最適化問題の基礎 8

crimsonbach

2004 年 9 月 9 日

前回では制約つき最適化の 1 階条件までしか説明しなかったから、ここでは 2 階条件まで話を進める。$\overline{L}$ は選択変数については極値問題だが、ラグランジュ乗数 λ についてはそうではない。$c-g(\overline{x},\overline{y})$ は恒等的にゼロだから、 λ は何の影響も与えない。制約条件 $c-g(x,y)$ は $dg=g_xdx+g_ydy=0$ を意味し、 dx と dy の両方が同時に自由に動くことは出来なくなる。

$$
\begin{aligned}
d^2z=d(dz)&=\frac{\partial(dz)}{\partial x}dx+\frac{\partial(dz)}{\partial y}dy\\
&=\frac{\partial}{\partial x}(f_xdx+f_ydy)dx+\frac{\partial}{\partial y}(f_xdx+f_ydy)dy\\
&=\left[f_{xx}dx+(f_{xy}dy+f_y\tfrac{\partial dy}{\partial x})\right]dx+\left[f_{yx}dx+(f_{yy}dy+f_y\tfrac{\partial dy}{\partial y})\right]dy\\
&=f_{xx}dx^2+f_{xy}d_yd_x+f_y\frac{\partial(dy)}{\partial x}dx+f_{yx}dxdy+f_{yy}dy^2+f_y\frac{\partial(dy)}{\partial y}dy\\
&=f_{xx}dx^2+2f_{xy}dxdy+f_{yy}dy^2dy^2+f_yd^2y. \qquad (1)
\end{aligned}
$$

最後の項より、これは制約なしの最適化問題のように 2 次形式ではない。制約条件（ $g(x,y)=c$ ）より、2 次形式に変換できる。

$$
\begin{gathered}
dg=0,\quad d^2g=d(dg)=0\\
(d^2g=)\ g_{xx}d^2+2g_{xy}dxdy+g_{yy}dy^2+g_yd^2y=0
\end{gathered}
$$

これを d^2y について解き、(1) 式に代入すると

$$d^2z=(f_{xx}-\frac{f_y}{g_y}g_{xx})dx^2+2(f_{xy}-\frac{f_y}{g_y}g_{xy})dxdy+(f_{yy}-\frac{f_y}{g_y}g_{yy})dy^2.$$

また

$$
\begin{aligned}
L_{xx}&=f_{xx}-\lambda g_{xx}\\
L_{xy}&=f_{xy}-\lambda g_{xy}=L_{yx}\\
L_{yy}&=f_{yy}-\lambda g_{yy}
\end{aligned}
$$

より、(1) 式は

$$d^2z=L_{xx}dx^2+L_{xy}dxdy+L_{yx}dydx+L_{yy}dy^2. \qquad (2)$$

この係数からヘッセ行列式が作られる。

極値についての 2 階条件は d^2z が正値定符号あるいは負値定符号で表わす。dx および dy のすべての可能な値についてではなく、1 次式 $dg = 0$ を満たすような dx と dy について

- z が極大になる場合、 $dg = 0$ のもとで、 d^2z が正値定符号になる。
- z が極小になる場合、 $dg = 0$ のもとで、 d^2z が負値定符号になる。

制約つき極値テストではヘッセ行列式 $|H|$ に代わって、縁つきヘッセ行列式を使う。たとえば、次のような 1 次式の制約に従う 2 変数の 2 次形式の定符号はどうなるだろうか。

$$\alpha u + \beta v = 0 \quad \text{(制約式)}$$
$$q = au^2 + 2huv + bv^2 \quad \text{(目的関数)}$$

制約条件を $v = -(\frac{\alpha}{\beta})u$ に変形し目的関数に代入すると

$$q = au^2 - 2h\frac{\alpha}{\beta}u^2 + b\frac{\alpha^2}{\beta^2}u^2 = (a\beta^2 - 2h\alpha\beta + b\alpha^2)\frac{u^2}{\beta^2}.$$

$(\cdot)$ の部分が正（負）のときのみ、 q は正値（負値）定符号になる。次の対称行列式

$$\begin{vmatrix} 0 & \alpha & \beta \\ \alpha & a & h \\ \beta & h & b \end{vmatrix} = 2h\alpha\beta - a\beta^2 - b\alpha^2.$$

これは $(\cdot)$ を負にしたものにあたる。それゆえ、 $\alpha u + \beta v = 0$ を満たす、両方がともにゼロでない u および v の値に対して次のことがいえる。与えられた制約条件のもとで

$$\begin{vmatrix} 0 & \alpha & \beta \\ \alpha & a & h \\ \beta & h & b \end{vmatrix} \begin{Bmatrix} < 0 \\ > 0 \end{Bmatrix} \text{であるときのみ}, q \text{ は} \begin{Bmatrix} \text{正値定符号} \\ \text{負値定符号} \end{Bmatrix} \text{となる}. \tag{3}$$

