最適化数学 第 2 回

[今回の項目]

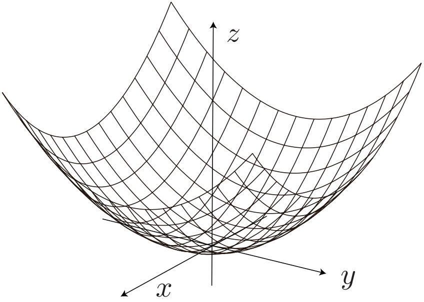
1. 数学的準備：多変数関数
2. 凸関数の性質
3. 凸関数の判定（ヘッセ行列）
4. 行列の正値性

多変数関数

$$f(x, y) = x^2 + y^2$$

いくつかの (x, y) において関数がどのような値をとるか調べると，右のようになる．

$x \setminus y$	-2	-1	0	1	2
-2	8	5	4	5	8
-1	5	2	1	2	5
0	4	1	0	1	4
1	5	2	1	2	5
2	8	5	4	5	8



次に，関数の値を幾何的にとらえるために

$$z = x^2 + y^2$$

とおく．この関数のグラフを xyz 空間に描くと, 左図のようになる.

等高線

$f(x, y) = x^2 + y^2$ で，同じ値をとる点 (x, y) からなる曲線を**等高線**と呼ぶ.

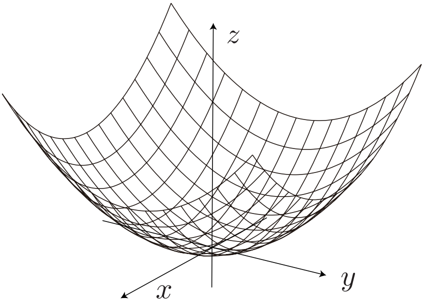


Figure: $z = f(x, y)$ のグラフ

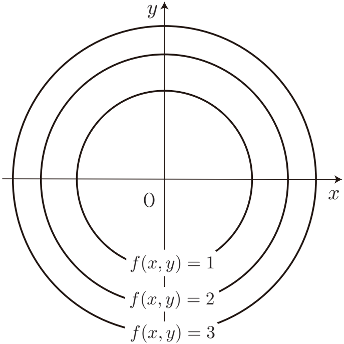
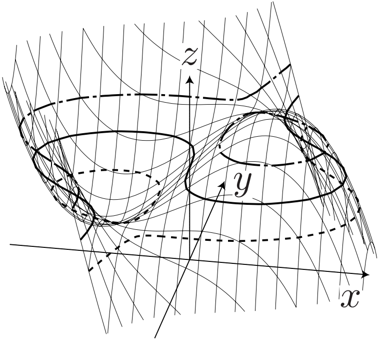


Figure: $z = x^2 + y^2$ の等高線

等高線

参考に $f(x,y) = -x^3 - 3xy^2 + y^3 + 3x$ のグラフと等高線も挙げておこう.



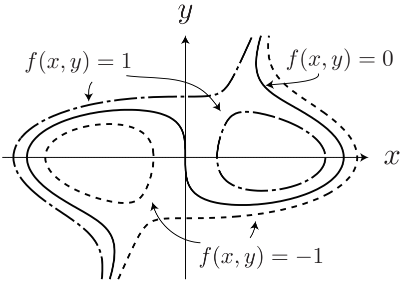


Figure: $f(x,y) = -x^3 - 3xy^2 + y^3 + 3x$ のグラフと等高線

凸関数

　一般には 2 次関数のように下に凸な関数は，最小値を求めることが比較的楽である．下に凸な関数は，最適化問題においては単に凸関数と呼ばる．

　最適化の世界では，「凸である」か「凸でない」かが問題の分かれ目になる．凸関数は扱いやすいだけでなく，応用上も頻繁に現れる関数である．

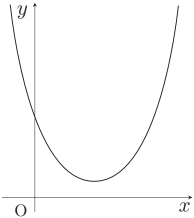
凸関数の定義

[定義]

f を n 変数関数とする．$0 < \lambda < 1$ を満たすすべての λ とすべての $u, v \in \mathbb{R}^n$ に対して，

$$\text{凸関数}: f((1-\lambda)u + \lambda v) \leq (1-\lambda)f(u) + \lambda f(v)$$

$$\text{狭義凸関数}: f((1-\lambda)u + \lambda v) < (1-\lambda)f(u) + \lambda f(v) \quad (u \neq v)$$



