最適化問題の基礎 5

crimsonbach

2004 年 9 月 2 日

3 変数の 2 次形式は一般に

$$
\begin{aligned}
q(u_1, u_2, u_3) =& d_{11}(u_1^2) + d_{12}(u_1u_2) + d_{13}(u_1u_3) \\
&+ d_{21}(u_2u_1) + d_{22}(u_2^2) + d_{23}(u_2u_3) \\
&+ d_{31}(u_3u_1) + d_{32}(u_3u_2) + d_{33}(u_3^2) \\
&= \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} d_{ij}u_iu_j. \qquad (1)
\end{aligned}
$$

2 次形式の正方行列は対照的である（ d_{12}, d_{21} ）。3 つの行列の積のかたちでは

$$
q(u_1, u_2, u_3) = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} \equiv u'Du. \qquad (2)
$$

判別式から 3 つの首座小行列が得られる。

$$
|D_1| \equiv d_{11}, \quad |D_2| \equiv \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix}, \quad |D_3| \equiv \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix}. \qquad (3)
$$

$|D_i|$ は判別式 $|D|$ の i 番目の首座小行列を表す。正値（負値）定符号のための条件、つまり首座小行列に対する符号の制約は

$$
\begin{aligned}
q =& d_{11}(u_1 + \frac{d_{12}}{d_{11}}u_2 + \frac{d_{13}}{d_{11}}u_3)^2 + \frac{d_{11}d_{22} - d_{12}^2}{d_{11}}(u_2 + \frac{d_{11}d_{23} - d_{12}d_{13}}{d_{11}d_{12} - d_{12}^2}u_3)^2 \\
&+ \frac{d_{11}d_{22}d_{33} - d_{11}d_{23}^2 - d_{22}d_{13}^2 - d_{33}d_{12}^2 + 2d_{12}d_{13}d_{23}}{d_{11}d_{22} - d_{12}^2}(u_3)^2. \qquad (4)
\end{aligned}
$$

（4）式のすべての係数が正（負）であるときのみ、正値定符号（負値定符号）になる。3 つの係数を 3 つの首座小行列で表すとそれぞれ

$$
|D_1|, \quad \frac{|D_2|}{|D_1|}, \quad \frac{|D_3|}{|D_2|}.
$$

$$
\text{正値定符号なら} \begin{Bmatrix} |D_1| > 0 \\ |D_2| > 0 \\ |D_3| > 0 \end{Bmatrix}, \qquad \text{負値定符号なら} \begin{Bmatrix} |D_1| < 0 \\ |D_2| > 0 \\ |D_3| < 0 \end{Bmatrix}.
$$

たとえば

$$
\begin{aligned}
&q = u_1^2 + 6u_2^2 + 3u_3^2 - 2u_1u_2 - 4u_2u_4 \\
&q \text{ の判別式} = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 6 & -2 \\ 0 & -2 & 3 \end{vmatrix} \\
&\text{首座小行列は } 1 > 0, \quad \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 6 \end{vmatrix} = 5 > 0, \quad \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 6 & -2 \\ 0 & -2 & 3 \end{vmatrix} = 11 > 0 \\
&2 \text{ 次形式は正値定符号.}
\end{aligned}
$$

n 変数への拡大。2 次形式

$$
q(u_1, \cdots, u_n) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}u_iu_j, \qquad [d_{ij} = d_{ji}] \tag{5}
$$

$$
= \underset{(1\times n)}{u'} \quad \underset{(n\times n)}{D} \quad \underset{(n\times 1)}{u} . \tag{6}
$$

が正値定符号であるための必要十分条件は $|D|$ の首座小行列

$$
|D_1| \equiv d_{11}, \quad |D_2| \equiv \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix}, \quad \cdots, \quad |D_n| \equiv \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{vmatrix}.
$$

がすべて正であること。同様に負値定符号であるための必要十分条件は

$$
|D_1| < 0, \quad |D_2| > 0, \quad |D_3| < 0, \quad \cdots.
$$

より、奇数番目の首座小行列はすべて負、偶数番目の首座小行列は正で、 $|D_n| = |D|$ は n が偶数なら正、奇数なら負であること。

行列 D の固有根による定符号チェック。$n \times n$ の行列 D のとき、行列方程式 $Dx = rx$ を満たすスカラー r と $(n \times 1)$ のベクトル $x \neq 0$ を見つけることができるか。スカラー r は行列 D の固有根（固有値）。x はその行列の固有ベクトル（特有ベクトル）。かきかえると、

$$
(D - rI)x = 0, \qquad 0 \text{ は } n \times 1.
$$

n 個の線型同次方程式体系。係数行列 $(D - rI)$ （ D の固有行列）は特異である必要がある（ $= 0$ ）。D の固有方程式

$$
|D - rI| = \begin{vmatrix} d_{11} - r & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} - r & \cdots & d_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} - r \end{vmatrix} = 0. \tag{7}
$$

