

微分不可な方程式系に対する 行列を使用しない数値解法について

成島康史

福島工業高等専門学校
コミュニケーション情報学科

概要

実社会において発生する問題の中には微分不可能な方程式系に帰着されるものが数多く存在する。例えば、経済における均衡問題は微分不可能な方程式系として再定式化される。他にも数多くの応用例があり、現在も多くの研究者が微分不可能な方程式系を解くための数値解法を研究している。そのような研究の多くは Newton 法の流れを組むような行列を利用した数値解法であり、局所的に速い収束性が保証されているものも多い。しかしながら、そのような数値解法は問題の次元が大規模で、かつ、行列が密になってしまうような場合には、直接適用することはできない。本論文では微分不可能な方程式系に対する行列を使用しない数値解法を非線形共役勾配法に基づいて提案する。さらに、提案法の大域的収束性を一般的な仮定の下で証明する。

A matrix-free method for nonsmooth systems of equations

Yasushi Narushima

Department of Communication and Information Science
Fukushima National College of Technology

Abstract

Many problems in real world are reduced to nonsmooth systems of equations and hence many researchers study numerical methods for solving nonsmooth systems of equations. As numerical methods for solving such problems, Newton like methods are known as efficient numerical methods. However, these methods cannot apply to large-scale problems, because they must keep matrices. In this paper, we propose a numerical method which is based on the nonlinear conjugate gradient method and does not use any matrices for solving nonsmooth systems of equations. In addition, we prove the global convergence property of the proposed method under standard assumptions.

1 はじめに

本論文では方程式系

$$F(x) = 0 \quad F: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n \quad (1)$$

に対する数値解法を考える. ただし, F は連続ではあるが微分可能とは限らないものとする. このような微分不可能な方程式系には多くの応用があり, 現在もその数値解法の研究が盛んに行われている (例えば [2] を参照). 中でも, 一般化 Jacobi 行列を利用した一般化ニュートン法や, 平滑化関数を用いる平滑化ニュートン法などといったニュートン法の改良法が有効な数値解法としてよく知られているが, 大規模な問題の場合には行列を保存するための記憶容量や探索方向を求めるための計算量が爆発的に大きくなってしまう. したがって今回, 我々は行列を使用しない数値解法を考える.

取り扱う関数が微分不可能である場合, 通常広く使用されている, 勾配を用いた方法は使用できなくなる. そのためにいくつかの方法が提案されているが, 一つの有効な方法として平滑化法が挙げられる. 平滑化法は微分不可な関数の平滑化関数を用いる方法である.

定義 1. 連続な関数 $F: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ に対し, $\tilde{F}: \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ が $\mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}^n$ において連続微分可能で, かつ任意の $x \in \mathbf{R}^n$ に対して

$$\lim_{t \rightarrow +0} \tilde{F}(t, x) = F(x)$$

を満たすとき, $\tilde{F}$ を F の平滑化関数という.

例 $f(x) = |x| - 1$ は, $x = 0$ で微分不可であるが, $\tilde{f}(t, x) = \sqrt{x^2 + t^2} - 1$ は $\mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}$ で連続微分可能であり, f の平滑化関数となっている.

ここで, 上で定義した平滑化関数を用いて関数 $H: \mathbf{R}^{1+n} \rightarrow \mathbf{R}^{1+n}$ を

$$H(t, x) = \begin{pmatrix} t \\ \tilde{F}(t, x) \end{pmatrix} \quad (2)$$

とすると, $H(t, x) = 0 \implies F(x) = 0$ が成立する. さらにメリット関数 $\Psi: \mathbf{R}^{1+n} \rightarrow \mathbf{R}$ を

$$\Psi(t, x) = \frac{1}{2} \|H(t, x)\|^2 = \frac{1}{2} \{t^2 + \|\tilde{F}(t, x)\|^2\} \quad (3)$$

とすれば, 無制約最小化問題 $\min \Psi(t, x)$ を解くことで $F(x) = 0$ の解を求めることができる. よって, 次節以降ではその無制約最小化問題 $\min \Psi(t, x)$ を解くための数値解法を提案していく.

