白井ゼミ資料　2017-05-30

最適化数学2章まとめ
2.1　1次関数と2次関数

・n 変数の 1次関数 $f(x_1,\ldots,x_n)=a_1x_1+\ldots+a_nx_n+c$ の勾配(グラディエント) $\boldsymbol{n}$ =

定理 2.1　1 次関数の等値面は　　　　であり、どの関数値に対する等値面も互いに

　　　である。そして勾配は等値面に

・2次関数の平行移動: 2次関数は平行移動によって　　　　　　　　と定数のみで表すことが可能

例:　次の2次関数を平行移動によって上記を満たすようにせよ:

$$f(x_1,\ldots,x_n)=\frac{1}{2}\Sigma_{i,j=1}^n h_{ij}x_ix_j+\Sigma_{i=1}^n a_ix_i+c$$

行列 $\boldsymbol{H}$ とベクトル $\boldsymbol{a},\boldsymbol{x}$ を次のように定義すれば、

これは次のように書ける: $f(\mathbf{x})=\frac{1}{2}(\mathbf{x},\mathbf{Hx})+(\mathbf{a},\mathbf{x})+c$

行列 $\boldsymbol{H}$ が対称行列であることを用いて、　　　　　　　を満たすベクトルpを求めれば、

$$f(\mathbf{x}-\mathbf{p})=\frac{1}{2}(\mathbf{x},\mathbf{Hx})-\frac{1}{2}(\mathbf{p},\mathbf{a})+c$$

と表される

2.2　2次関数の極値

2 変数の2次関数 $f(x,y)=\frac{1}{2}(ax^2+2bxy+cy^2)$ を考える(a=b=c=0 ではないとする)

(1) a>0, b=0, c>0 のときは　　　　型,　　　で最小値を取る
(2) a=b=0 のときは　　　　　型、　　　軸に沿って関数値が一定
(3) ac<0, b=0 のときは　　　　　型、ある方向に沿って最大値、別な方向に沿って最小値をとる
　　そのような点を　　　　　という

(4) b≠0 の場合:

ベクトルと行列 $\boldsymbol{H}$ を用いて $f(x,y)$ は次のように表される:(2.21)

なお、$\boldsymbol{H}$ は2次関数の　　　　行列と言い、この場合 $\boldsymbol{H}$=

x,y 軸を原点の周りに角度 θ だけ回転して新しい座標軸 x',y'を作ると、次の関係がある:

$$\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}= \qquad\qquad \begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix}$$

これを(2.21)に代入すると:

H の固有値をλ_1,λ_2とし、θ を適切に選ぶと f は次の標準形になる:

・関数$f(x,y)$が唯一の最小値を取るのは、ヘッセ行列が正値対称行列のとき、
つまり、ヘッセ行列の固有値がともに

・関数$f(x,y)$が唯一の最大値を取るのは、ヘッセ行列が負値対称行列のとき、
つまり、ヘッセ行列の固有値がともに

以上のことは、n 変数の2次関数$f(x_1,\ldots,x_n)=\dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{i,j=1}^{n}h_{ij}x_ix_j$ でも成立する。

ベクトルと行列 $\boldsymbol{H}$ を用いると次のように表される:

ここで、 $$H=\begin{pmatrix} & \cdots & \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ & \cdots & \end{pmatrix}$$

2 変数の時と同様に$x_1,\ldots x_n$座標系を原点周りに回転した新たな$x'_1,\ldots x'_n$座標系を作ると、直交行列 U を用いて、次の関係がある:

ヘッセ行列 H の固有ベクトルを列とする行列を直交行列 U に選び、H の固有値を$\lambda_1,\ldots,\lambda_n$とすると、

$$f=\frac{1}{2}(\lambda_1{x'_1}^2+\ldots+\lambda_n{x'_n}^2)$$

という標準形になる。

したがって、2次関数が唯一の最小値を取るのは、ヘッセ行列が

唯一の最大値を取るのは、ヘッセ行列が

2.3 関数の極値

・ 定理 2.7 点$(x_1,\ldots,x_n)$で関数$f(x_1,\ldots,x_n)$が極値を取れば、その点で以下が成り立つ。これを満たす点のことを といい、その点での関数値を という。

・ 点$(x_1,\ldots,x_n)$で関数$f(x_1,\ldots,x_n)$が極値を取れば, その点での2次近似は以下のように書ける:

$$f_{II}(x_1,\ldots,x_n)=\bar{f}+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}\bar{H}_{ij}(x_i-\bar{x_i})(x_j-\bar{x_j})$$

ここで、H は関数 f のヘッセ行列で、次のように表される:

・ 定理2.8 停留点におけるヘッセ行列が正値対称行列ならばその点で を取り、
負値対称行列ならばその点で を取る