

0. 集合などの記法

集合 **set** とは、元 **element** の集まりである。数学的対象物(数とは限らない)が元となりうる。ある物 a が集合 A の要素であることを $a \in A$, ある物 a が集合 A の要素でないこと $a \notin A$ と記す。1 つも元を持たない集合を **空集合 empty set** といい、 \emptyset と記す。集合の記法は 2 つある。①外延的記法: $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ といったものと②内包的記法: $A = \{a \in R: 1 \leq a \leq 7\}$ といったものである。2 つのもの x, y が同じものなら $x = y$, 異なるものなら $x \neq y$ と記す。

$\forall x$ は任意の x について, $\exists x$ はある x が存在して, という意味である。

2 つの集合 A, B が存在するとしよう。① $\forall x, x \in A \Rightarrow x \in B$ であるとき A は B の **部分集合 subset** であるといい, $A \subset B$ と記す。 $A \subset B$ かつ $B \subset A$ であるとき, $A = B$ と記す。② $A \cap B = \{x: x \in A \text{ and } x \in B\}$ と記し, **共通部分 intersection** という。③ $A \cup B = \{x: x \in A \text{ or } x \in B\}$ と記し, **和集合 union** という。④ $A \setminus B = \{x: x \in A \text{ and } x \notin B\}$ と記し, 集合の **差** という。特に $B \subset A$ のとき, A を **全体集合** といい, $A \setminus B$ を A^c と記し **補集合 complement** という。

元が全てそれ自身集合であるような集合(「集合の集合」)を **集合族 family of sets** という。任意の集合 X について, X の部分集合全体がつくる集合族を特に **冪集合 power set** という。添字の集合を I として, 各 $i \in I$ に対して集合 X_i が定まるとする。 $(X_i)_{i \in I}$ を添字付けられた集合族 **indexed family of sets** という。特に $\forall i \in I, X_i \in X$ となる集合族 $(X_i)_{i \in I}$ を部分集合族という。冪集合も部分集合族の一種であることに注意せよ。 $\bigcup_{i \in I} X_i = \{x \in X, \exists i \in I, x \in X_i\}$, $\bigcap_{i \in I} X_i = \{x \in X, \forall i \in I, x \in X_i\}$ と記す。

自然数全体の集合を $\mathbf{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ とする。整数全体の集合を $\mathbf{Z} = \{\dots, -1, 0, 1, \dots\}$ とする。整数 m と 0 でない整数 n をもちいて $\frac{m}{n}$ と表現される数を有理数といい, 有理数全体の集合を \mathbf{Q} と記す。有理数に無理数を併せたものを **実数 real number** といい, 実数全体の集合を \mathbf{R} と記す。実数は, 本来は代数の公理, 順序の公理, 連続の公理を満たすものとして定義される。 $\mathbf{R}_+ = \{x \in \mathbf{R}: x \geq 0\}$, $\mathbf{R}_{++} = \{x \in \mathbf{R}: x > 0\}$ と記す。

1. 関数

定義 1.1 2 つの集合 X, Y が与えられたとき, X の各要素に Y の要素を(複数でも)対応付ける規則を, 集合 X から集合 Y への **対応 correspondence** という。

定義 1.2 2 つの集合 X, Y が与えられたとき, X の各要素に Y の要素を唯一つ **unique** に対応付ける規則 f を, 集合 X から集合 Y への **関数 function** という。

$$f: X \rightarrow Y$$

と記す。 $x \in X$ について $f: x \mapsto f(x)$ とも記す。 X を **定義域 domain of definition**, $\{y \in Y: \exists x \in X, f(x) = y\} \subset Y$ を **値域 range** という。

定義 1.3 $x \in X, y \in Y$ を満たす **順序対 ordered pair** (x, y) の全体を, X と Y の **直積集合 Cartesian product** といい, $X \times Y$ と記す。

定義 1.4 $f: X \rightarrow Y$ について, $G_f = \{(x, f(x)): x \in X\}$ を関数 f の **グラフ graph** という。

定義 1.5 $f: X \rightarrow Y, g: Y \rightarrow Z$ とする。 $g \circ f: X \rightarrow Z$ を **合成関数 composite function** という。 $g \circ f: x \mapsto g(f(x))$ とも記す。

定義 1.6 $f: X \rightarrow Y$ とする。

- (a) $x_1, x_2 \in X$ and $x_1 \neq x_2 \Rightarrow f(x_1) \neq f(x_2)$ のとき, f は単射 **injection** である.
 (b) $y \in Y \Rightarrow \exists x, f(x) = y$ のとき, f は全射 **surjection** である
 (c) 単射かつ全射であるとき, **全単射 bijection** である.

定義 1.7 $f: X \rightarrow Y$ が全単射であるとき, $\forall y \in Y, \#\{x \in X: f(x) = y\} = 1$ となり, 逆関数 **inverse function**

$$f^{-1}: Y \rightarrow X$$

が定まる.

2. ユークリッド空間と位相

定義 2.1 集合 R^n を, R の n 個の直積 $R \times R \times \cdots \times R$ とし, **実 n 次元数空間 real n -space** という. R^n の元 $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ を **n 次元ベクトル n -dimensional vector** という. ベクトルは順序対である. 紙幅の都合からベクトルは $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ と略記される.

