最適化問題の基礎 2

crimsonbach

2004 年 8 月 27 日

まず n 次の多項関数を展開する。

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \cdots + a_n x^n. \tag{1}$$

$x = 0$ における展開をマクローリン級数、任意の点 $x = x_0$ における展開をテーラー級数という。では $f(x)$ を別の多項式に変形してみる。関数 $f(x)$ を次々に微分するとこうなる。

$$\begin{aligned}
f'(x) &= a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \cdots + n a_n x^{n-1} \\
f''(x) &= 2a_2 + 6a_3 x + 12a_4 x^2 + \cdots + n(n-1)a_n x^{n-2} \\
f'''(x) &= 6a_3 + 24a_4 x + 60a_5 x^2 + \cdots + n(n-1)(n-2)a_n x^{n-3} \\
&\vdots \\
f^{(n)}(x) &= n(n-1)(n-2)\cdots(3)(2)(1)a_n
\end{aligned}$$

最後には 1 つの定数項のみ現れる。これらを全て $x = 0$ で評価すると

$$f'(0) = \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=0} = a_1, \quad f''(0) = 2a_2, \quad f'''(0) = 6a_3, \quad \cdots \quad , f^{(n)}(0) = n(n-1)(n-2)\cdots(3)(2)(1)a_n.$$

$n! = n(n-1)(n-2)\cdots(3)(2)(1)$ から各係数は

$$a_1 = \frac{f'(0)}{1!}, \quad a_2 = \frac{f''(0)}{2!}, \quad a_3 = \frac{f'''(0)}{3!}, \quad \cdots \quad , a_n = \frac{f^{(n)}(0)}{n!}.$$

したがって、もとの関数 $f(x)$ は

$$f(x) = \frac{f(0)}{0!} + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n. \tag{2}$$

このように関数 $f(x)$ を $x = 0$ で展開したものをマクローリン級数という。たとえば関数 $f(x) = 2+4x+3x^2$ を $x = 0$ で展開してみよう。

$$f'(x) = 4 + 6x, \quad f''(x) = 6$$
$$f'(0) = \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=0} = 4, \quad f''(0) = 6.$$

したがって結果を代入すると

$$\begin{aligned}
f(x) &= f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 \\
&= 2 + 4x + 3x^2
\end{aligned}$$

マクローリン級数は関数を正しく現していると分かる。

　$x=0$ ではなく任意の点 $x=x_0$ で展開するテーラー級数の話に移ろう。まず x を偏差として考える。つまり

$$x = x_0 + \delta(\text{誤差}).$$

先程の例題で説明すると

$$\begin{aligned} f(x) &= 2 + 4x + 3x^2 \\ f(x) &= 2 + 4(x_0+\delta) + 3(x_0+\delta)^2 \\ f'(x) &= 4 + 6(x_0+\delta) \\ f''(x) &= 6. \end{aligned} \tag{3}$$

x_0 は任意の点であるから、(3) 式において変数は偏差 δ になる。改めて関数 $g(\delta)$ とすると

$$\begin{aligned} g(\delta) &= 2 + 4(x_0+\delta) + 3(x_0+\delta)^2 \\ g'(\delta) &= 4 + 6(x_0+\delta) \\ g''(\delta) &= 6. \end{aligned}$$

ここで $\delta = 0$ にてマクローリン展開を行う。

$$g(\delta) = \frac{g(0)}{0!} + \frac{g'(0)}{1!}\delta + \frac{g''(0)}{2!}\delta^2.$$

今 $\delta = 0$ なので $x = x_0$ であり、 $g(\delta) \equiv f(x)$ 。したがって

$$g(0) = f(x_0), \quad g'(0) = f'(x_0), \quad g''(0) = f''(x_0).$$

これは $f(x)$ を $x = x_0$ にて展開したものに他ならない。

$$\begin{aligned} & f(x) = g(\delta) = \frac{f(x_0)}{0!} + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 \\ & f(x_0) = 2 + 4x_0 + 3{x_0}^2 \\ & f'(x_0) = \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_0} = 4 + 6x_0 \\ & f''(x_0) = \left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_0} = 6 \end{aligned}$$

結果を代入すると

$$\begin{aligned} f(x) &= 2 + 4x_0 + 3{x_0}^2 + (4+6x_0)(x-x_0) + \frac{6}{2}(x-x_0)^2 \\ &= 2 + 4x + 3x^2. \end{aligned}$$

テーラー級数は関数 $f(x)$ を正しく現している。テーラー級数を一般的なかたちで記述すると

$$f(x) = \frac{f(x_0)}{0!} + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n. \tag{4}$$

任意の関数で展開点 x_0 において必要なだけ有限で連続的な導関数をもてば、他の多項式に変形できる。

　より数学的には $x = x_0$ における $\phi(x_0)$ があり、 x_0 における導関数の値がわかれば、 x_0 において次のように展開できる。

$$\phi(x) = \left[\frac{\phi(x_0)}{0!} + \frac{\phi'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{\phi''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \cdots \frac{\phi^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n\right] + R_n \equiv P_n + R_n. \tag{5}$$

