最適化数学　講義ノート　(担当: 関口 良行)

1　凸関数

二次関数 $f(x) = x^2$ は最小解を求めるのが楽であった．これは二次関数だけではなく, 同様の形をした凸関数にも当てはまる．最適化では凸性は大事な概念である．

定義 (凸関数)**.** $0 < \lambda < 1$ を満たす任意の λ と任意の $u, v \in \mathbb{R}^n$ に対して,

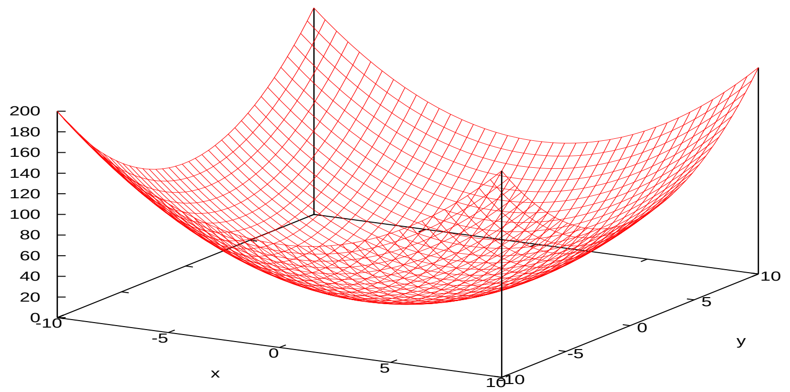
$$f((1-\lambda)u + \lambda v) \leq (1-\lambda)f(u) + \lambda f(v)$$

が成り立つとき, f を**凸関数**と呼ぶ．等号が成り立つのが $u = v$ のときに限るとき f を**狭義凸関数**と呼ぶ.

注意. 凸関数は, 高校数学では関数が下に凸であるという表現で習った.

例 1. 例えば, $x^2, e^x, |x|$ は凸関数である．一方, $x^{-1}, -\log x$ は $x > 0$ の部分にだけ制限すれば凸関数になる．このように定義域をある部分集合 D に制限すれば f が凸になるとき, f **は** D **上で凸である**と言う.

$\mathbb{R}^2$ の場合に凸関数がどのような形をしているか考えてみよう．下に凸関数 x^2+y^2 のグラフを示す.



定義中, $(1-\lambda)u + \lambda v$ は u, v を結ぶ線分の内分点を表している．関数が凸であるというのは, 点 $(x, f(x))$ と $(y, f(y))$ を結んだ線分が常に f のグラフの上にあることを表す.

$(u, f(u))$ における f のグラフに対する接平面は,

$$f(u) + f_x(u)(x_2 - x_1) + f_y(u)(y_2 - y_1)$$

となる．凸関数のグラフの形より, 以下が成り立つことがわかる:

連続微分可能な関数 $f\colon R^2 \to R$ が凸ならば, 任意の $u=(x_1,y_1), v=(x_2,y_2) \in R^2$ に対して,

$$f(v) \geq f(u) + f_x(u)(x_2-x_1) + f_y(u)(y_2-y_1)$$

が成り立つ.

これは一般に n 変数関数に対しても成り立つ. 次の記号を導入する.

定義. 連続微分可能な関数 $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ と $u=(x_1,\dots,x_n)$ に対して,

$$\nabla f(u) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(u), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(u)\right)$$

を f の u における**勾配ベクトル**と呼ぶ.

例. $f(x,y)=x^2+3y^2$ のとき, (a,b) における勾配ベクトルは, $f_x=2x$, $f_y=6y$ より,

$$\nabla f(a,b) = (f_x(a), f_y(b)) = (2a, 6b)$$

となる.

命題 1. $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ が凸ならば, 任意の u,v に対して,

$$f(v) \geq f(u) + \nabla f(u)(v-u)$$

が成り立つ. ここで, $f(u)(v-u)$ はベクトル $f(u)$ と $(v-u)$ の内積を表す.