ここで, 以降に必要な関数の勾配や使用する表記などをまとめておく. まず, 簡単のために $v := (t, x)$, $v_k := (t_k, x_k)$ と表記することとする. 関数 $\tilde{F}$ の勾配は

$$\nabla \tilde{F}(v) = \begin{pmatrix} \nabla_t \tilde{F}(v) \\ \nabla_x \tilde{F}(v) \end{pmatrix}$$

で与えられる。したがって、(3) より、関数 Ψ の勾配は

$$\nabla \Psi(v) = \begin{pmatrix} \nabla_t \Psi(v) \\ \nabla_x \Psi(v) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t + \nabla_t \tilde{F}(v) \tilde{F}(v) \\ \nabla_x \tilde{F}(v) \tilde{F}(v) \end{pmatrix} \quad (4)$$

となる。ここで、 $\nabla_t \tilde{F}(v)$ は横ベクトルであり、 $\nabla_t \tilde{F}(v) \tilde{F}(v)$ はスカラーであることを注意しておく。

2 アルゴリズム

本節では無制約最小化問題 $\min \Psi(v)$ を解くための行列を使用しない反復法を提案する。反復法は最小化問題や方程式系を解くための数値解法として広く使用されており、 k 回目の反復式は $v_{k+1} = v_k + \alpha_k d_k$ で与えられる。ここで $\alpha_k > 0$ をステップ幅、 $d_k \in \mathbf{R}^n$ を探索方向と呼ぶ。最小化するメリット関数 Ψ は平滑化関数 H の性質から $t > 0$ では連続微分可能であるが、 $t \leq 0$ においては微分可能とは限らないため、勾配ベクトル $\nabla \Psi$ を直接的に使用するような数値解法は使用できない。そのため、 $t > 0$ を保つような工夫が必要となる。今回我々は、正の定数 $\bar{\gamma}$, $\bar{t}$ ($\bar{\gamma}\bar{t} < 1$) に対して

$$\gamma_k = \gamma(v_k), \quad \gamma(v) = \bar{\gamma} \min\{1, \Psi(v)\}, \quad \Omega = \{v \mid t \geq \bar{t}\gamma(v)\} \quad (5)$$

として、生成された点列 $\{v_k\}$ が Ω に含まれるようなアルゴリズムを提案する ($v = (t, x) \in \Omega$ かつ $\Psi(v) \neq 0$ ならば $t > 0$ である)。さらに、 $F(x) = 0$ に解が存在するとして、 $\{v_k\} \subset \Omega$ を仮定すると、 $t_k \rightarrow 0$ のとき $\gamma_k \rightarrow 0$ となるため $\Psi(v_k) \rightarrow 0$ が成立する。つまり、 $\{v_k\} \subset \Omega$ となるように点列を生成することで t_k のみが先に 0 にいつてしまうことを回避している。

条件 $\{v_k\} \subset \Omega$ を満たすように点列を生成するためには、探索方向がメリット関数 Ψ の降下方向であることと、数列 $\{t_k\}$ が単調減少列であることが重要である。提案法では変数 $v = (t, x)$ は変数 t と変数 x を異なる扱いで探索方向を生成する。具体的には、変数 t に対しては数列 $\{t_k\}$ が単調減少となるように探索方向を定め、変数 x に対しては全体としての探索方向がメリット関数の降下方向となるように探索方向を定める。ここで変数 x に対する探索方向は Zhang ら [1] によって提案されている無制約最小化問題に対する共役勾配法をもとに提案していく。まず、変数 x に対する探索方向 $\tilde{d}_k$ を以下のように定める：

Case 1. $\nabla_x \Psi(v_k) = 0$ の場合、

$$\tilde{d}_k = 0,$$

Case 2. $\nabla_x \Psi(v_k) \neq 0$ かつ $\eta \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 \geq \nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)$ の場合、

$$\tilde{d}_k = \begin{cases} -\nabla_x \Psi(v_k) & k = 0, \\ -\nabla_x \Psi(v_k) + \beta_k \tilde{d}_{k-1} - \phi_k y_{k-1} & k \geq 1, \end{cases}$$

