\langle x(t) - y(t), \dot{x}(t) - \dot{y}(t)\rangle \\ &= 2\langle x(t) - y(t), g(x(t)) - g(y(t))\rangle \\ &\leq 2L\|x(t) - y(t)\|^2 \\ &= 2Le(t) \end{aligned}$$

が成立する．よって，$e(t) \leq \exp(2Lt)e(0)$ が成立する．関数 e の定義より，これは題意の成立を意味する．

問題 5. 2 段 2 次の陽的 Runge–Kutta 法を全て求めよ．また，具体的な計算により，どの手法についても，安定性関数は $R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2}$ であることを確認せよ．

解答 5. 2 段陽的 Runge–Kutta 法の非零パラメータは，a_{21}, b_1, b_2 の 3 つである．このときの，2 次精度の条件は,

$$b_1 + b_2 = 1, \qquad\qquad b_2 a_{21} = \frac{1}{2}$$

の 2 つである．よって，α をパラメータとして,

$$a_{21} = \alpha, \qquad b_1 = 1 - \frac{1}{2\alpha}, \qquad b_2 = \frac{1}{2\alpha}$$

のようにパラメータを選べば，この Runge–Kutta 法は 2 次精度である．

安定性関数 R について，式 (1) を用いると，

$$\begin{aligned}
R(z) &= 1 + z \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{2\alpha} & \frac{1}{2\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -z\alpha & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= 1 + z \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{2\alpha} & \frac{1}{2\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ z\alpha & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= 1 + z \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{2\alpha} & \frac{1}{2\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 + z\alpha \end{bmatrix} \\
&= 1 + z \left(1 - \frac{1}{2\alpha} + \frac{1 + z\alpha}{2\alpha} \right) \\
&= 1 + z + \frac{1}{2} z^2.
\end{aligned}$$

問題 6. 陽的な線形 3 段階法で，5 次精度を達成するものを求めよ．また，求めた線形 3 段階法が零安定でないことを示せ．(この問題については，次数条件を満たすパラメータを求める際に数値実験を用いてよい．)

解答 6. 陽的 3 段法は，$\alpha_3 = 1$ とおくと (一般性を失わない)，

$$x^{(k+3)} + \alpha_2 x^{(k+2)} + \alpha_1 x^{(k+1)} + \alpha_0 x^{(k)} = \beta_2 g\left(x^{(k+2)}\right) + \beta_1 g\left(x^{(k+1)}\right) + \beta_0 g\left(x^{(k)}\right)$$

とかける．5 次精度の次数条件を書き下すと，

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 4 & 0 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & 8 & 0 & 3 & 12 \\ 0 & 1 & 16 & 0 & 4 & 32 \\ 0 & 1 & 32 & 0 & 5 & 80 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -3 \\ -9 \\ -27 \\ -81 \\ -243 \end{bmatrix}$$

となる．これの解は，

$$\begin{aligned}
&\alpha_0 = -10, && \alpha_1 = -9, && \alpha_2 = 18, \\
&\beta_0 = -3, && \beta_1 = -18, && \beta_2 = -9
\end{aligned}$$

となる[*1]．このとき，第一特性多項式は $\rho(z) = z^3 + 18z^2 - 9z - 10$ である．この ρ の根は 1 と $\frac{-19 \pm \sqrt{19^2 - 40}}{2}$ であるため，この線形 3 段法は零安定ではない．

問題 7. 凸関数に対する加速勾配法に対応する ODE

$$\ddot{x} + \frac{3}{t}\dot{x} + \nabla f(x) = 0, \quad x(0) = x_0, \ \dot{x}(0) = 0$$

を数値的に解いて挙動を観察せよ．ただし，目的関数 f や，数値解法は自由に定めてよい．(汎用の ODE ソルバーを用いても構わない．ただし，その場合は，実装に用いられている手法を確認すること)．

解答 7. まずは，1 階の ODE に書き換える．つまり，$v = \dot{x}$ を導入して，

$$\begin{aligned}
\dot{x} &= v, \\
\dot{v} &= -\frac{3}{t} v - \nabla f(x)
\end{aligned}$$

を初期値 $(x(0), v(0)) = (x_0, 0)$ の下で考える．目的関数は，$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{10}{2}x_2^2$ とする．このとき，具体的な ODE は，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & -\frac{3}{t} & 0 \\ 0 & -10 & 0 & -\frac{3}{t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