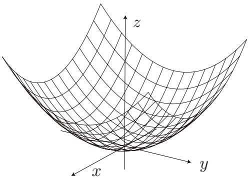


Figure: 凸関数の例 左が 1 変数凸関数，右が 2 変数凸関数

定義の解説：狭義凸関数

説明がやさしい順に，はじめに狭義凸関数について解説する．
定義式

$$
\begin{aligned}
&f((1-\lambda)u+\lambda v) \\
&\quad < (1-\lambda)f(u)+\lambda f(v) \\
&\qquad (u \neq v)
\end{aligned}
$$

は，

「f が狭義凸関数」
$\Updownarrow$
「点 $(u, f(u))$ と $(v, f(v))$
を結んだ線分が，
f グラフより上部にある」

ということを表す．

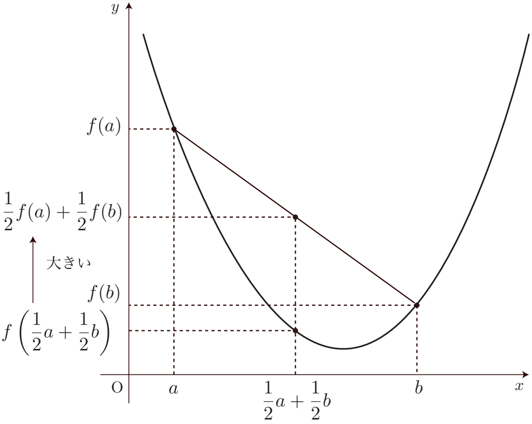


Figure: 狭義凸関数に対して，定義式で $\lambda = \frac{1}{2}$ とした場合

定義の解説：凸関数

次に，凸関数について考えよう．
狭義凸関数と違い凸関数では

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

と等号も許されている．これは

「f が凸関数」
$\Updownarrow$
「点 $(u, f(u))$ と $(v, f(v))$ を結んだ
線分が，f のグラフ上，またはグラフより上部にある」

ということを表している．

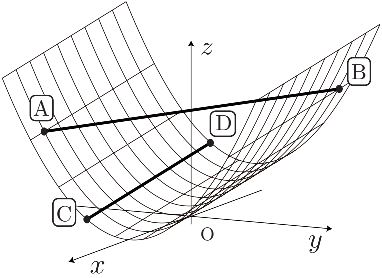


Figure: 狭義凸関数でない凸関数の例

2 変数凸関数と接平面

2 変数関数 f の点 $(x, y, z) = (a, b, f(a, b))$ における接平面：

$$z = \boxed{}$$

2 変数凸関数と接平面

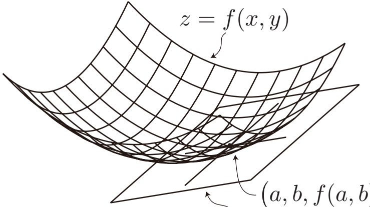
2 変数関数 f の点 $(a, b, f(a, b))$ における接平面：

$$z = f(a, b) + f_x(a, b)(x - a) + f_y(a, b)(y - b)$$

2 変数関数 f が凸ならば,

$$f(x, y) \geq f(a, b) + f_x(a, b)(x - a) + f_y(a, b)(y - b)$$

が成り立つ.



準備：勾配ベクトル

［定義］(勾配ベクトル)

2 変数関数 f の場合：　$\nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} f_x(x,y) \\ f_y(x,y) \end{bmatrix}$

n 変数関数 f の場合：　$\nabla f(u) = \begin{bmatrix} f_{x_1}(u) \\ \vdots \\ f_{x_n}(u) \end{bmatrix}$

Example

$f(x,y) = x^2 + 3y^2$ とすると，点 $(5,3)$ における勾配ベクトルは，

$$\nabla f(5,3) = \begin{bmatrix} \quad \\ \quad \end{bmatrix}$$

となる．

準備：勾配ベクトル

［定義］ (勾配ベクトル)