Case 3. $\nabla_x \Psi(v_k) \neq 0$ かつ $\eta \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 < \nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)$ の場合,

$$\tilde{d}_k = \begin{cases} -\nabla_x \Psi(v_k) - \frac{\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)}{\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2} \nabla_x \Psi(v_k) & k = 0, \\ -\nabla_x \Psi(v_k) + \beta_k \tilde{d}_{k-1} - \phi_k y_{k-1} - \frac{\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)}{\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2} \nabla_x \Psi(v_k) & k \geq 1. \end{cases}$$

ただし, $\eta \in (0, 1)$ を定数,

$$\beta_k = \frac{\nabla_x \Psi(v_k)^T y_{k-1}}{\|\nabla \Psi(v_k)\|^2}, \quad \phi_k = \frac{\nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_{k-1}}{\|\nabla \Psi(v_k)\|^2}, \quad (6)$$

$y_{k-1} = \nabla_x \Psi(v_k) - \nabla_x \Psi(v_{k-1})$ とする. さらに, 変数 t に対する探索方向を $\bar{t}\gamma_k - t_k$ として, 全体としての探索方向を

$$d_k = \begin{pmatrix} \bar{t}\gamma_k - t_k \\ \tilde{d}_k \end{pmatrix} \quad (7)$$

とする.

提案した探索方向 (7) に対して以下の補題が成立する.

補題 1. $v_k \in \Omega$ かつ $t_k > 0$ とする. このとき, $\tilde{F}(v_k) \neq 0$ ならば, 任意の $\alpha \in (0, 1]$ に対して $0 < t_k + \alpha(\bar{t}\gamma_k - t_k) \leq t_k$ が成立する.

Proof. まず, $v_k \in \Omega$ より $\bar{t}\gamma_k - t_k \leq 0$ が成立する. したがって $t_k + \alpha(\bar{t}\gamma_k - t_k) \leq t_k$ が成立する. さらに, $\tilde{F}(v_k) \neq 0$ より $\gamma_k > 0$ であるので,

$$0 < (1 - \alpha)t_k + \alpha\bar{t}\gamma_k = t_k + \alpha(\bar{t}\gamma_k - t_k)$$

も成立する. □

次に提案した探索方向がメリット関数の降下方向, すなわち $\nabla \Psi(v_k)^T d_k < 0$ であることを示す.

補題 2. $v_k \in \Omega$ かつ $0 < t_k \leq 1$ とする. このとき, $\nabla_x \tilde{F}(v_k)$ が正則ならば

$$\nabla \Psi(v_k)^T d_k \leq -(1 - \eta) \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 + t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) < 0 \quad (8)$$

が成立する.

Proof. まず, (4) と (7) より

$$\begin{aligned} \nabla \Psi(v_k)^T d_k &= \nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_k + \nabla_t \Psi(v_k)^T (\bar{t}\gamma_k - t_k) \\ &= \nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_k + t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) + \nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k) \end{aligned} \quad (9)$$

が成立する. 次に探索方向の生成における 3 つの場合に分けて考える.

Case 1. まず, $\nabla_x \tilde{F}(v_k)$ は正則であることと, $\nabla_x \Psi(v_k) = \nabla_x \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) = 0$ から $\tilde{F}(v_k) = 0$ が成り立つ. したがって, $\tilde{F}(v_k) = 0$ と $\nabla_x \Psi(v_k) = 0$ より

$$\begin{aligned} \nabla \Psi(v_k)^T d_k &= \nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_k + t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) + \nabla_t \tilde{F}_k(v_k) \tilde{F}(v_k)(\bar{t}\gamma_k - t_k) \\ &= t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) \\ &= -(1 - \eta) \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 + t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) \end{aligned}$$

が成立する. 次に $(\bar{t}\gamma_k - t_k) < 0$ を示せばよい. ここで, $v_k \in \Omega$ なので $(\bar{t}\gamma_k - t_k) \leq 0$ が成り立つ. もし $(\bar{t}\gamma_k - t_k) = 0$ ならば, $0 < t_k$ から $\Psi(v_k) \neq 0$ が成り立つことと, (5) より

$$t_k = \bar{\gamma} \bar{t} \min\{1, \Psi(v_k)\} < \min\{1, \Psi(v_k)\} \leq \frac{1}{2} \{t_k^2 + \|\tilde{F}(v_k)\|^2\}$$

となるが, $\nabla_x \tilde{F}(v_k)$ は正則であるので, $\tilde{F}(v_k) = 0$ が成り立ち, $t_k < \frac{1}{2} t_k^2$ となる. これは $0 < t_k \leq 1$ に反するので $(\bar{t}\gamma_k - t_k) < 0$ が成立する. したがって, (8) が成立する.

