2008 年 12 月 14 日

唯一の停留点が極大なら最大か

新潟工科大学 情報電子工学科 竹野茂治

1 はじめに

例年、偏微分の応用として、2 変数関数の極大極小を求める話 (停留点、極の判別) の話をしている。

工学分野では、これが用いられる代表的な例の一つに回帰直線の導出があるが、工学向けの本ではそこでは停留点を求める計算しか紹介せず、それが極小であることも、最小であることも示していないものが多いように感じる。

確かに回帰直線の場合は、その 2 変数関数は下に凸な二次関数になるので停留点がそのまま最小値となるし、現象から考えても停留点がそのまま最小を与えることが予期されるのであろうが、本来はその点が極小を与えること、そして最小になることをちゃんと示す必要があると思う。

しかし考えてみると、例えば微積分の教科書でも停留点、すなわち極の候補の点が極であるかどうかの判別法は説明するが、実際にそれが最小であるかどうか、という大域的な性質についてはあまり書いてないように思う。そこでふと思ったのであるが、次のことは言えるのであろうか。

> **問題 1**
>
> すべての実数 x, y について定義されている関数 $f(x,y)$ が十分滑らか (例えば C^2 級) であり、その停留点が一つしかなく、そこで $f(x,y)$ が極大 (極小) となる場合、その点は最大値 (最小値) を与えるか

もしこれが成り立つならば、「停留点が一つしかない」という特別な場合であるが、停留点と局所的な凸性の確認のみで大域的な最大、最小を求めることができることになり、それなりに十分有益な命題となるはずなので、本稿ではこれについて考えてみることにする。

2 用語

まずこの節では、前節でも出てきた用語等について確認しておく。詳しくは、適当な微分の教科書 (偏微分の部分) を参照すること。また、以後 $f(x,y)$ は、すべての実数 x, y について定義されていて、十分滑らかであるとする。

$f(x,y)$ が $(x,y)=(a,b)$ で **極大** (**極小**) であるとは、(a,b) の十分近くの (a,b) とは異なるすべての (x,y) に対して

$$f(x,y) < f(a,b) \quad (f(x,y) > f(a,b))$$

となることを言う。また、$(x,y)=(a,b)$ で **最大** (**最小**) であるとは、すべての (x,y) に対して、

$$f(x,y) \leq f(a,b) \quad (f(x,y) \geq f(a,b))$$

であることを言う。1 変数の場合と同じで極大、極小は局所的な性質であり、最大、最小は大域的な性質である。

$(x,y)=(a,b)$ が $f(x,y)$ の **停留点** であるとは、

$$f_x(a,b) = f_y(a,b) = 0$$

が成り立つことを言う。これは 1 変数関数の場合の $g'(a)=0$ に相当し、このような点が極の候補となる。

極の判別は、凸性を調べることで行うことができ、それについてはたいていの教科書に書いてある次の事実を用いる。

命題 1

$A = f_{xx}(a,b)$, $B = f_{xy}(a,b)$, $C = f_{yy}(a,b)$ とするとき、

1. $A > 0$ かつ $B^2 - AC < 0$ ならば $f(x,y)$ は $(x,y)=(a,b)$ で下に凸 (すなわち、(x,y) 平面のどの方向に対しても下に凸)
2. $A < 0$ かつ $B^2 - AC < 0$ ならば $f(x,y)$ は $(x,y)=(a,b)$ で上に凸 (すなわち、(x,y) 平面のどの方向に対しても上に凸)

3. $B^2 - AC > 0$ ならば方向によって凸性が入れ変わる

よって、まず停留点を求め、そしてそこでの A, B, C の値を求めて、$B^2 - AC$ と A の符号で極の判別をする、というのが標準的な方法であり、停留点では、命題 1 の 1. であれば極小、2. であれば極大、そして 3. であれば極ではない (**鞍点** と呼ばれる) ことが言えることになる。

3　1 変数関数の場合

この節では、問題 1 をまず 1 変数関数の場合について考えてみる。そしてこの場合は、容易に次が成り立つことが示される。

命題 2

すべての x で定義されている関数 $g(x)$ が十分滑らか (例えば C^2 級) であり、$g'(x) = 0$ となる x は $x = a$ しか持たず、そこで $g(x)$ が極大 (極小) となる場合、$g(a)$ は最大値 (最小値) となる。

