最適化問題の基礎４

crimsonbach

2004 年 9 月 1 日

前回にて独立変数が 2 つある場合の最適化問題の話しに入った。ここからは独立変数が 2 つある場合の極値に関する説明をしよう。独立変数が 1 つの場合その極値は 2 次元で表現されたが、独立変数が 2 つある場合の極値は 3 次元で表される。関数

$$z = f(x, y).$$

にて極値が存在する必要条件はそれぞれの偏導関数から

$$\begin{aligned} & f_x = f_y = 0 \qquad (1) \\ or \quad & \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial y} = 0. \end{aligned}$$

全微分の視点からは

$$dz = f_x dx + f_y dy = 0.$$

注意が必要だが、 dx と dy は同時に 0 になるとは限らない（ここがポイント）。よって、全微分 $dz = 0$ が成り立つには、(1) 式が成立することで確認できる。偏導関数がそれぞれ 0 であることは、極値のための 1 階条件という。1 階条件が必要条件だから、偏導関数が 0 だけでは極値をとるとは限らないからだ。たとえば、変曲点や鞍点（ある変数から見ると極大だが、別の変数から見ると極小になるところ）などがある。

独立変数が 1 つの場合は関数 $\phi(x)$ にて、 停留点 $\phi(x_0)$ があり 1 階条件 $\phi'(x_0)$ を満たし、かつ 2 階条件 $\phi''(x_0) < 0$ のときはその値が極大値をとるための十分条件だ。しかし独立変数が 2 つ以上の場合は話が違ってくる。dx と dy のいかなる値についても停留点（ $dz = 0$ ）で $d^2z < 0$ が言えれば、その点は頂となるための十分条件で、 $f(x_0, y_0)$ は関数 $z = f(x, y)$ の極値（極大値）になる。つまり両方ともが 0 でない dx と dy のいかなる値に対しても

- $f_{xx} < 0, \quad f_{yy} < 0, \quad f_{xx}f_{yy} > {f_{xy}}^2$ のときのみ、 $d^2z < 0$ つまり極大値である。
- $f_{xx} > 0, \quad f_{yy} > 0, \quad f_{xx}f_{yy} > {f_{xy}}^2$ のときのみ、 $d^2z > 0$ つまり極小値である。

2 階の偏導関数は $f_x = f_y = 0$ の停留点で評価されていることには注意を払おう。上記の 2 階条件で $f_{xx}f_{yy} < {f_{xy}}^2$ となった場合は、それは鞍点である。たとえば、 $z = 8x^3 + 2xy - 3x^2 + y^2 + 1$ の 1 次および 2 次偏導関数は

$$\begin{gathered} f_x = 24x^2 + 2y - 6x, \qquad f_y = 2x + 2y \\ f_{xx} = 48x - 6, \qquad f_{yy} = 2, \qquad f_{xy} = 2. \end{gathered}$$

1 階条件（ $f_x = f_y = 0$ ）から

$$24x^2 + 2y - 6x = 0, \qquad 2y + 2x = 0$$
$$\overline{x}_1 = 0, \quad \overline{x}_2 = \frac{1}{3}, \quad \overline{y}_1 = 0, \quad \overline{y}_2 = -\frac{1}{3}.$$

$(\overline{x}_1, \overline{y}_1) = (0, 0)$ の場合 $f_{xx}, \ f_{yy} < 0$ となって 2 階条件は不成立だから、鞍点だろう。$(\overline{x}_2, \overline{y}_2) = (\frac{1}{3}, -\frac{1}{3})$ の場合 $f_{xx} = 10, \ f_{yy} = f_{xy} = 2$ から 2 階条件が成立し、極値は $\frac{23}{27}$ になる。また別のたとえで関数 $z = x + 2ey - e^x - e^{2y}$ の 1 次および 2 次偏導関数は

$$f_x = 1 - e^x, \qquad f_y = 2e - 2e^{2y}$$
$$f_{xx} = -e^x, \qquad f_{yy} = -4e^{2y}, \qquad f_{xy} = 0$$

1 階条件から

$$1 - e^x = 0, \qquad 2e - 2e^{2y} = 0$$
$$\overline{x} = 0, \qquad \overline{y} = \frac{1}{2}$$
$$f_{xx} = -1, \qquad f_{yy} = -4e, \qquad f_{xy} = 0.$$

2 階条件を検討し、 $\overline{z} = 0 + e - e^0 - e^1 = -1, \quad (\overline{x}, \overline{y}, \overline{z}) = (0, \frac{1}{2}, -1)$ が停留点（極値）になる。

各項が同じ次数をもつ多項式を形式という。たとえば、 $4x - 9y + z$ は 3 変数の 1 次形式、 $4x^2 - xy + 3y^2$ は 2 変数の 2 次形式、 $x^2 + 2xy - yw + 9w^2$ は 3 変数の 2 次形式という。関数 $z = f(x, y)$ の全微分

$$d^2z \equiv d(dz) = \frac{\partial(dz)}{\partial x}dx + \frac{\partial(dz)}{\partial y}dy. \tag{2}$$