[*1] 手で解くのは大変だが，適当な線形方程式のソルバーに解いてもらって，その解を有理数 (今回は整数) に丸めて確認すればよい．

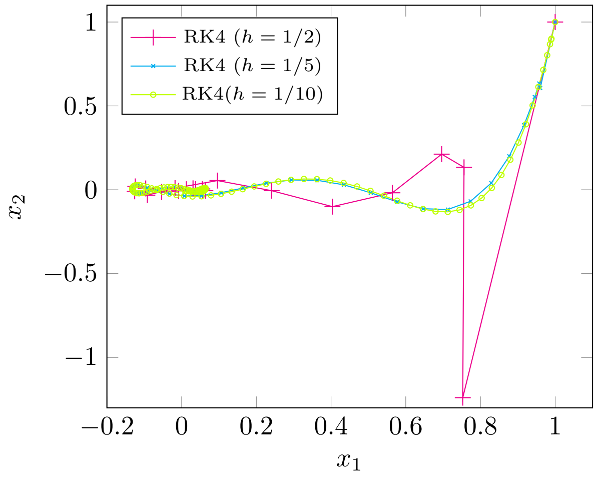

図 1　RK4 の軌道

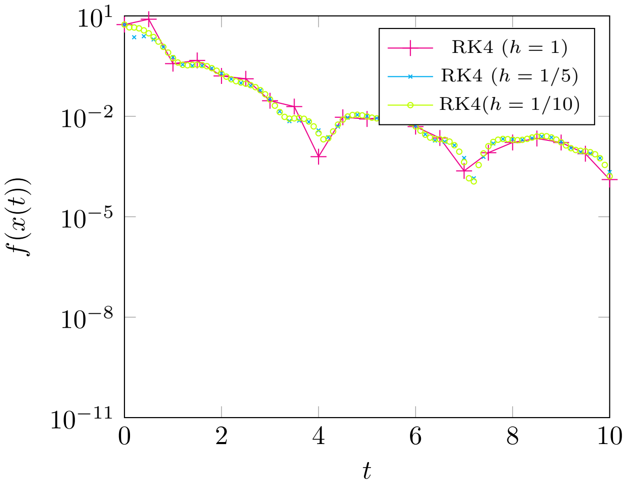

図 2　RK4 の軌道上の目的関数値

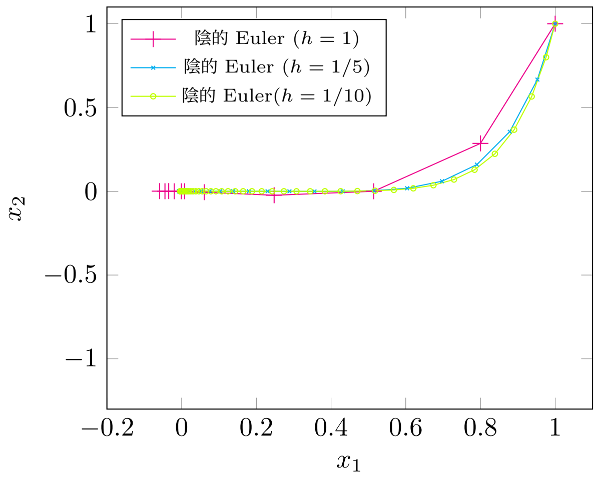

図 3　陰的 Euler の軌道

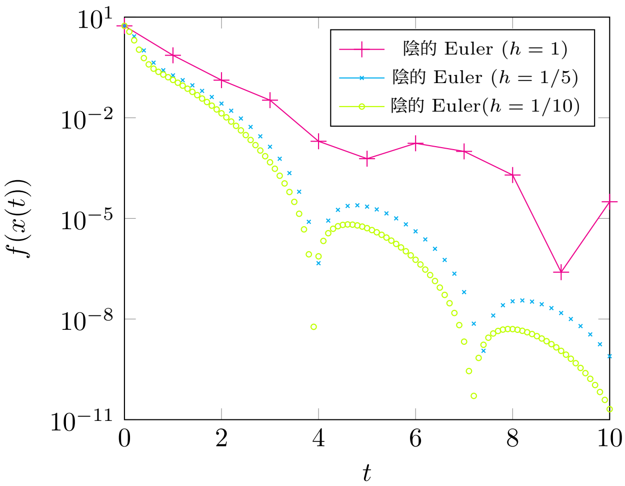

図 4　陰的 Euler の軌道上の目的関数値

となる．ここに現れる行列の固有値は，

$$\frac{-3 \pm \sqrt{9 - 4t^2}}{2t}, \qquad \frac{-3 \pm \sqrt{9 - 40t^2}}{2t}$$

の 4 つであり，$t \to \infty$ でこれらの固有値は虚軸に漸近する[*2]．このため，陽的 Euler 法との相性が致命的に悪く，陽的 Euler 法を使うとステップ幅をかなり小さくしてもまともに動かない．

そこで，虚軸上を少し含む陽的解法である，4 段 4 次 Runge–Kutta 法 (RK4) を適用してみると，$h = 1$ では発散してしまうが，h をもう少し小さくすると，発散はせず，有限の解を出力する (図 1)[*3]．目的関数値も，単調減少ではないが，加速勾配法でよく見られるような，振動しながら減少していく様が観察される (図 2)．

続いて，陰的 Euler 法の数値実験も行う．陰的 Euler 法は，非常に安定な数値解法であるため，$h = 1$ でも計算は破綻しない．軌道 (図 3) を見ると，あまり振動せずに最小解に向かっているように見えるが，目的関数値 (図 4) を見ると，RK4 と同様に振動しつつ減少していく様が観察された．

[*2] $t \to 0$ で負の実軸方向に発散するが，これは有限の大きさのステップ幅をとっている限り，あまり大きな問題にはならない (計算は破綻しない)．ただし，$h \to 0$ としたときに厳密解に収束するかは怪しい．

[*3] $t = 0$ で特異性があるが，これは，$t = 0$ で $\frac{v}{t} = 0$ と定めることで処理した．