行列 $|D - rI|$ はラプラス展開によって変数 r の n 次多項式。n 個の根（ $r_1, \cdots, r_n$ ）があり、固有根の資格をもつ。r の値の全てが行列式 $|D - rI|$ をゼロにする限り、 r_i を行列式に代入すれば対応する $x|_{r=r_i}$ が得

られる。たとえば、

行列 $\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$ の固有根と固有ベクトルは

$\begin{vmatrix} 2-r & 2 \\ 2 & -1-r \end{vmatrix} = r^2 - r - 6 = 0$

根は $r_1 = 3, \quad r_2 = -2$

$r_1 = 3$ のときは

行列方程式 $\begin{bmatrix} 2-3 & 2 \\ 2 & -1-3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

この係数行列の 2 つの根は 1 次従属で、その解は $x_1 = 2x_2$で表される

唯一の解を得るために、制約 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ を課すことによって解を正規化すると

$x_1^2 + x_2^2 = (2x_2)^2 + x_2^2 = 5x_2^2 = 1$

$x_2 = \dfrac{1}{\sqrt{5}}, \quad x_1 = 2x_2 = \dfrac{2}{\sqrt{5}}$

第 1 の固有根は $v_1 = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$

$r_2 = -2$ のときは

$\begin{bmatrix} 2-(-2) & 2 \\ 2 & -1-(-2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

解は $X_1 = -\dfrac{1}{2}x_2$, 正規化して

$x_1^2 + x_2^2 = (-\dfrac{1}{2}x_2)^2 + x_2^2 = \dfrac{4}{5}x_2^2 = 1$

$x_2 = \dfrac{2}{\sqrt{5}}, \quad x_1 = -\dfrac{1}{\sqrt{5}}, \qquad$ 第 2 の固有ベクトルは $v_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$

固有ベクトル集合の 2 つの特徴

- スカラー積 $v_i'v_i$ は 1 に等しくなければばならない

  $v_i'v_i = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n x_i^2 = 1, \qquad$ [正規化]

- スカラー積 $v_i'v_j, i \neq j$ は必ずゼロ。

  $v_i'v_j = 0, \quad i \neq j \qquad$ [互いに直交する]

固有ベクトル（ $v_1, \cdots, v_n$ ）は正規直交ベクトル集合。固有ベクトル $v_1, \cdots, v_n$ が行列 T の行ベクトル

$$\underset{(n \times n)}{T} = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{bmatrix}.$$

2 次形式 $u'Du$ に $\underset{(n \times 1)}{u} = \underset{(n \times n)}{T} \underset{(n \times 1)}{y}$ の変形

$$\begin{gathered} u'Du = (Ty)'D(Ty) = y'T'DTy = y'Ry \\ R \equiv T'DT. \end{gathered} \tag{8}$$

2 次形式は y_i を変数とするほかの 2 次形式。u_i と y_i は同じ値域の値を取る。2 次形式の定符号は変わらない。行列 R が対角行列で、行列 D の根 $r_1 \cdots r_n$ が対角線上へ並び、他の要素はすべてゼロ。

$$
\begin{aligned}
u'Du = y'Ry &= \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r_2 & \cdots & 0 \\ \multicolumn{4}{c}{\dotfill} \\ 0 & 0 & \cdots & r_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \\
&= r_1 y_1^2 + r_2 y_2^2 + \cdots + r_n y_n^2.
\end{aligned} \tag{9}
$$

対称行列 D を対角行列 R に対角化する。たとえば、

行列 $\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$ を、行列 $\begin{bmatrix} r_1 & 0 \\ 0 & r_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$ に対角化できるか確かめると

$$T = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

$$R \equiv T'DT = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

よって対角化できる

2 次形式の定符号テスト

- $q = u'Du$ は D の固有値のすべてが正（負）であるときのみ、正値（負値）定符号。
- $q = u'Du$ は D の固有値のすべてが非負（非正）でかつ少なくとも 1 つの根が 0 であるときのみ、正値（負値）定符号。
- $q = u'Du$ は D の固有値のいくつかが正でかつ他のいくつかが負であるときのみ、不定。

必要なのは固有値のみだから、このテストは完全なものであり、起こりうるすべての可能なケースを含んでいる。ただ、行列 D の次元が大きいと、固有値を求めるのが困難になる。