も 2 次形式である。この 2 次形式をこのように変換しよう。

$$u \equiv dx, \quad v \equiv dy$$
$$a \equiv f_{xx}, \quad b \equiv f_{yy}, \quad h \equiv f_{xy} \left[= f_{yx}\right].$$

とすると 2 次形式は

$$d^2z = f_{xx}dx^2 + 2f_{xy}dxdy + f_{yy}dy^2.$$

から

$$q = au^2 + 2huv + bv^2. \tag{3}$$

よって、2 次形式 $q < 0 \ or \ q > 0$ のために、 a, b, h にどのような制約を課すべきだろうか。その前にまず以下の言葉を確認しておこう。

$$\text{もし } q \text{ が常に} \left\{ \begin{array}{c} \text{正} > 0 \\ \text{非負} \geq 0 \\ \text{非正} \leq 0 \\ \text{負} < 0 \end{array} \right\} \text{であれば} \left\{ \begin{array}{c} \text{正値定符号} \\ \text{半正値定符号} \\ \text{半負値定符号} \\ \text{負値定符号} \end{array} \right\}. \tag{4}$$

変数の値が変わると q の符号も変わるなら q は不定である。したがって、2 次形式 $q = d^2z$ が正値定符号なら極大に、負値定符号なら極小になる。（3）式において $\frac{h^2}{a}v^2$ を足して引くと

$$\begin{aligned} q &= au^2 + 2huv + \frac{h^2}{a}v^2 + bv^2 - \frac{h^2}{a}v^2 \\ &= a(u^2 + \frac{2h}{a}uv + \frac{b^2}{a^2}v^2) + (b - \frac{h^2}{a})v^2 \\ &= a(u + \frac{h}{a}v)^2 + \frac{ab - h^2}{a}(v^2). \end{aligned} \tag{5}$$

(5) 式からわかるように $\begin{Bmatrix} a > 0 \\ a < 0 \end{Bmatrix}$ で、かつ $ab - h^2 > 0$ のときのみ q は $\begin{Bmatrix} \text{正値定符号} \\ \text{負値定符号} \end{Bmatrix}$ である。また a と b は同じ符号を持たなければならない。

つづいて、このように変形しよう。

$$q = a(u^2) + h(uv) + h(uv) + b(w^2).$$

係数は対称行列で、 a, b は主対角線上に、 h は非対角線上にあり、

$$q = \begin{bmatrix} uv \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & h \\ h & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}. \tag{6}$$

係数行列 $\begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix}$ は 2 次形式 q の判別式（ $|D|$ ）という。q は $\begin{Bmatrix} |a| > 0 \\ |a| < 0 \end{Bmatrix}$ で、かつ $\begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix} > 0$ のときのみ $\begin{Bmatrix} \text{正値定符号} \\ \text{負値定符号} \end{Bmatrix}$ になる。行列式 $|a| = a$ は $|D|$ の部分行列となり、 $|D|$ の第 1 首座小行列式という。同様に、行列式 $\begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix}$ も $|D|$ の部分行列式で、 $|D|$ の第 2 首座小行列式という。全微分の側からは $\begin{Bmatrix} f_{xx} > 0 \\ f_{xx} < 0 \end{Bmatrix}$ で、かつ $\begin{vmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{vmatrix} = f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2 > 0$ のときのみ d^2z は $\begin{Bmatrix} \text{正値定符号} \\ \text{負値定符号} \end{Bmatrix}$ 一般的には、2 次形式

$$q = au^2 + 2huv + bv^2.$$

の判別式は対称行列 $\begin{vmatrix} a & h \\ h & b \end{vmatrix}$ になる。2 次形式

$$d^2z = f_{xx}dx^2 + 2f_{xy}dxdy + f_{yy}dy^2.$$

の判別式は 2 階の偏導関数を要素とする行列式であり、ヘッセの行列式あるいはヘシアンという。ヘシアンは

$$\left|H\right| = \begin{vmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{vmatrix}. \tag{7}$$

で、ヤングの定理（$f_{xy} = f_{yx}$ ）から対称である。たとえば、2 次形式 $q = 5u^2 + 3uw + 2w^2$ を考えよう。q の判別式は $\begin{vmatrix} 5 & 1.5 \\ 1.5 & 2 \end{vmatrix}$ で、首座小行列式は $5 > 0$ と、 $\begin{vmatrix} 5 & 1.5 \\ 1.5 & 2 \end{vmatrix} = 7.75 > 0$ だから q は正値定符号になる。つぎの例に入ろう。関数 $z = f(x, y)$ の 2 次偏導関数が

$$f_{xx} = -2, \quad f_{xy} = 1, \quad f_{yy} = -1.$$

2 次形式 d^2z の判別式は $\begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix}$ 、首座小行列は $-2 < 0$ と $1 > 0$ から d^2z は負値定符号だ。

次回は 3 変数の 2 次形式の話に入るが、今までとノートのやり方はかえる。