2 変数関数 f の場合： $\nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} f_x(x,y) \\ f_y(x,y) \end{bmatrix}$

n 変数関数 f の場合： $\nabla f(u) = \begin{bmatrix} f_{x_1}(u) \\ \vdots \\ f_{x_n}(u) \end{bmatrix}$

Example

$f(x,y) = x^2 + 3y^2$ とすると，点 $(5,3)$ における勾配ベクトルは，
$f_x = 2x$，$f_y = 6y$ より，

$$\nabla f(5,3) = \begin{bmatrix} f_x(5,3) \\ f_y(5,3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \cdot 5 \\ 6 \cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 18 \end{bmatrix}$$

となる.

n 変数凸関数と接平面

[命題]

n 変数関数 f に対して，以下が成り立つ：

f が凸関数

$\iff f(v) \geq f(u) + \nabla f(u) \cdot (v-u)$ (すべての $u, v \in \mathbb{R}^n$)

Proof.

テイラーの定理を用いる．詳しくは教科書． □

- 勾配ベクトル： $\nabla f(u) = \begin{bmatrix} f_{x_1}(u) \\ \vdots \\ f_{x_n}(u) \end{bmatrix}$
- $\nabla f(u) \cdot (v-u)$ はベクトル $\nabla f(u)$ と $(v-u)$ の内積を表す.

凸関数の判定

関数が凸かどうかを，関数の微分を用いて判定することができる．

凸関数の判定（1 変数関数）

関数 $f(x) = x^2$ はグラフより，凸関数．それでは，次の関数は？

$$f(x) = \sqrt{1 + x^2}$$

［定理］

1 変数関数 h に対して，以下が成り立つ：

h が凸関数 $\Leftrightarrow$ すべての $t \in \mathbb{R}$ に対して $\boxed{}$

凸関数の判定（1 変数関数）

関数 $f(x) = x^2$ はグラフより，凸関数．それでは，次の関数は？

$$f(x) = \sqrt{1 + x^2}$$

[定理]

1 変数関数 h に対して，以下が成り立つ：

$$h \text{ が凸関数} \Leftrightarrow \text{すべての } t \in \mathbb{R} \text{ に対して } h''(t) \geq 0$$

Proof.

テイラーの定理より．（直感的には，増減表より） □

$f'(x) = \dfrac{x}{\sqrt{1+x^2}}$，$f''(x) = \dfrac{1}{(1+x^2)^{\frac{3}{2}}}$ より，すべての x に対して $f''(x) > 0$ となるので，定理より，$f(x)$ は凸関数である．

多変数の場合：ヘッセ行列

次に，2 変数関数

$$g(x, y) = x^2 + 2xy + 2y^2$$

は凸関数か？ 多変数関数の 2 階微分は，ヘッセ行列に対応する．

［定義］

2 変数関数に対して，ヘッセ行列 $\nabla^2 f(x, y) = \begin{bmatrix} f_{xx}(x, y) & f_{xy}(x, y) \\ f_{yx}(x, y) & f_{yy}(x, y) \end{bmatrix}$

Example

$f(x,y) = x^3 + 2xy + 3y^2$ とすると,

$$\text{勾配ベクトル}\ \nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} \qquad\qquad \\ \qquad\qquad \end{bmatrix},$$

$$\text{ヘッセ行列}\ \nabla^2 f(x,y) = \begin{bmatrix} \qquad & \qquad \\ \qquad & \qquad \end{bmatrix}$$

Example

$f(x,y) = x^3 + 2xy + 3y^2$ とすると,

$$勾配ベクトル\ \nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} 3x^2 + 2y \\ 2x + 6y \end{bmatrix},$$

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

一般の n 変数関数 f と $u = (x_1, \ldots, x_n)$ に対しては,

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

ヘッセ行列による凸性の判定

[定理]

1. f が凸関数 $\iff$ 各点 $a \in \mathbb{R}^n$ で,
$$ {}^t u \nabla^2 f(a) u \geq 0 \text{ (すべてのベクトル } u \in \mathbb{R}^n). $$
2. f が狭義凸関数 $\Longleftarrow$ 各点 $a \in \mathbb{R}^n$ で,
$$ {}^t u \nabla^2 f(a) u > 0 \text{ (} u \neq 0 \text{ となるすべてのベクトル } u \in \mathbb{R}^n). $$

Proof.

