13.5 二次形式

13.6 節で，多変数関数 f に対し，f を二次関数で近似することにより，f の臨界点が極値点であるための十分条件を与える．その準備として 13.5 節で二次関数についての理解を深めておく．

13.5 節を通じ，$H = (h_{ij})_{\substack{1\le i\le d\\1\le j\le d}} \in \mathbb{R}^{d,d}$ を対称 ($h_{ij} = h_{ji}$) とし，以下の記号を用いる：

$$f(x) = x \cdot Hx, \quad x \in \mathbb{R}^d, \tag{13.26}$$

$$H_k = \begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1k} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ h_{k1} & \dots & h_{kk} \end{pmatrix}, \quad \Delta_k = \det H_k, \quad k = 1, ..., d \tag{13.27}$$

$f(x)$ を H の定める**二次形式**, Δ_k を H の**主小行列式**と言う.

次の命題が 13.5 節, 13.6 節の基本をなす.

命題 13.5.1 f, Δ_k を (13.26), (13.27) の通りとし，以下の条件を考える：

(P1) 全ての $k = 1, ..., d$ に対し $\Delta_k > 0$.

(P2) H は**正定値**, 即ち, $x \neq 0 \;\Rightarrow\; f(x) > 0$.

(PS1) 全ての $k = 1, ..., d$ に対し $\Delta_k \geq 0$.

(PS2) H は**半正定値**, 即ち, 任意の $x \in \mathbb{R}^d$ に対し $f(x) \geq 0$.

このとき, 「(P1) $\Leftrightarrow$ (P2)」, および「(PS1) $\Leftarrow$ (PS2)」が成立する[38].

注: 命題 13.5.1 において $f(0) = 0$ に注意すると,

$$\begin{aligned} \text{(P2)} &\iff x = 0 \text{ は } f(x) \text{ の狭義極小点}, \\ \text{(PS2)} &\iff x = 0 \text{ は } f(x) \text{ の極小点}. \end{aligned}$$

したがって命題 13.5.1 より，$x = 0$ が $f(x)$ の (狭義) 極大点であることと Δ_k ($k = 1, ..., d$) の符号が密接に関係する．なお，条件 (P1), (P2) の”P” は「正定値」(positive definite) の頭文字から, (PS1), (PS2) の”PS” は「半正定値」(positive semi-definite) の頭文字からとった．命題 13.5.1 を示すために，次の補題を用いる（補題の証明は，本節末の補足で述べる. 実は H の対称性は部分的にしか必要ない）.

[38]出版中の版に「(PS1) $\Leftrightarrow$ (PS2)」と記されているが，これは正しくない．例えば $H = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ は (PS1) をみたすが (PS2) はみたさない.

補題 13.5.2

$$\begin{aligned} g_{i\,j} &\stackrel{\text{def}}{=} h_{1\,1}h_{i\,j} - h_{1\,j}h_{i\,1}, \quad 1 \le i, j \le d, \\ G_{k-1} &\stackrel{\text{def}}{=} (g_{i\,j})_{2\le i,j\le k} \in \mathbb{R}^{k-1,k-1}, \quad k = 2, ..., d \end{aligned}$$

とするとき,

(a) $\det G_{k-1} = h_{11}^{k-2}\Delta_k$.

(b) $x \in \mathbb{R}^d$ に対し,

$$h_{11}f(x) = x' \cdot G_{d-1}x' + \left(\sum_{j=1}^d h_{1j}x_j\right)^2, \text{ ただし } x' = \begin{pmatrix} x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix}.$$

命題 13.5.1 の証明: (P1) $\Rightarrow$ (P2): d についての帰納法による．$d = 1$ なら明らか．そこで，(P1) $\Rightarrow$ (P2) が $d-1$ 次行列に対し成立すると仮定し，H が正定値であることを言う．今，$\Delta_1 = h_{11} > 0$. 従って補題 13.5.2 より,

$$\det G_{k-1} = h_{11}^{k-2}\Delta_k > 0, \quad k = 2, ..., d.$$

これと，帰納法の仮定より G_{d-1} は正定値である．更に補題 13.5.2 より,

(1) $$h_{11}f(x) = x' \cdot G_{d-1}x' + \left(\sum_{j=1}^d h_{1j}x_j\right)^2.$$

$x \neq 0$ なら,

$$(2)\text{: } x' \neq 0 \text{ または } (3)\text{:} x' = 0, x_1 \neq 0.$$

ところが,

$$\begin{aligned} (2) &\implies h_{11}f(x) \stackrel{(1)}{\ge} x' \cdot G_{d-1}x' > 0, \\ (3) &\implies f(x) \stackrel{f\text{ の定義}}{=} h_{11}x_1^2 > 0. \end{aligned}$$

以上より H は正定値である．
(P1) $\Leftarrow$ (P2): $k = 1, .., d$, $x \in \mathbb{R}^k$, $x \neq 0$ とする．f は正定値なので,

