修士論文 要旨

発展方程式に対する乱択化分解解法

数理情報学専攻 48216202　**麻生 豊大**

指導教員　**松尾宇泰 教授**

1　概要

数値解析分野における散逸系微分方程式の数値解法の研究は，最適化分野における一次法の研究と密接な関係にある．例えば，最も素朴な常微分方程式の数値解法である陽的オイラー法を勾配系に適用することは，最急降下法においてステップ幅を一定にした特殊ケースとして捉えることができる．このような数値解析と最適化の親和性を考えると，一方の知見を他方に転用することは自然である．実際に数値解析の視点を最適化に持ち込んだ研究として，Eftekhari *et al.*[1] や Ushiyama *et al.*[4] などが知られている．これに対して，最適化手法に着想を得て数値解析手法を開発する研究はそれほど行われていない．

近年，機械学習の分野で，大規模な問題を確率的最適化手法で効率良く解くことが，大きな成功を収めている．数値解析学的の視点からは，これらの確率的手法は最適化手法の連続版を表す力学系をランダムな分解解法で解いていると見做せ，対応する微分方程式の数値解法を考えることは難しくない．機械学習での成功を考えると，このような最適化から数値解析への確率的手法の輸入は有効に思われるが，そのような研究は意外なほどに少ない．例えば，Eisenmann–Stillfjord[2] では，この種の手法を検討しているが，その対象は陰的オイラー法に制限されており，収束性の解析においても一般的な設定をした結果，$O(h^{1/2})$ という評価にとどまっている．

本研究では，確率的座標降下法に対応する数値解析手法を提案し，拡散方程式，Allen-Cahn 方程式，Cahn-Hilliard 方程式での数値実験を行った．この手法は理論上 $O(h)$ で収束するはずであるが，その実際の挙動についてはこれまで全く知られていなかった．

2　提案手法

確率的座標降下法に着想を得て，アルゴリズム 1のような数値解法を提案した．ただし，分解後の時間発展写像については，さらに何らかの数値解法で置き換えても良い．本研究では下記の乱択化分解解法を，陽的オイラー法，陰的オイラー法，DVDM など様々な数値解法と組み合わせながら，数値実験によってその実際の挙動を観察した．

Algorithm 1 最も素朴な乱択化分解解法

Require: $\dot{x} = -\nabla f(x), d = \dim(x), h > 0, M \in \mathbb{N}, x^{(0)}$

Ensure: $x^{(m)} (m = 1, 2, \ldots, M)$

1: **for** $m = 1, 2, \ldots, M$ **do**

2: 　ベクトル $(1, 2, \ldots, d)$ をランダムに並べ替えたベクトル $(i(1), i(2), \ldots, i(d))$ を生成

3: 　分解解法

$$\varphi_{-\nabla f,h} \simeq \varphi_{(-\nabla f)_{i(d)},h} \circ \varphi_{(-\nabla f)_{i(d-1)},h} \circ \cdots \circ \varphi_{(-\nabla f)_{i(1)},h}$$ で 1 ステップ発展

4: **end for**

結果として提案手法は定性的に良い挙動を示すことが確認された．加えて 2 点大きな発見があったため，それぞれについて以下で紹介する．

3　分解による陽的オイラー法の安定性向上

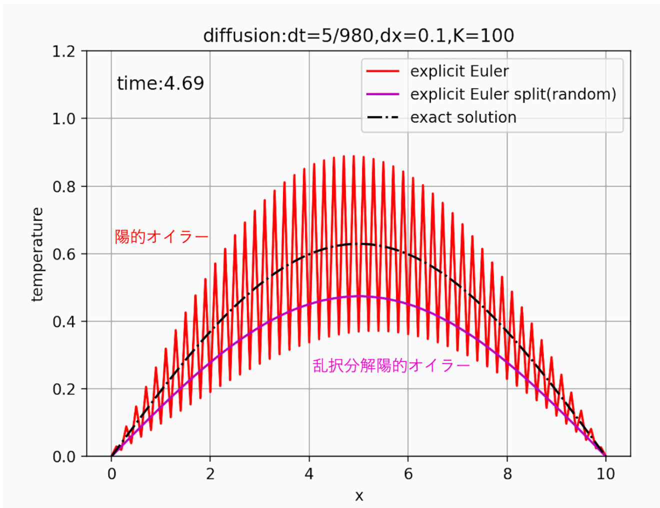

図 1. 拡散方程式における陽的オイラー法と乱択分解陽的オイラー法の挙動

確率的座標降下法に最も素朴に対応する乱択分解オイラー法について，拡散方程式，Allen-Cahn 方程式，Cahn-Hilliard 方程式でその挙動を実際に確認した．乱択分解オイラー法は，十分小さい時間刻み幅においては定性的に良い挙動を示しただけでなく，通常の陽的オイラー法よりも数値的に安定であることが発見された (図 1).

この結果については本研究で理論的な説明を与えた．以下の定理は実験的観察の結果とよく符号した．

定理 1. 拡散方程式に乱択分解陽的オイラー法を用いる場合，安定性条件は $\Delta t < (\Delta x)^2$ となる．

cf. 通常の陽的オイラー法では $\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2}$.