Case 2. 式 (6) と $\tilde{d}_k$ の定義より, $k \geq 1$ に対し

$$\begin{aligned} \nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_k &= -\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 + \beta_k \nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_{k-1} - \phi_k \nabla_x \Psi(v_k)^T y_{k-1} \\ &= -\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 \end{aligned}$$

が成立し, $k = 0$ の場合も $\nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_k = -\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2$ となる. したがって, (9) と $\eta \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 \geq \nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)(\bar{t}\gamma_k - t_k)$ から

$$\begin{aligned} \nabla \Psi(v_k)^T d_k &= -\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 + t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) + \nabla_t \tilde{F}_k(v_k) \tilde{F}(v_k)(\bar{t}\gamma_k - t_k) \\ &\leq -(1 - \eta) \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 + t_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) < 0 \end{aligned}$$

が成立する.

Case 3. $\tilde{d}_k$ の定義より, $k \geq 0$ に対し

$$\begin{aligned} \nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_k &= -\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 - \nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)(\bar{t}\gamma_k - t_k) \\ &\leq -(1 - \eta) \|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2 - \nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)(\bar{t}\gamma_k - t_k) \end{aligned}$$

が成立するので, (9) より (8) が成り立つ. □

補題 1 と補題 2 は任意のステップ幅 $\alpha_k \in (0, 1]$ に対して, $0 < t_{k+1} \leq t_k$ であり, さらに探索方向 (7) がメリット関数 Ψ の降下方向となっていることを意味している. 探索方向が降下方向であるので, メリット関数値が毎回減少するような直線探索を用いることが可能であり, 直線探索を含めたアルゴリズムを以下のように構築することができる.

アルゴリズム 1.

Step 0. $\bar{t} \in (0, 1]$, $\bar{\gamma} \in (0, 1)$, $\sigma \in (0, 1)$, $\delta \in (0, 1)$ を選ぶ. $t_0 = \bar{t}$ とし, 初期点 $v_0 = (t_0, x_0^T)^T \in \Omega$ を与える. $k := 0$ として Step 1 へ.

Step 1. $\|F(x_k)\| = 0$ ならば終了する.

Step 2. 探索方向 d_k を (7) により計算する.

Step 3. 以下を満たす最小の非負整数 m を求め $\alpha_k = \sigma^m$ とする:

$$\Psi(v_k + \sigma^m d_k) \leq \Psi(v_k) - \delta \|\sigma^m d_k\|^2. \quad (10)$$

Step 4. 点列を $v_{k+1} = v_k + \alpha_k d_k$ により更新する.

Step 5. $k := k + 1$ として Step 1 へ.

注意 1: 任意の $x_0 \in \mathbf{R}^n$ に対して $(\bar{t}, x_0^T)^T \in \Omega$ が成立するので x_0 は $\mathbf{R}^n$ の任意の点を選択できる.

注意 2: 平滑化関数の定義より Ψ は連続微分可能である. したがって, 各反復において (10) の直線探索は実行可能である. さらに $\{\Psi(v_k)\}$ が下に有界な単調減少列となることから

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\alpha_k d_k\| = 0 \quad (11)$$

が成立する.

3 大域的収束性

この節では, 前節で提案したアルゴリズムの大域的収束性を議論する. 以降では, 任意の k において $\|\tilde{F}(v_k)\| \neq 0$ を仮定することとし, また, 平滑化関数 $\tilde{F}$ に対して以下を仮定する.

仮定 1.

A1. $\tilde{F}$ は $\mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}^n$ で連続微分可能であり, さらに $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_k\| = \infty$ であるような任意の無限点列 $\{x_k\} \subset \mathbf{R}^n$ と任意の有界な正数列 $\{t_k\}$ に対し

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\tilde{F}(t_k, x_k)\| = \infty \quad (12)$$

が成立する.