この行列式は 2 次形式の判別式 $\begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix}$ の上側と左側に縁つけたものである。たとえば、制約条件 $u - 2v = 0$ 、目的関数 $q = 4u^2 + 4uv + 3v^2$ の縁つき判別式は

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & -2 \\ 1 & 4 & 2 \\ -2 & 2 & 3 \end{vmatrix} = -27 < 0.$$

よって正値定符号である。(2) 式の 2 次形式 d^2z においても判別式はヘシアン $\begin{vmatrix} L_{xx} & L_{xy} \\ L_{yx} & L_{yy} \end{vmatrix}$ と制約条件 $g_x dx + g_y dy = 0$ より

$$\begin{vmatrix} 0 & g_x & g_y \\ g_x & L_{xx} & L_{xy} \\ g_y & L_{yx} & L_{yy} \end{vmatrix} \begin{Bmatrix} < 0 \\ > 0 \end{Bmatrix} \text{であるときのみ、2 次形式 } d^2z \text{ は} \begin{Bmatrix} \text{正値定符号} \\ \text{負値定符号} \end{Bmatrix}. \tag{4}$$

この対称行列は $|\overline{H}|$ で表わされる。前回のヤコビアンに L_{xx} 、 L_{xy} 、 L_{yy} を代入すると、ヤコビアンの第 1 列および第 1 行に -1 をかけて（影響はない）

$$|J| = \begin{vmatrix} 0 & g_x & g_y \\ g_x & L_{xx} & L_{xy} \\ g_y & L_{yx} & L_{yy} \end{vmatrix} = |\overline{H}|. \tag{5}$$

内生変数のヤコビアンは縁つきヘシアンと同じになる。

n 個の説明変数の制約条件 $g(x_1,\cdots,x_n)=c$ のもとで、目的関数 $z=f(x_1,\cdots,x_n)$ では

$$(dg=)\ g_1dx_1+\cdots+g_ndx_n=0.$$

のもとで、変数 $dx_1,\cdots,dx_n$ の制約つき 2 次形式。

$$|\overline{H}|=\begin{vmatrix}0 & g_1 & g_2 & \cdots & g_n\\ g_1 & L_{11} & L_{12} & \cdots & L_{1n}\\ g_2 & L_{21} & L_{22} & \cdots & L_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ g_n & L_{n1} & L_{n2} & \cdots & L_{nn}\end{vmatrix} \tag{6}$$

縁つき首座小行列はそれぞれ

$$|\overline{H}_2|\equiv\begin{vmatrix}0 & g_1 & g_2\\ g_1 & L_{11} & L_{12}\\ g_2 & L_{21} & L_{22}\end{vmatrix},\quad |\overline{H}_3|\equiv\begin{vmatrix}0 & g_1 & g_2 & g_3\\ g_1 & L_{11} & L_{12} & L_{13}\\ g_2 & L_{21} & L_{22} & L_{23}\\ g_3 & L_{31} & L_{32} & L_{33}\end{vmatrix},$$

$$|\overline{H}_n|\equiv|\overline{H}|.$$

$\begin{Bmatrix}|\overline{H}_2|,\cdots,|\overline{H}_n|<0\\ |\overline{H}_2|>0;|\overline{H}_3|<0;|\overline{H}_4|>0;\cdots\end{Bmatrix}$ であるときのみ d^2z は $\begin{Bmatrix}\text{正値定符号}\\ \text{負値定符号}\end{Bmatrix}$ になる。

1 つ以上の制約条件が存在する場合、2 階条件は 1 つ以上の縁つきヘシアンで求めることができる。n 個の選択変数をもつ $m(<n)$ 個の制約条件は

$$g^j(x_i,\cdots,x_n)=c_j.$$

ラグランジュ関数は

$$L=f(x_1,\cdots,x_n)+\sum_{j=1}^{m}\lambda_j\left\{c_j-g^j(x_1,\cdots,x_n)\right\}.$$

縁つきヘシアンは

$$|\overline{H}|=\begin{vmatrix}0 & 0 & \cdots & 0 & g_1^1 & g_2^1 & \cdots & g_n^1\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & g_1^2 & g_2^2 & \cdots & g_n^2\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & g_1^m & g_2^m & \cdots & g_n^m\\ g_1^1 & g_1^2 & \cdots & g_n^1 & L_{11} & L_{12} & \cdots & L_{1n}\\ g_2^1 & g_2^2 & \cdots & g_n^2 & L_{21} & L_{22} & \cdots & L_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ g_n^1 & g_n^2 & \cdots & g_n^m & L_{n1} & L_{n2} & \cdots & L_{nn}\end{vmatrix} \tag{7}$$

$g_i^j\equiv\frac{\partial g^j}{\partial x_i}$ は制約関数の偏導関数で、 L_{st} はラグランジュ関数の 2 次偏導関数で、(7) 式は 4 つの領域から構成される。