略証. 拡散方程式の場合，陽的オイラー法の更新式，および乱択分解陽的オイラー法の一座標分の更新式はそれぞれ

$$\mathbb{U}^{(n+1)} = \left(I + \Delta t \cdot D^{\langle 2\rangle}\right)\mathbb{U}^{(n)}, \tag{1}$$

$$\mathbb{U}^{(n+1)} = \left(I + \Delta t \cdot D_i^{\langle 2\rangle}\right)\mathbb{U}^{(n)} \tag{2}$$

である．ただし，$D^{\langle 2\rangle}$ は通常の二階差分を表す行列，$D_i^{\langle 2\rangle}$ はその第 i 行だけを残し，他を 0 とした行列である．

数値解法が数値的に安定であるためには，$I + \Delta t \cdot D^{\langle 2\rangle}, I + \Delta t \cdot D_i^{\langle 2\rangle}$ の固有値が，全て絶対値 1 以下である必要がある．すなわち $\Delta t \cdot D^{\langle 2\rangle}, \Delta t \cdot D_i^{\langle 2\rangle}$ の固有値が複素平面上の $\{z| \, ||z+1|| \leq 1\}$ の領域内にあれば良い．

$\Delta t \cdot D^{\langle 2\rangle}$ については，固有値が $\frac{\Delta t\left(-2+2\cos\frac{2\pi k}{K}\right)}{(\Delta x)^2}$ $(k = 1, \cdots, K)$ と求まる．$\Delta t \cdot D_i^{\langle 2\rangle}$ については，非零固有値は $-\frac{2\Delta t}{(\Delta x)^2}$ ただ一つである．これらの固有値が $\{z| \, ||z+1|| \leq 1\}$ に入るという条件から，定理中の安定性条件が求まる． □

4 乱択分解 DVDM における二次精度の達成

偏微分方程式に対する構造保存解法として Furihata–Matsuo[3] で提案された Discrete Variational Derivative Method(以下，DVDM) は，本研究で扱った方程式群に対して非常に優れた解法であることが知られている．DVDM は，連続系におけるエネルギー散逸性を離散系で厳密に保存し，更に二次精度を達成する．

一方で，DVDM の実用上の課題として計算量の大きさが挙げられる．陰的解法であるため，一回の時間発展に多次元の非線形方程式を解く必要があり，問題が高次元であれば計算時間が非常に長くなってしまう．本研究では，計算量削減の効果がある分解解法を DVDM と組み合わせることで，独自の観点から DVDM の高速化に取り組んだ．

乱択分解 DVDM は厳密な散逸性こそ満たさないものの，時間刻み幅が十分小さい場合には定性的に良い挙動を示すことが数値実験によって確認された．加えて，乱択分解 DVDM が二次精度を達成することを示唆する結果も得られた (図 2)．DVDM は二次の解法であるが，乱択化分解解法は一次の解法であるため，その組み合わせが二次精度となるのは意外な結果である．昇順分解の場合は一次精度に留まっており，乱択分解であることが本質的に重要であると予想される．この実験結果に対する理論的な説明は今後の課題である．

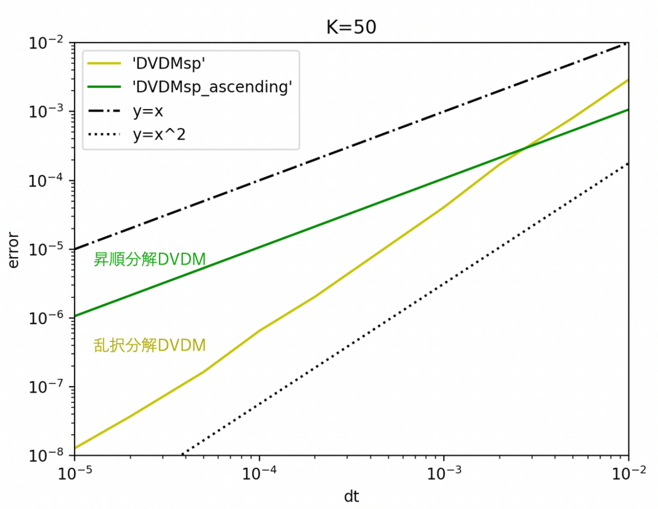

図 2. 拡散方程式における空間離散化後厳密解との誤差プロット (空間刻み幅は固定)

5 まとめ

本研究では確率的座標降下法に着想を得た乱択化分解解法なる数値解法を提案し，実験によりその挙動の妥当性を確認した．それに加えて，分解解法によって陽的オイラー法の安定性が向上すること，乱択化分解解法により DVDM の二次精度が回復されること，の 2 点の新たな発見があった．

参考文献

[1] Eftekhari, A., Vandereycken, B., Vilmart, G. and Zygalakis: K, C. Explicit stabilised gradient descent for faster strongly convex optimisation, BIT Numer Math, 61 (2021), 119–139.
[2] Eisenmann, M. and Stillfjord, T.: A randomized operator splitting scheme inspired by stochastic optimization methods, arXiv:2210.05375, 2022.
[3] Furihata, D. and Matuo, T.:Discrete Variational Derivative Method, Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, 2011.
[4] Ushiyama, K., Sato, S., and Matsuo, T.:Essential convergence rate of ordinary differential equations appearing in optimization, JSIAM Letters, 14(2022), 119–122.