証明

極小、最小の方は同様に示されるので、極大、最大の方のみを示す。$g(a)$ を超える値があったとして、すなわち、ある $x = b$ で $g(b) > g(a)$ となったとして矛盾を導くことにする。また、$b < a$ の場合も同様であるので、以後 $b > a$ であるとして考える。

$x = a$ で $g(x)$ は極大となるので、a の十分近くの x では $g(x) < g(a)$ となっているはずなので、

$$g(a) > g(c) \quad (a < c < b)$$

となる点 c を一つ取る (取れる)。このとき、

$$g(c) < g(a) < g(b) \quad (c < b)$$

であるから、連続関数の中間値の定理により、

$$g(a) = g(d) \quad (c < d < b)$$

となる点 d が存在する。よって、ロルの定理 (または平均値の定理) により、

$$g'(e) = 0 \quad (a < e < d)$$

となる点 e が存在することになる。しかし、これは $g'(x) = 0$ となる x が $x = a$ のみであることに矛盾する。■

1 変数関数の場合、極大値 $g(a)$ よりも大きい値 $g(b)$ がある場合、$x = a$ から $x = b$ までは $g(a)$ よりも値が一旦下がってから $g(b)$ に上がらなければならず、よって減少から増加に転ずる折り返し点があるはずで、そこで $g'(x) = 0$ となってしまう (証明の e がその折り返し点に相当する) から、$g'(x) = 0$ となる点が一つしかなければそれは起こり得ない。よって極大が最大であることがちゃんと言えるのである。

4 2 変数関数の場合

では、2 変数関数の場合はどうだろうか。

2 変数でも、極大値 $f(a, b)$ よりも大きい値 $f(p, q)$ がある場合、(x, y) 平面上で (a, b) から (p, q) に向かう任意の滑らかな道に沿って考えれば、それに沿っては $f(x, y)$ の値は一旦下がってから上がらないといけないので、やはりその折り返し点では関数のグラフの傾きは 0 になるのであるが、それはこの道に沿う方向の傾きが 0 になるだけで、(x, y) 平面のどの方向にも傾きが 0 (そのような点が停留点) であることは意味せず、よってそこからは 1 変数のような矛盾は得られない。

つまり、そのような折り返し点での別方向の傾きが 0 にならないように $f(x, y)$ を作れれば、それが問題 1 の反例となりうる。そして実際に、2 変数関数の場合は、そのような反例を構成することができることを以下に紹介する。

まず

$$h_1(y) = y^4 - 2y^2$$

を考えると、

$$h_1'(y) = 4y(y-1)(y+1)$$

であるので、$h_1(y)$ は $y = -1, 0, 1$ でそれぞれ極となり、$y = 0$ で極大値 0、$y = \pm 1$ で極小値 -1 を取る。これを用いると、$\alpha > \beta$ に対し、$y = 0$ で極大値 α、$y = \pm 1$ で極小値 β を持つ関数を作ることができ、例えば、

$$h_2(y) = h_2(y; \alpha, \beta) = (\alpha - \beta)h_1(y) + \alpha$$

がそれに当たることが容易にわかる。

今、$h_3(x)$, $h_4(x)$ を、

- $h_3(x)$ は $x < 0$ で増加、$x > 0$ で減少で、$h_3''(0) < 0$、$\lim_{x\to\pm\infty} h_3(x) = 0$ (よって $h_3(x) > 0$)
- $h_4(x)$ は単調増加関数で $\lim_{x\to\infty} h_4(x) = 0$ (よって $h_4(x) < 0$)

を満たす滑らかな関数とし (例えば、$h_3(x) = e^{-x^2}$, $h_4(x) = -e^{-x}$ など)、

$$f(x,y) = h_2(y; h_3(x), h_4(x)) = (h_3(x) - h_4(x))h_1(y) + h_3(x)$$

とすれば、これが問題 1 の反例となる。

$h_3(x) > 0 > h_4(x)$ なので、すべての x に対して、y 方向には $f(x,y)$ は $y = 0$ で極大 (極大値 $h_3(x)$) で、$y = \pm 1$ で極小 (極小値 $h_4(x)$) となり、それ以外では y 方向の傾きは 0 とはならない。また、x 方向には、$y = 0$ 上では $f(x, 0) = h_3(x)$ だから $x = 0$ でのみ傾きが 0 で、そこで極大となり、$y = \pm 1$ 上では $f(x, \pm 1) = h_4(x)$ だから x に関して単調増加なので傾きが 0 となる点はない。