A2. 任意の $v \in (\mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}^n) \cap \Omega$ において $\nabla_x \tilde{F}(v)$ は正則である.

ここで (12) の仮定はメリット関数 Ψ の初期点における準位集合 $\mathcal{L} = \{v \mid \Psi(v) \leq \Psi(v_0)\}$ の有界性を保証するための仮定になっている. 元の関数 F やその平滑化の方法にも依存するため一概にはいえないが, F 自体が強圧的であるならば, この仮定は合理的であると考えられる.

仮定 1 のもとで以下の補題が成立する.

補題 3. 任意の k に対して $v_k \in \Omega$ が成立する.

Proof. まず, 初期点の取り方から $v_0 \in \Omega$ である. $v_k \in \Omega$ であるとする, $t_k \geq \bar{t}\gamma_k$ であるので, ステップ幅 $\alpha_k \in (0, 1]$ に対して,

$$t_{k+1} = t_k + \alpha_k(\bar{t}\gamma_k - t_k) = (1 - \alpha_k)t_k + \alpha_k\bar{t}\gamma_k \geq \bar{t}\gamma_k$$

が成立する. ここで $\{\Psi(v_k)\}$ は単調減少列であるので, $\gamma_k \geq \gamma_{k+1}$ であり, $t_{k+1} \geq \bar{t}\gamma_{k+1}$ が成立する. これは $t_{k+1} \in \Omega$ を意味するので, 任意の k に対して $v_k \in \Omega$ が成立する. $\square$

注意 3: アルゴリズム 1 においてステップ幅が $\alpha \in (0, 1]$ を満たすことと, 補題 1 から, $\{t_k\}$ は単調減少列であり, 任意の k に対して $t_k > 0$ であることが分かる. また, 補題 3 から $\{v_k\} \subset \Omega$ であることも示されたので, $\{v_k\} \subset \mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}^n \cap \Omega$ が成り立ち, 仮定 A2 から任意の k に対して $\nabla_x \tilde{F}(v_k)$ は正則であることがわかる.

次に, 提案法の大域的収束性に必要な以下の補題を証明する.

補題 4. $\lim_{k \rightarrow \infty} t_k \neq 0$ を仮定する. このとき $\{d_k\}$ は有界である.

Proof. まず, $\{\Psi(v_k)\}$ は単調減少列であるので $\{v_k\} \subset \mathcal{L}$ が成り立ち, 仮定 A1 より, 準位集合 $\mathcal{L}$ は有界閉である. したがって $\{v_k\}$ は集積点を持つ.

ここで, 補題を示す準備として

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla \Psi(v_k)\| \neq 0 \quad (13)$$

であることを示す. 式 (13) を示すための背理法の仮定として,

$$\lim_{k \in K', k \rightarrow \infty} v_k = v^*, \quad \|\nabla \Psi(v^*)\| = 0 \quad (14)$$

となるような部分列 K' が存在すると仮定する. すると, (4) より $\nabla_x \tilde{F}(v^*) \tilde{F}(v^*) = 0$ も成立する. ここで, 注意 3 から $\{v_k\} \in \Omega \cap \mathcal{L}$ であり, $\Omega \cap \mathcal{L}$ も有界閉であることから $v^* \in \Omega \cap \mathcal{L}$ が成立する. さらに $v^* = (t^*, x^*)$ とすると, 補題の仮定から $t^* > 0$ である. したがって仮定 A2 から $\nabla_x \tilde{F}(v^*)$ は正則であり, $\nabla_x \tilde{F}(v^*) \tilde{F}(v^*) = 0$ から $\tilde{F}(v^*) = 0$ が成り立つ. したがって $\nabla_t \tilde{F}(v^*) \tilde{F}(v^*) = 0$ となるが, これは (4) と $\|\nabla \Psi(v^*)\| = 0$ から $t^* = 0$ が成立することとなり, $t^* > 0$ に反する. したがって, (13) が示された. よって, すべての k に対して $\|\nabla \Psi(v_k)\| > \varepsilon$ となるような正の定数 ε が存在する.