(5) 式は剰余項（ R_n ）をもつテーラー級数という。剰余項 R_n は多項式 P_n の誤差の大きさを現す。n が大きければ大きいほど多項式に含まれる部分が大きくなる。たとえば $n=1$ のとき

$$\phi(x) = [\phi(x_0) + \phi'(x_0)(x - x_0)] + R_1 = P_1 + R_1.$$

これは ϕ に線形近似している。たとえば関数 $\phi(x) = \frac{1}{1+x}$ を $x_0 = 1$ で展開しよう。ただし $n = 4$ である。

$$\begin{aligned}
&\phi'(x) = -(1+x)^{-2}, \qquad \phi'(1) = -(2)^{-2} = \frac{-1}{4} \\
&\phi''(x) = 2(1+x)^{-3}, \qquad \phi''(1) = 2(2)^{-3} = \frac{1}{4} \\
&\phi'''(x) = -6(1+x)^{-4}, \qquad \phi'''(1) = -6(2)^{-4} = \frac{-3}{b} \\
&\phi^{(4)}(x) = 24(1+x)^{-5}, \qquad \phi^{(4)}(1) = 24(2)^{-5} = \frac{3}{4} \\
&\phi(1) = \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

結果を代入し

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(x-1) + \frac{1}{8}(x-1)^2 - \frac{1}{16}(x-1)^3 + \frac{1}{32}(x-1)^4 + R_4 \\
&= \frac{31}{32} - \frac{13}{16}x + \frac{1}{2}x^2 - \frac{3}{16}x^3 + \frac{1}{32}x^4 + R_4.
\end{aligned}$$

剰余項のラグランジュ形式は

$$R_n = \frac{\phi^{(n+1)}(p)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}. \tag{6}$$

p は x と x_0 の間のある数であり、別の方法で特定化される。$n = 0$ の場合、剰余項をもつテーラー級数は

$$\begin{aligned}
\phi(x) = P_0 + R_0 = \phi(x_0) + \phi'(p)(x - x_0) \\
\phi(x) - \phi(x_0) = \phi'(p)(x - x_0).
\end{aligned}$$

剰余項の大きさは n の大きさに依存する。n が ∞ に近づくとき剰余項 R_n は 0 に近づく。同様に、 n が ∞ に近づくとき多項式 P_n は関数 $\phi(x)$ に近づく。したがって、テーラー級数は展開点おいて $\phi(x)$ に収斂する。

さて前回までは 1 次導関数テストと 2 次導関数テストのみであったが、 n 次テストの話に入ろう。関数 $f(x)$ は x_0 を境にごく近い値 x で、 $f(x) - f(x_0)$ の符号が負（正）ならば、 x_0 で大局的極大（極小）になる。関数 $f(x)$ は x_0 で有限で連続的な導関数をもつなら、 $f(x)$ は x_0 でテーラー級数として展開できる。

$$\begin{aligned}
f(x) - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots \\
+ \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(p)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}.
\end{aligned} \tag{7}$$

(7) 式には $n-1$ 個の項があり、この式が正か負かを確かめなければならない。そのためには n をできるだけ小さくするほうが都合がいい。以下で 4 つのケースを考えよう。

- **ケース 1** $f'(x_0) \neq 0, n = 0$
  $f(x) - f(x_0) = \frac{f'(p)}{1!}(x - x_0) = f'(p)(x - x_0)$ であり、 $f'(x_0) \neq 0$ だから $f'(p) \neq 0$ （ $f^{(n)}(x_0)$ と $f^{(n)}(p)$ は同じ符号をもつ）。$(x - x_0)$ は x_0 を境に符号が変わるから大局的極値をもたない。

- **ケース 2** $f'(x_0)=0, f''(x_0)\neq 0, n=1$
  $f(x)-f(x_0)=f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_p)}{2!}(x-x_0)^2=\frac{1}{2}f''(p)(x+x_0)^2$ 。したがって、$f''(X_0)<0(>0)$ ならば $f(x_0)$ は大局的極大（極小）になる。

- **ケース 3** $f'(x_0)=f''(x_0)=0, f'''(x_0)\neq 0, n=2$
  $f(x)-f(x_0)=f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2!}f''(x_0)(x-x_0)^2+\frac{1}{3!}f'''(p)(x-x_0)^3=\frac{1}{6}f'''(p)(x_0^x)^3$ だから、ケース 1 と同様に大局的極値をもたない。

- **ケース 4** $f'(x_0)=f''(x_0)=f'''(x_0)=\cdots=f^{(n-1)}(x_0)=0, f^{(n)}(x_0)\neq 0$
  $f(x)-f(x_0)=\frac{1}{n!}f^{(n)}(p)(x-x_0)^n$ 。 n が偶数ならば $(x-x_0)^n>0(<0)$ で大局的極小（極大）をもつ。

これまでの話から n 次導関数テストは 1 変数関数の大局的極値を調べるためのテストである。関数 $f(x)$ が x_0 において $f'(x_0)=0$ で、非ゼロの n 次導関数 $f^{(n)}(x_0)$ をもち、 n が偶数で $f^{(n)}(x_0)<0(>0)$ ならば $f(x_0)$ は大局的極大（極小）である。ただし n が奇数の場合は変曲点をもち、大局的極値をもたない。たとえば、次の関数で確かめてみよう。

$$
\begin{aligned}
y =& f(x)=(7-x)^4\\
&f'(x)=-4(7-x)^3, \qquad x=7(\text{臨界値})\\
&f''(x)=12(7-x)^2, \qquad f''(7)=0\\
&f'''(x)=-24(7-x), \qquad f'''(7)=0\\
&f^{(4)}=24, \qquad f^{(4)}(7)=24.
\end{aligned}
$$

$n=4$ で $f^{(4)}(7)$ の値は正である。よって関数 $f(x)$ は大局的極小値 0 （停留点は $(7,0)$ ）をもつ。

次回は 2 変数以上の関数の最適化問題を取り扱う。