Proof. $u,v \in \mathbb{R}^n$, $0<\lambda<1$ とする. 関数 f のテーラー展開より,

$$f((1-\lambda)u+\lambda v) = f(u+\lambda(v-u)) = f(u) + \nabla f(u)(\lambda(u-v)) + o(\lambda\|u-v\|)$$

となる. 凸関数の定義より, $f((1-\lambda)u+\lambda v) \leq (1-\lambda)f(u)+\lambda f(v)$ なので,

$$\begin{aligned}(1-\lambda)f(u)+\lambda f(v) &\geq f(u) + \lambda\nabla f(u)(u-v) + o(\lambda\|u-v\|)\\ \lambda f(v) &\geq \lambda f(u) + \lambda\nabla f(u)(u-v) + o(\lambda\|u-v\|)\\ f(v) &\geq f(u) + \nabla f(u)(u-v) + \frac{o(\lambda\|u-v\|)}{\lambda}\end{aligned}$$

となる. $\lambda \to 0$ とすると, $\frac{o(\lambda\|u-v\|)}{\lambda} \to 0$ となるので, 命題の不等式は示された. □

1.1 凸関数の性質

1 変数関数 h に対しては, 以下のような性質が成り立つ.

h が凸関数

$\Leftrightarrow$ すべての $t \in R$ で, $h'(t)$ が非減少 $(t_1 < t_2 \ \Rightarrow \ h'(t_1) \leq h'(t_2))$

$\Leftrightarrow$ すべての $t \in R$ で, $h''(t) \geq 0$

関数 $J(x) = x^2$ は実際に $J'(x) = 2x$, $J''(x) = 2$ なので, 上記の性質を満たすことがわかる.

このような性質は多変数の場合でも成り立つ. 一階微分は多変数の場合, 勾配ベクトルが対応するが, 二階微分はヘッセ行列が対応する.

定義. 2 変数関数 $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ と $u \in \mathbb{R}^n$ に対して,

$$\nabla^2 f(u) = \begin{bmatrix} f_{xx}(u) & f_{xy}(u) \\ f_{yx}(u) & f_{yy}(u) \end{bmatrix}$$

を**ヘッセ行列**と呼ぶ. 例えば, $f(x,y) = x^3 + 2xy + 3y^2$ とすると, 勾配ベクトルは $\nabla f(x,y) = (3x^2 + 2y, 2x + 6y)$ で, ヘッセ行列は,

$$\nabla^2 f(x,y) = \begin{bmatrix} 6x & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}$$

となる.

一般の n 変数関数に対しては, ヘッセ行列は

$$\nabla^2 f(u) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1}(u) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(u) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(u) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(u) & \ddots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(u) & \cdots & & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n}(u) \end{bmatrix}$$

と定義される.

ここで, 行列の言葉を用意する.

定義. 行列 A とベクトル $v = (v_1, v_2, \ldots, v_n)$ に対して, 以下で定まる変数 $v_1, \ldots, v_n$ の 2 次式

$$v^T A v$$

を 2 次形式と呼ぶ.

例 2. $A = \left[\begin{smallmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}\right]$ のとすると,

$$v^T A v = [\ v_1\ v_2\ ] \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 2v_1^2 + v_2^2$$

は 2 次形式である. 一方, $B = \left[\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{smallmatrix}\right]$ とすると,

$$v^T B v = [\ v_1\ v_2\ ] \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = v_1^2 + 2v_1 v_2 - v_2^2$$

は 2 次形式である.

定義. A を実数成分を持つ対称行列とする.

- すべての $v \in R^n$ に対して, $v^T Av \geq 0$ が成り立つとき, A を**半正定値行列**と呼ぶ. また, 逆の不等号が成り立つとき, A を**半負定値行列**と呼ぶ.
- $v \neq 0$ を満たすすべての $v \in R^2$ に対して, $v^T Av > 0$ が成り立つとき, A を**正定値行列**と呼ぶ. 逆の不等号が成り立つとき, A を**負定値行列**と呼ぶ.
- $v \in R^2$ によって $v^T Av$ の符号が正にも負にもなるとき, A を**不定**と言う.

例 3. $A = \left[\begin{smallmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}\right]$ のとする. 任意の $v = (v_1, v_2) \in \mathbb{R}^2$ に対して, $v^T Av = 2v_1^2 + v_2^2$ となるので A は正定値である. 一方, $B = \left[\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{smallmatrix}\right]$ とすると, $v^T Bv = v_1^2 + 2v_1v_2 - v_2^2$ となるので, 不定である.