$b, c \in \mathbb{R}^n$ に対して, $h(t) = f\left((1-t)b + tc\right)$, $a = (1-t)b + tc$ とおく. すると

$$ \begin{aligned} f \text{ が凸 } &\iff \text{すべての } b, c \in \mathbb{R}^n \text{ に対して } h(t) \text{ が凸} \\ &\iff \text{すべての } b, c \in \mathbb{R}^n,\ t \in \mathbb{R} \text{ に対して } \frac{d^2}{dt^2} h(t) \geq 0 \end{aligned} $$

が成り立つ. ここで, 合成関数の微分より, $\frac{d^2}{dt^2} h(t) = {}^t u \nabla^2 f(a) u$ となる. $\square$

Example

$f(x,y) = x^2 - 2xy + 2y^2$ とすると，勾配ベクトルとヘッセ行列は

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

となる．定理を用いて f が凸関数かどうか調べよう．$u = {}^t(u_1, u_2)$ とすると，各点 (x,y) で，

$${}^t u \nabla f(x,y) u = [\quad\quad] \begin{bmatrix} \quad & \quad \\ \quad & \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \quad \\ \quad \end{bmatrix} = 2u_1^2 - 4u_1u_2 + 4u_2^2$$

となる．さらに，すべてのベクトル u に対して

$$2u_1^2 - 4u_1u_2 + 4u_2^2 = 2(u_1^2 - 2u_1u_2 + 2u_2^2) = 2\left\{(u_1 - u_2)^2 + u_2^2\right\} \geq 0$$

となるので，定理より f は凸関数である．

Example

$f(x,y) = x^2 - 2xy + 2y^2$ とすると，勾配ベクトルとヘッセ行列は

$$\nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} 2x - 2y \\ -2x + 4y \end{bmatrix}, \quad \nabla^2 f(x,y) = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}$$

となる．定理を用いて f が凸関数かどうか調べよう．$u = {}^t(u_1, u_2)$ とすると，各点 (x,y) で，

$${}^t u \nabla f(x,y) u = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = 2u_1^2 - 4u_1u_2 + 4u_2^2$$

となる．さらに，すべてのベクトル u に対して

$$2u_1^2 - 4u_1u_2 + 4u_2^2 = 2(u_1^2 - 2u_1u_2 + 2u_2^2) = 2\left\{(u_1 - u_2)^2 + u_2^2\right\} \geq 0$$

となるので，定理より f は凸関数である．

線形代数を用いた凸関数の判定

線形代数を用いると，計算により関数の凸性を判定することが出来る．

線形代数：行列と 2 次形式

Definition

行列 A とベクトル $u = (u_1, u_2, \ldots, u_n)$ に対して，$u_1, \ldots, u_n$ を変数に持つ多項式

$$p(u) = {}^t u A u$$

を 2 **次形式** と呼ぶ.

Example

行列 $A = \left[\begin{smallmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}\right], B = \left[\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{smallmatrix}\right]$ に対して $u = (x, y)$ とすると,

$$(1) \quad {}^t u A u = [\qquad] \begin{bmatrix} \quad & \quad \\ \quad & \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \quad \\ \quad \end{bmatrix} = [\qquad] \begin{bmatrix} \quad \\ \quad \end{bmatrix} = 2x^2 + y^2$$

$$(2) \quad {}^t u B u = [\qquad] \begin{bmatrix} \quad & \quad \\ \quad & \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \quad \\ \quad \end{bmatrix} = [\qquad] \begin{bmatrix} \quad \\ \quad \end{bmatrix}$$

$$= x^2 + xy + yx - y^2 = x^2 + 2xy - y^2$$

は 2 次形式である.

線形代数：行列と 2 次形式

Definition

行列 A とベクトル $u=(u_1,u_2,\dots,u_n)$ に対して，$u_1,\dots,u_n$ を変数に持つ多項式

$$p(u) = {}^t uAu$$

を 2 **次形式** と呼ぶ.