ここで, $\gamma_k \leq 1$ と $t_k \leq 1$ から

$$|\bar{t}\gamma_k - t_k| \leq \bar{t}\gamma_k + t_k \leq \bar{t} + 1$$

であるので, $\|d_k\|^2 = \|\tilde{d}_k\|^2 + (\bar{t}\gamma_k - t_k)^2$ を考慮すると, $\{d_k\}$ の有界性を示すには, $\{\tilde{d}_k\}$ の有界性を示せば十分である. 以下では探索方向の生成における 3 つの場合に分けて考える.

Case 1. 定義より $\|\tilde{d}_k\| = 0$ である.

Case 2. $\tilde{d}_k$ の定義より,

$$\begin{aligned}\|\tilde{d}_k\| &\leq \|\nabla_x \Psi(v_k)\| + \frac{|\nabla_x \Psi(v_k)^T y_{k-1}|}{\|\nabla \Psi(v_k)\|^2} \|\tilde{d}_{k-1}\| + \frac{|\nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_{k-1}|}{\|\nabla \Psi(v_k)\|^2} \|y_{k-1}\| \\ &\leq \|\nabla_x \Psi(v_k)\| + 2 \frac{\|\nabla_x \Psi(v_k)\| \|y_{k-1}\|}{\varepsilon^2} \|\tilde{d}_{k-1}\|\end{aligned}\quad (15)$$

である. ここで, $\tilde{F}$ は連続微分可能であるので, $\nabla_x \Psi$ は連続である. よって, $\{v_k\} \subset \mathcal{L}$ が有界であるので, 正の定数 c_1 が存在して, 任意の k に対して

$$\|\nabla_x \Psi(v_k)\| < c_1$$

を満たす. さらに, (11) から $\lim_{k \rightarrow \infty} \|v_k - v_{k-1}\| = 0$ が成立するので, $\nabla_x \Psi$ の連続性から正の定数 $b \in (0, 1)$ と正の整数 k_0 が存在して, $k \geq k_0$ に対して,

$$\|y_{k-1}\| = \|\nabla_x \Psi(v_k) - \nabla_x \Psi(v_{k-1})\| \leq \frac{b\varepsilon}{2c_1}$$

が成立する. したがって (15) から,

$$\|\tilde{d}_k\| \leq c_1 + b \|\tilde{d}_{k-1}\|$$

が成立する.

Case 3. Case2 と同様にして, $k \geq k_0$ に対して,

$$\begin{aligned}\|\tilde{d}_k\| &\leq \|\nabla_x \Psi(v_k)\| + \frac{|\nabla_x \Psi(v_k)^T y_{k-1}|}{\|\nabla \Psi(v_k)\|^2} \|\tilde{d}_{k-1}\| + \frac{|\nabla_x \Psi(v_k)^T \tilde{d}_{k-1}|}{\|\nabla \Psi(v_k)\|^2} \|y_{k-1}\| \\ &\quad + \frac{|\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)|}{\|\nabla_x \Psi(v_k)\|^2} \|\nabla_x \Psi(v_k)\| \\ &\leq c_1 + b \|\tilde{d}_{k-1}\| + \frac{|\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)|}{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)\|}\end{aligned}\quad (16)$$

と評価できるので右辺項の最後の項を考える. まず, $\lim_{k \rightarrow \infty} t_k \neq 0$ かつ $\{t_k\}$ が単調減少列であることから, ある正の数 t' が存在して $t_k \in [t', 1]$ となる. よって $\{v_k\} \subset ([t', 1] \times \mathbf{R}^n) \cap \Omega \cap \mathcal{L}$ も成立する. ここで ρ_k を $\nabla_x \tilde{F}(v_k)$ の最小特異値とすると, 仮定 A2 と $([t', 1] \times \mathbf{R}^n) \cap \Omega \cap \mathcal{L}$ が有界閉であること, および, $\nabla_x \tilde{F}$ の連続性から, 正の定数 c_2 が存在して任意の k に対して, $\rho_k \geq c_2$ が成立する. したがって, 任意の k に対して

$$\|\nabla_x \tilde{F}(v_k)^{-1}\| \leq \frac{1}{c_2}$$

が成立する. よって

$$\begin{aligned}\frac{|\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)|}{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)\|} &= \frac{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k)^{-1}\| |\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k) (\bar{t}\gamma_k - t_k)|}{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k)^{-1}\| \|\nabla_x \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)\|} \\ &\leq \frac{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k)^{-1}\| \|\nabla_t \tilde{F}(v_k)\| \|\tilde{F}(v_k)\| |\bar{t}\gamma_k - t_k|}{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k)^{-1}\| \|\nabla_x \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)\|} \\ &\leq \frac{1 + \bar{t}}{c_2} \|\nabla_t \tilde{F}(v_k)\|\end{aligned}$$