命題 2. 連続微分可能な関数 $f \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して以下が成り立つ*;*

- f が凸関数 $\iff$ 任意の $u \in \mathbb{R}^n$ に対して, ヘッセ行列 $\nabla^2 f(u)$ が半正定値である*.*
- f が狭義凸関数 $\Longleftarrow$ 任意の $u \in \mathbb{R}^n$ に対して, ヘッセ行列 $\nabla^2 f(u)$ が正定値である*.*

解説. $a, b \in \mathbb{R}^n$ に対して, $h(\lambda) = f((1-\lambda)a + \lambda b)$ とおく. すると「f が凸 $\Leftrightarrow$ 任意の $a, b \in \mathbb{R}^n$ に対して h が凸」が成り立つ. また, h は一変数関数なので, 「h が凸 $\Leftrightarrow$ $h''(\lambda) \geq 0$」が成り立つ. ここで, $u = (1-\lambda)a + \lambda b$ と $v = b - a$ に対して, $h''(\lambda) = v^T \nabla^2 f(u) v$ となる. これより命題が導かれる. □

1.2 正値性の調べ方

さて, 関数のヘッセ行列が任意の点で半正定値であれば, その関数は凸になることが分かった. それでは, 行列が半正定値であるとはどのように調べたらよいだろうか?

1.2.1 固有値を用いた判定法

それには行列の理論による以下のような定理が有用である. ある数 a が非負であるとは, $a \geq 0$ であることを表し, ある数が正であるとは $a > 0$ であることを表す.

定理 3. A を実対称行列とする. 以下の主張が成り立つ*:*

(1). A が半正定値 (半負定値) $\Leftrightarrow$ A の固有値がすべて非負 (非正)

(2). A が正定値 (負定値) $\Leftrightarrow$ A の固有値がすべて正 (負)

(3). A が不定 $\Leftrightarrow$ A が正と負の固有値を持つ

解説. A は実対称行列なので, ある直交行列 P ($P^TP=E$) が存在して, $P^{-1}AP=\Lambda$ と対角化できる. ここで, Λ は A の固有値を対角要素に持つ対角行列である. すると, $P^{-1}=P^T$ なので, $u=P^Tv$ と変数変換すると,

$$v^TAv=(Pu)^TA(Pu)=u^T(P^TAP)u=u^T\Lambda u=\lambda_1u_1^2+\cdots+\lambda_nu_n^2$$

となる. ここで, $u=(u_1,\ldots,u_n)$, λ_i は A の固有値である. これより上の主張が導かれる. □

例 4. $f(x,y)=3x^2-2xy+3y^2$ とする. $\nabla f(x,y)=(6x+2y,2x+6y)$, $\nabla^2 f(x,y)=\left[\begin{smallmatrix}6&2\\2&6\end{smallmatrix}\right]$ となる. ヘッセ行列は定数行列であり, この固有値は $4,8$ になる. よって, ヘッセ行列は正定値で, f は狭義凸関数である.

1.2.2 行列式を用いた判定法

2×2 行列であれば, 以下のように行列式を用いて判定できることがわかる.

実対称行列を $A=\begin{bmatrix}a&b\\b&d\end{bmatrix}$ とし, $a\neq 0$ とする. 任意の $(x,y)\in R^2$ に対して,

$$\begin{bmatrix}x&y\end{bmatrix}A\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}=ax^2+2bxy+dy^2=a\left(x+\frac{by}{a}\right)^2+\frac{y^2}{a}(ad-b^2)=a\left(x+\frac{by}{a}\right)^2+\frac{y^2}{a}\begin{vmatrix}a&b\\b&d\end{vmatrix}$$

となる ($\begin{vmatrix}a&b\\b&d\end{vmatrix}$ は A の行列式 $|A|$ を表す). この式より,

命題 4.

(1). $a>0$, $|A|>0\Rightarrow A$ は正定値

(2). $a<0$, $|A|>0\Rightarrow A$ は負定値

(3). $|A|<0\Rightarrow A$ は不定

解説. (1), (2) は命題の前の式から証明できる. (3) については, 線形代数で学んだように, 行列式の値は固有値の積と等しい (λ_1,λ_2 を固有値とすると, $|A|=\lambda_1\lambda_2$). よって, 2×2 行列の場合, 行列式が負ということは, 二つある固有値の符号が異なるということである. □

例 5. 例 4 のヘッセ行列 $\nabla^2 f(x,y)=\left[\begin{smallmatrix}6&2\\2&6\end{smallmatrix}\right]$ の正値性を行列式を用いて調べる. $f_{xx}(x,y)=6>0$, $|\nabla^2 f(x,y)|=32>0$ なのでヘッセ行列は正定値である.