Example

行列 $A=\left[\begin{smallmatrix}2&0\\0&1\end{smallmatrix}\right], B=\left[\begin{smallmatrix}1&1\\1&-1\end{smallmatrix}\right]$ に対して $u=(x,y)$ とすると，

$$\begin{aligned}
(1)\quad {}^t uAu &= \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&0\\0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix}\begin{bmatrix}2x\\y\end{bmatrix} = 2x^2+y^2 \\
(2)\quad {}^t uBu &= \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1\\1&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix}\begin{bmatrix}x+y\\x-y\end{bmatrix} \\
&= x^2+xy+yx-y^2 = x^2+2xy-y^2
\end{aligned}$$

は 2 次形式である.

線形代数：行列の正値性

[定義]

行列 A を対称行列とし，2 次形式 ${}^t u A u$ を考える．

- A は $\boxed{\qquad\qquad}$ $\iff$ $\boxed{\qquad\qquad}$ (すべての $u \in \mathbb{R}^n$)

  また，逆の不等号が成り立つとき，A を **半負定値** という．

- A は $\boxed{\qquad\qquad}$ $\iff$ $\boxed{\qquad\qquad}$ (すべての $u \neq \mathbf{0}$)

  逆の不等号が成り立つとき，A を **負定値** という．

- A は $\boxed{\qquad\qquad}$ $\iff$ $u \in \mathbb{R}^n$ によって $\boxed{\qquad\qquad}$ の符号が正にも負にもなる．

線形代数：行列の正値性

[定義]

行列 A を対称行列とし，2 次形式 ${}^t uAu$ を考える．

- A は **半正定値** $\iff {}^t uAu \geq 0$ (すべての $u \in \mathbb{R}^n$)

  また，逆の不等号が成り立つとき，A を **半負定値** という．
- A は **正定値** $\iff {}^t uAu > 0$ (すべての $u \neq \mathbf{0}$)

  逆の不等号が成り立つとき，A を **負定値** という．
- A は **不定** $\iff u \in \mathbb{R}^n$ によって ${}^t uAu$ の符号が正にも負にもなる．

Example

行列 $A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ の正値性を調べてみよう．$u = (x, y)$ とすると，2 次形式は

$$ {}^t u A v = \boxed{\qquad\qquad} $$

となる．ここで，$\boxed{\qquad\qquad}$ (すべての $u \neq 0$) となるので，A は正定値である．

一方，行列 $B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ に対して，2 次形式は

$$ {}^t u B u = \boxed{\qquad\qquad} $$

となる．ここで，

1. $u = (1, 0)$ とすると ${}^t u B u = \boxed{\quad}$ となるが，
2. $u = (0, 1)$ とすると ${}^t u B u = \boxed{\quad}$ となるので，

B は不定である．

Example

行列 $A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ の正値性を調べてみよう．$u = (x, y)$ とすると，2 次形式は

$$^t uAv = 2x^2 + y^2$$

となる．ここで，$2x^2 + y^2 > 0$ $(u \neq 0)$ となるので，A は正定値である．

一方，行列 $B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ に対して，2 次形式は

$$^t uBu = x^2 + 2xy - y^2$$

となる．ここで，

1. $u = (1, 0)$ とすると $^t uBu = 1 > 0$ となるが，
2. $u = (0, 1)$ とすると $^t uBu = -1 < 0$ となるので，

B は不定である．

［定理］ (前出の定理の言い換え)

関数 f に対して以下が成り立つ：

- f が凸関数
  $\iff$ 各点 $a \in \mathbb{R}^n$ で，ヘッセ行列 $\nabla^2 f(a)$ が $\boxed{}$ である．
- f が狭義凸関数
  $\Longleftarrow$ 各点 $a \in \mathbb{R}^n$ で，ヘッセ行列 $\nabla^2 f(a)$ が $\boxed{}$ である．

以下で説明するように，固有値または行列式を調べることで，行列の正値性を判定することができる！

［定理］ (前出の定理の言い換え)

関数 f に対して以下が成り立つ：

- f が凸関数
  $\Longleftrightarrow$ 各点 $a \in \mathbb{R}^n$ において，ヘッセ行列 $\nabla^2 f(a)$ が半正定値である．
- f が狭義凸関数
  $\Longleftarrow$ 各点 $a \in \mathbb{R}^n$ において，ヘッセ行列 $\nabla^2 f(a)$ が正定値である．