となる. さらに, $\nabla_t \tilde{F}$ の連続性と $\mathcal{L}$ が有界閉であることから, $\{\|\nabla_t \tilde{F}(v_k)\|\}$ も有界である. よって, ある正の定数 c_3 が存在して

$$\frac{|\nabla_t \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)(\bar{t}\gamma_k - t_k)|}{\|\nabla_x \tilde{F}(v_k) \tilde{F}(v_k)\|} \leq c_3$$

が成立する. したがって, (16) より

$$\|\tilde{d}_k\| \leq c_1 + c_3 + b\|\tilde{d}_{k-1}\|$$

を得る.

以上 Case 1-3 をまとめると, 定数 $c_4 > 0$ と $b \in (0, 1)$ が存在して, 十分大きな k に対して

$$\|\tilde{d}_k\| \leq c_4 + b\|\tilde{d}_{k-1}\|$$

となることが分かった. よって, これをある固定された k_0 まで展開することで

$$\|\tilde{d}_k\| \leq c_4(1 + b + b^2 + \cdots + b^{k-k_0-1}) + b^{k-k_0}\|\tilde{d}_{k_0}\| \leq \frac{c_4}{1-b} + \|\tilde{d}_{k_0}\|$$

が成立する. したがって, $\{d_k\}$ が有界であることが示された. $\square$

以上の補題を用いることで, 次の定理を得る.

定理 1. 仮定 1 が成立しているとし, $\{v_k\}$ をアルゴリズム 1 によって生成される点列とする. このとき, $\{v_k\}$ は少なくとも一つの集積点を持ち, 任意の集積点 $v^* = (t^*, x^*)$ は $H(v^*) = 0$ を満たし, したがって $F(x^*) = 0$ が成立する.

Proof. 直線探索の条件 (10) より $\{\Psi(v_k)\}$ は単調減少列であるので, $v_k \in \mathcal{L}$ であり, $\mathcal{L}$ は有界閉であるので点列 $\{v_k\}$ は少なくとも一つの集積点を持つ. また, $\{t_k\}$ は下に有界な単調減少列なので極限点 t^* を持つ. ここで, 背理法の仮定として $t^* > 0$ を仮定する.

(11) から以下のうち少なくとも一方は成立する:

$$\begin{aligned} \text{(A)} &: \liminf_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0, \\ \text{(B)} &: \liminf_{k \rightarrow \infty} \|d_k\| = 0. \end{aligned}$$

まず, (A) について考える. 補題 4 から $\{d_k\}$ は有界で, $\{v_k\}$ もやはり有界なので, ある集積点 d^* および v^* が存在して,

$$\lim_{k \in K_1, k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0, \quad \lim_{k \in K_1, k \rightarrow \infty} d_k = d^*, \quad \lim_{k \in K_1, k \rightarrow \infty} v_k = v^*$$

となるような部分列 K_1 が存在する. ここで十分大きな $k \in K_1$ に対して, $m = 0$ は (10) を満たさないので,

$$\frac{\Psi(v_k + (\alpha_k/\sigma)d_k) - \Psi(v_k)}{\alpha_k} > -\frac{\delta\alpha_k}{\sigma^2}\|d_k\|^2$$

が成立する. ここで, $k \rightarrow \infty$ ($k \in K_1$) とすると $\nabla \Psi(v^*)^T d^* \geq 0$ を得る. 一方で補題 2 から任意の k に対して $\nabla \Psi(v_k)^T d_k < 0$ であつたので, $\nabla \Psi(v^*)^T d^* \leq 0$ となる. よって

$$\nabla \Psi(v^*)^T d^* = 0$$

が成立する.