よって $f(x,y)$ の停留点は $(x,y) = (0,0)$ しかなく、そこで極大となる。しかし、例えば $(x,y) = (0,2)$ では、$h_3(x) > h_4(x)$ より

$$\begin{aligned} f(0,2) &= (h_3(0) - h_4(0))h_1(2) + h_3(0) = 8(h_3(0) - h_4(0)) + h_3(0) \\ &> h_3(0) = f(0,0) \end{aligned}$$

となるので、$f(0,0)$ は最大ではない。

なお、$f(0,0)$ が極大であることは、

$$
\begin{aligned}
A &= f_{xx}(0,0) = (h_3''(0) - h_4''(0))h_1(0) + h_3''(0) = h_3''(0) < 0, \\
B &= f_{xy}(0,0) = (h_3'(0) - h_4'(0))h_1'(0) = 0, \\
C &= f_{yy}(0,0) = (h_3(0) - h_4(0))h_1''(0) = -4(h_3(0) - h_4(0)) < 0
\end{aligned}
$$

なので、$B^2 - AC = -h_3''(0)C < 0,\ A = h_3''(0) < 0$ となるので、命題 1 から直接得ることもできる。

5 回帰直線

この節では、例、あるいは付録として、1 節でも触れた回帰直線を求める最小問題を取り上げる。まず、いくつかの用語、記号を紹介する。

何らかの 2 次元的なデータ (x_j, y_j) $(j = 1, 2, \ldots, N)$ があるとし、これに対して、x_j の平均、y_j の平均を $\bar{x}, \bar{y}$ と書く。

$$
\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} x_j, \quad \bar{y} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} y_j
$$

一般に、$x_j^k y_j^l$ の平均を $\overline{x^k y^l}$ のように書くことにする。

$$
\overline{x^k y^l} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} x_j^k y_j^l
$$

また、各データの平均との差の積の和を以下のように書き、

$$
S_{xx} = \sum_{j=1}^{N}(x_j - \bar{x})^2, \quad S_{xy} = \sum_{j=1}^{N}(x_j - \bar{x})(y_j - \bar{y}), \quad S_{yy} = \sum_{j=1}^{N}(y_j - \bar{y})^2 \tag{1}
$$

平均の差を取らない、単なる積の和などを以下のように書く。

$$
\sigma_{xx} = \sum_{j=1}^{N} x_j^2\,(= N\overline{x^2}), \quad \sigma_{xy} = \sum_{j=1}^{N} x_j y_j\,(= N\overline{xy}), \quad \sigma_{xx} = \sum_{j=1}^{N} y_j^2\,(= N\overline{y^2}),
$$

$$\sigma_x = \sum_{j=1}^{N} x_j \, (= N\bar{x}), \quad \sigma_y = \sum_{j=1}^{N} x_j \, (= N\bar{y})$$

この S の形の和は、以下のように σ を用いて表すことができる。

$$\begin{aligned}
S_{xx} &= \sum_{j=1}^{N}(x_j^2 - 2x_j\bar{x} + \bar{x}^2) = \sigma_{xx} - 2\sigma_x\bar{x} + N\bar{x}^2 = \sigma_{xx} - \frac{1}{N}\sigma_x^2, \\
S_{xy} &= \sum_{j=1}^{N}(x_jy_j - x_j\bar{y} - y_j\bar{x} + \bar{x}\bar{y}) = \sigma_{xy} - \sigma_x\bar{y} - \sigma_y\bar{x} + N\bar{x}\bar{y} \\
&= \sigma_{xy} - \frac{1}{N}\sigma_x\sigma_y, \\
S_{yy} &= \sigma_{yy} - \frac{1}{N}\sigma_y^2
\end{aligned}$$

さて、2 次元データ (x_j, y_j) に最も近い直線を求めるために、それを $y = ax + b$ と置いて、その直線とそのデータとの誤差 $y_j - (ax_j + b)$ の平方和を

$$E = E(a, b) = \sum_{j=1}^{N}\{y_j - (ax_j + b)\}^2$$

として、これが最も小さくなるような a, b を求める。この E の最小値を与える直線を **回帰直線** と呼ぶ。

まず、E の最小値を考えるために、a, b に関する E の停留点を求める。偏微分

$$E_a = \frac{\partial E}{\partial a} = \sum_{j=1}^{N} 2(y_j - ax_j - b)(-x_j) = -2\sigma_{xy} + 2a\sigma_{xx} + 2b\sigma_x, \tag{2}$$

$$E_b = \frac{\partial E}{\partial b} = \sum_{j=1}^{N} 2(y_j - ax_j - b)(-1) = -2\sigma_y + 2a\sigma_x + 2Nb \tag{3}$$