(4) $$x\cdot H_k x = f(x_1,...,x_k,\underbrace{0,..,0}_{d-k}) > 0.$$

今，H_k の各固有値 $\lambda_{k,j}$ $(j=1,...,k)$ に対し固有ベクトル $u_j\in\mathbb{R}^k$ $(|u_j|=1)$ をとる．このとき $H_k u_j = \lambda_{k,j}u_j$ より，

$$\lambda_{k,j} = u_j\cdot\lambda_j u_j = u_j\cdot H_k u_j \overset{(4)}{>} 0,\ \ (j=1,...,k).$$

従って $\Delta_k = \det H_k = \lambda_{k,1}\cdots\lambda_{k,k} > 0$.
(PS2)⇐(PS1): 「(P2)⇐(P1)」の証明と同様である． \(^▫^)/

次の条件 (N1), (N2) の"N" は「負定値」(negative definite) の頭文字, 条件 (NS1), (NS2) の"NS" は「半負定値」(negative semi-definite) の頭文字, 条件 (I) の"I" は「不定符号」(indefinite) の頭文字をとった．

系 13.5.3 記号は命題 13.5.1 の通りとし，以下の条件を考える：

(N1) 全ての $k=1,...,d$ に対し $(-1)^k\Delta_k > 0$.

(N2) H は**負定値**, 即ち, $x\neq 0 \ \Rightarrow\ f(x) < 0$.

(NS1) 全ての $k=1,...,d$ に対し $(-1)^k\Delta_k \geq 0$.

(NS2) H は**半負定値**, 即ち, 任意の $x\in\mathbb{R}^d$ に対し $f(x)\leq 0$.

(I) H は**不定符号**である, 即ち, ある $x,y\in\mathbb{R}^d\backslash\{0\}$ に対し $f(x) < 0 < f(y)$.

このとき[39].,

「(N1)⇔(N2)」, および「(NS1)⇐(NS2)」が成立する． (13.28)

(PS1), (NS1) がともに不成立 ⇒ (I). (13.29)

証明：(13.28):$-H$ に対し命題 13.5.1 を適用して得られる．
(13.29): (PS1), (NS1) が共に不成立なら命題 13.5.1, 系 13.5.3 より (PS2), (NS2) が共に不成立，ゆえに (I) がしたがう． \(^▫^)/

注: 系 13.5.3 において $f(0)=0$ に注意すると，

(N2) $\Longleftrightarrow$ $x=0$ は $f(x)$ の狭義極大点,

(NS2) $\Longleftrightarrow$ $x=0$ は $f(x)$ の極大点,

(I) $\Longleftrightarrow$ $x=0$ は $f(x)$ の極値でない.

したがって系 13.5.3 より，$x=0$ が $f(x)$ の (狭義) 極大点であるか否か, および $x=0$ が $f(x)$ の極値点であるか否か, と Δ_k $(k=1,...,d)$ の符号が密接に関係する．

[39]出版中の版に「(NS1) ⇔ (NS2)」，「(I) ⇔ (PS1), (NS1) がともに不成立」と記されているが，これらは正しくない．例えば $H=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$ は (NP1),(NS1),(I) をみたすが (NS2) はみたさない．

例 13.5.4 $C \in \mathbb{R}^{d,d}$,
$$f(x) = x \cdot Cx, \ \ x \in \mathbb{R}^d$$
に対し $H = C + {}^{\mathsf{t}}C$ (${}^{\mathsf{t}}C$ は C の転置行列を表す) とする．この H に対し命題 13.5.1, 系 13.5.3 の記号を用いると，

$$\begin{aligned}
\text{(P1)} \iff \text{(P2)} \quad &\iff \quad 0 \text{ は } f \text{ の狭義極小値}, \\
\text{(N1)} \iff \text{(N2)} \quad &\iff \quad 0 \text{ は } f \text{ の狭義極大値}, \\
\text{(PS1), (NS1) が共に不成立} \quad &\Longrightarrow \quad 0 \text{ は } f \text{ の極値でない}.
\end{aligned}$$

証明：
$$x \cdot Cx = \sum_{i,j=1}^{d} c_{ij} x_i x_j = \sum_{i,j=1}^{d} c_{ji} x_i x_j = x \cdot {}^{\mathsf{t}}Cx.$$
従って,
$$f(x) = \tfrac{1}{2} x \cdot Cx + \tfrac{1}{2} x \cdot {}^{\mathsf{t}}Cx = \tfrac{1}{2} x \cdot Hx.$$
従って命題 13.5.1, 系 13.5.3 に帰着する． \(^▫^)/

(⋆) 13.5 節への補足

補題 13.5.2 の証明：以下の証明からわかるように，(a) は H 対称とは限らない一般の正方行列でも成立し，(b) は $h_{i\,1} = h_{1\,i}$ $(1 \le i \le d)$ だけを仮定すれば成立する．
(a):H_k を次のように記す[40].
$$H_k = (\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, ..., \mathbf{h}_k), \ \ \text{ただし} \ \ \mathbf{h}_j = \begin{pmatrix} h_{1j} \\ \vdots \\ h_{kj} \end{pmatrix}.$$
$g_{i\,j} = h_{1\,1} h_{i\,j} - h_{1\,j} h_{i\,1}$ より，$1 \le j \le d$ に対し,

[40]列ベクトル $\mathbf{h}_j$ とスカラーの h_{ij} 区別がつきやすいように，この証明に限り列ベクトルを太字にした．