次に (B) について考えると, $\{v_k\}$ は有界であるので,

$$\lim_{k \in K_2, k \rightarrow \infty} d_k = d^* = 0, \quad \lim_{k \in K_2, k \rightarrow \infty} v_k = v^*$$

となるような部分列 K_2 が存在する. したがって, $\nabla \Psi(v^*)^T d^* = 0$ を得る.

以上から, いずれの場合も $\liminf_{k \rightarrow \infty} |\nabla \Psi(v_k)^T d_k| = 0$ が得られるので,

$$\lim_{k \in K_3, k \rightarrow \infty} \nabla \Psi(v_k)^T d_k = 0, \quad \lim_{k \in K_3, k \rightarrow \infty} d_k = d^*, \quad \lim_{k \in K_3, k \rightarrow \infty} v_k = v^*$$

を満たす部分列 K_3 が存在する. ここで補題 2 の (8) 式と関数 γ の連続性から

$$0 \leq (1 - \eta) \|\nabla_x \Psi(v^*)\|^2 + |t^*(\bar{t}\gamma(v^*) - t^*)| \leq |\nabla \Psi(v^*)^T d^*|$$

が得られ, $\Psi(v^*)^T d^* = 0$ と $t^* > 0$ より,

$$\nabla_x \Psi(v^*) = \nabla_x \tilde{F}(v^*) \tilde{F}(v^*) = 0 \quad (17)$$

$$\bar{t}\gamma(v^*) - t^* = 0 \quad (18)$$

が成立する. ここで, $v^* \in \Omega$ と $t^* > 0$ より $\nabla_x \tilde{F}(v^*)$ は正則なので, (17) から $\tilde{F}(v^*) = 0$ が得られる. したがって, $t^* \in (0, 1]$ から

$$\Psi(v^*) = \frac{1}{2} \{\|\tilde{F}(v^*)\|^2 + (t^*)^2\} = \frac{1}{2} (t^*)^2 < 1$$

が成立する. 一方, (18), $\bar{t}\gamma < 1$ と $\Psi(v^*) < 1$ より

$$0 < t^* = \bar{t}\gamma(v^*) = \bar{t}\gamma \min\{1, \Psi(v^*)\} = \bar{t}\gamma \Psi(v^*) < \frac{1}{2} (t^*)^2$$

となり, $2 < t^*$ を得る. よってこれは, $t^* \leq 1$ に矛盾する. したがって

$$\lim_{k \rightarrow \infty} t_k = 0$$

が成立する.

ここで改めて $v^* = (t^*, x^*)$ を $\{v_k\} \subset \Omega \cap \mathcal{L}$ の任意の集積点とすると, $\Omega \cap \mathcal{L}$ は有界閉なので $v^* \in \Omega \cap \mathcal{L}$ が成立する. よって

$$0 = t^* \geq \bar{t}\gamma \min\{1, \Psi(v^*)\}$$

となり, これは $\Psi(v^*) = 0$ を意味している. 以上より, $H(v^*) = 0$ が成立するので定理は証明された. $\square$

4 おわりに

今回我々は、微分不可な方程式系に対する行列を使用しない数値解法を提案し、その解法の大域的収束性を議論した。大域的収束性に係る仮定として (12) を用いているが、 $\tilde{F}$ の代わりに $G(t, x) = \tilde{F}(t, x) + tx$ とすることで、関数 F や平滑化に関する条件を緩めることが可能であろう。 $\tilde{F}$ が F の平滑化関数であるならば G も F の平滑化関数となるため、今回のアルゴリズムや収束性の定理は $\tilde{F}$ を G に置き換えるだけで適用可能である。

本論文では新しい手法を提案し、収束性を示したが、数値実験は行っていない。既存の方法と提案法の比較実験を行い、提案法の有効性を検証する必要があるが、それは今後の課題である。

参考文献

- [1] L. Zhang, W. Zhou and D.H. Li, A descent modified Polak-Ribière-Polyak conjugate gradient method and its global convergence, *IMA Journal of Numerical Analysis*, **26** (2006), 629–640.
- [2] L. Qi and D. Sun, A survey of some nonsmooth equations and smoothing Newton methods, A. Eberhard, R. Hill, D. Ralph and B.M. Glover (eds.), *Progress in Optimization*, Springer, 1999, 121–146.