以下で説明するように，固有値または行列式を調べることで，行列の正値性を判定することができる！

正定値行列と固有値

[定理]

A を対称行列とする．以下の主張が成り立つ．

1. A が半正定値 $\Longleftrightarrow$ A の固有値が $\boxed{}$
2. A が正定値 $\Longleftrightarrow$ A の固有値が $\boxed{}$
3. A が不定 $\Longleftrightarrow$ A が $\boxed{}$ の固有値を持つ

Proof.

対称行列は，直交行列で対角化できるという性質を用いる．□

Example

$f(x,y) = 3x^2 - 2xy + 3y^2$ とすると，

$\nabla f(x,y) = \begin{bmatrix} \\ \end{bmatrix}$, $\nabla^2 f(x,y) = \begin{bmatrix} \\ \end{bmatrix}$ となる．ヘッセ行列は定数行列であり，この固有値は $\boxed{}$ になる．定理より，ヘッセ行列は $\boxed{}$ で，f は狭義凸関数である．

正定値行列と固有値

[定理]

A を対称行列とする．以下の主張が成り立つ．

1. A が半正定値 $\Longleftrightarrow$ A の固有値 がすべて 0 以上
2. A が正定値 $\Longleftrightarrow$ A の固有値がすべて正
3. A が不定 $\Longleftrightarrow$ A が正と負の固有値を持つ

Proof.

対称行列は，直交行列で対角化できるという性質を用いる． □

Example

$f(x,y)=3x^2-2xy+3y^2$ とすると，

$\nabla f(x,y)=\begin{bmatrix}6x-2y\\2x-6y\end{bmatrix},\quad \nabla^2 f(x,y)=\begin{bmatrix}6&-2\\-2&6\end{bmatrix}$ 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．定理より，ヘッセ行列は正定値で，f は狭義凸関数である．

正定値行列と行列式

［定理］ (特殊例：2×2 行列)

A を 2×2 行列とする．

1. $\quad\quad\quad\quad \Leftrightarrow A$ は正定値
2. $\quad\quad\quad\quad \Leftrightarrow A$ は負定値
3. $\quad\quad \Leftrightarrow A$ は不定

Proof.

A の成分を文字でおいてから，2 次形式を展開し，平方完成する．後は，（行列式）＝（固有値）の積を用いて場合分け． □

Example

$f(x,y) = 3x^2 - 2xy + 3y^2$ のヘッセ行列の $\nabla^2 f(x,y) = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}$ の正値性を行列式を用いて調べると，$|\nabla^2 f(x,y)| = \boxed{\quad}$ かつ $f_{xx}(x,y) = \boxed{\quad}$ なので，ヘッセ行列は正定値である．

正定値行列と行列式

［定理］ (特殊例：2×2 行列)

A を 2×2 行列とする．

1. $|A| > 0$ かつ $a > 0 \Leftrightarrow A$ は正定値
2. $|A| > 0$ かつ $a < 0 \Leftrightarrow A$ は負定値
3. $|A| < 0 \Leftrightarrow A$ は不定

Proof.

A の成分を文字でおいてから，2 次形式を展開し，平方完成する．後は，（行列式）＝（固有値）の積を用いて場合分け． □

Example

$f(x,y) = 3x^2 - 2xy + 3y^2$ のヘッセ行列の $\nabla^2 f(x,y) = \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 6 \end{bmatrix}$ 正値性を行列式を用いて調べると，$|\nabla^2 f(x,y)| = 32 > 0$ かつ $f_{xx}(x,y) = 6 > 0$ なので，ヘッセ行列は正定値である．

[練習問題]

以下の関数の勾配ベクトルとヘッセ行列を求め，凸関数かどうか調べよ．

(1). $f(x,y) = x^2 + xy + y^2$　(2). $f(x,y) = 2x^2 + 4xy + y^2$
(3). $f(x,y) = x^2 + xy + y^3$　(4). $f(x,y) = \sqrt{1 + x^2 + y^2}$
(5). $f(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - xy - yz - zx$