により、停留点は、a, b に関する連立方程式

$$\begin{cases} a\sigma_{xx} + b\sigma_x &= \sigma_{xy}, \\ a\sigma_x + bN &= \sigma_y \end{cases}$$

を解けば求まる。よって、$N\sigma_{xx} - \sigma_x^2 = NS_{xx} \neq 0$ のとき、a, b は

$$a = \frac{N\sigma_{xy} - \sigma_x\sigma_y}{N\sigma_{xx} - \sigma_x^2} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}, \quad b = \frac{\sigma_y - a\sigma_x}{N} = \bar{y} - a\bar{x} \tag{4}$$

となる。よく知られているようにこれらが回帰直線を与える係数である。

ここで、$S_{xx}=0$ となるのは、すべての x_j が $\bar{x}$ に等しい、つまりすべての x_j が同じ値である場合であるから、そうでなければ $S_{xx}>0$ となる。よって、通常のデータでは、$S_{xx}>0$ と考えることができ、以下その状況で考える。

この場合、(2), (3) より

$$E_{aa}=2\sigma_{xx},\quad E_{ab}=2\sigma_x,\quad E_{bb}=2N$$

であり、x_j がすべて等しいという状況でなければ $E_{aa}>0$ で、

$$E_{ab}^2-E_{aa}E_{bb}=4\sigma_x^2-4N\sigma_{xx}=-4NS_{xx}<0$$

となるので、命題 1 より 2 変数関数 $E(a,b)$ はすべての (a,b) に対して下に凸となる。よって、E は (4) の停留点で確かに大域的に最小となることが言える。

なお、ついでに言うと、(4) の a の計算も、最初から $a=S_{xy}/S_{xx}$ より S の定義式 (1) を用いて計算している学生を見かけることがあるが、むしろ (4) の最初にある σ による表現式を用いて計算する方が楽である。それは、S の定義を用いると、x、y を先に求めるためにまず全部のデータを一度走査する必要があり、その後でもう一度全部のデータを走査する必要があるが、σ の値ならば、各データに対する x_jy_j, x_j^2, x_j, y_j の値の和を計算していけばいいだけなので、データの走査は一度で済む。つまり大量のデータに対しても、こちらの方法を使えば逐次計算していくことができる。

6 最後に

結局、問題 1 は、1 変数関数の場合には肯定的に成立するが、2 変数関数の場合には成立しないことがわかった。

よって、2 変数関数の場合には、停留点が一つしかない場合でそこが極大であったとしても、それが大域的な最大値であるとは限らず、よって最大値の判別はそれとは別にちゃんと考察をしなければいけないことがわかる。

停留点だけでなく、すべての点で上に凸であればその点は明らかに最大点となるので、例えば命題 1 を使えば、そのような場合はちゃんと最大点であることも判別できる。

しかし、場所によって凸性が変わるような関数の場合はそうはいかないので、

- 有限な領域ならば、その領域内部の極大値と、その境界上の最大値
- 無限領域ならば、領域内部の極大値、境界上の最大値、および無限遠方での $f(x,y)$ の漸近的な性質

から大域的な最大値を考察することになる。

よって、2 変数関数の最大、最小は、一般には単に停留点だけ求めれば、あるいはその点の局所的な凸性だけ調べれば済むような話ではなく、そこから先の考察もまだだいぶ必要な、それなりに面倒な問題となる。

そもそも本稿の内容が自明ではないことは、多くの微積分の教科書に書いてないことからも想像できるし、実際私も聞いたことがなかった。しかし逆に、問題 1 の予想が 2 変数でも成り立っていたならば、それは当然多くの教科書にも書かれていてもおかしくないくらい有用なものだと思うので、それが書かれていないのはやはりそれが成り立たないことも知られていたと見るのが自然であろう。

つまり、問題 1 の不成立は自明ではないが、それが成り立たないということも多分それなりにちゃんと知られていた事実なんだろうと思う。