定義 2.2 2 つの n 次元ベクトル $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ と $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ について,

- (a) $x + y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n)$ とする.
 (b) $\alpha x = (\alpha x_1, \alpha x_2, \dots, \alpha x_n)$. 但し $\alpha \in R$
 (c) $x \cdot y = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$ とする演算を **内積 inner product** という.

(c) のように内積を定められた R^n を **n 次元ユークリッド空間 n -dimensional Euclidian space** という. $x \in R^n$ の長さ (ノルム **norm**) を $\sqrt{x \cdot x} = |x|$ とする. x と y のなす角を θ とするとき, $x \cdot y = |x||y|\cos\theta$ が成り立つ (幾何学的な意味を考察せよ).

定義 2.3 $a \in R^n, r \in R_{++}$ について, $B(a; r) = \{x \in R^n: |x - a| < r\}$ とし, **n 次元開球 open n -ball** という.

定義 2.4 ある $a \in S \subset R^n$ について, $\exists r \in R_{++}, B(a; r) \subset S$ となるとき, a は S の内点 **interior point** であるという. 集合 S の内点の集合を **内部 interior** といい, $\text{int } S$ と記す.

定義 2.5 $\text{int } S = S$ となる集合 S を **開集合 open set** という.

定義 2.6 集合 S の補集合 $S \setminus R^n = S^c$ が開集合のとき, S は閉集合であるという.

定義 2.7 $S \subset R^n$ と $a \in R^n$ について, $\forall \varepsilon > 0, B(a; \varepsilon) \cap S \neq \emptyset$ となるとき, a は S の接触点 **adherent point** または触点という. 触点全体の集合を **閉包 closure** といい, \bar{S} と記す. 一般に $S \subset \bar{S}$.

命題 2.8 $S = \bar{S} \Leftrightarrow S$ は閉集合.

定義 2.9 一次元ユークリッド空間 R において, $a, b \in R$ とする. $(a, b) = \{x \in R: a < x < b\}$ を开区間という. $[a, b] = \{x \in R: a \leq x \leq b\}$ を閉区間という.

定義 2.10 ある点 $a \in R^n$ と正数 $r \in R_{++}$ によって $S \subset R^n$ が $S \subset B(a; r)$ とできるとき, S は有界 **bounded** であるという. S が有界かつ閉集合であるとき, S はコンパクト **compact** であるという.

定義 2.11 集合 S について, $\forall x, y \in S, \forall \alpha \in (0, 1), \alpha x + (1 - \alpha)y \in S$ となるとき, S は凸集合 **convex set** という.

3. 行列の演算

定義 3.1 $m \times n$ 行列 A を,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

とする. i 行目 j 列目にある数を a_{ij} としている. $m \times 1$ 行列はベクトルである.

定義 3.2 $m \times n$ 行列 A, B について

$$\begin{aligned} A \pm B &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mn} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} \pm b_{11} & a_{12} \pm b_{12} & \cdots & a_{1n} \pm b_{1n} \\ a_{21} \pm b_{21} & a_{22} \pm b_{22} & \cdots & a_{2n} \pm b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} \pm b_{m1} & a_{m2} \pm b_{m2} & \cdots & a_{mn} \pm b_{mn} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

定義 3.3 m 行 n 列の行列 ($m \times n$ 行列) A と $n \times l$ 行列 B があるとする.

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1l} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nl} \end{pmatrix} \\ AB &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1l} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m1} & c_{m2} & \cdots & c_{ml} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

このとき, $c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$ とする. c_{ij} は, A の第 i 行ベクトルと B の第 j 列ベクトルの内積であると思えば良い. AB は $m \times l$ 行列である. $AB \neq BA$ など, AB が定義できても BA が定義できないことは多い (この定義をよく確認せよ).

定義 3.4

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

に対して $n \times m$ の転置行列 **transposed matrix** A^T を以下の様に定める.

$$A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

定義 3.5 列数と行数が一致する $n \times n$ 行列を **正方行列 square matrix** という. $A^T = A$ のとなる行列は **対称行列 symmetric matrix** という.

定義 3.6 A を $n \times n$ 行列とする. 任意の $h \in \mathbb{R}^n, h \neq 0$ について

- (a) $h^T A h < 0$ ならば A は **負値定符号 negative definite** という.
- (b) $h^T A h > 0$ ならば A は **正值定符号 positive definite** という.
- (c) $h^T A h \leq 0$ ならば A は **負値半定符号 negative semidefinite** という.
- (d) $h^T A h \geq 0$ ならば A は **正值半定符号 positive semidefinite** という.

定義 3.7 $1, 2, \dots, n$ を並べ替える操作を **置換 permutation** といい, σ で表す. $\sigma(1) = i_1, \sigma(2) = i_2, \dots$ であるとき,

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n \end{pmatrix}$$

と記す. n 文字の置換全体を S_n と記す. 文字も動かさないとき **単位置換** 1_n という. 逆変換は **逆置換** σ^{-1} という.

定義 3.8 2 つの置換 σ, τ の合成変換を **積** といい, $\tau\sigma$ と記す. 一般には $\tau\sigma \neq \sigma\tau$.

命題 3.8 $(\sigma\tau)\rho = \sigma(\tau\rho), 1_n\sigma = \sigma 1_n, \sigma\sigma^{-1} = \sigma^{-1}\sigma = 1_n$ は明らか.

定義 3.9 n 文字の置換で 2 文字のみを入れ替え他の $n-2$ 文字を動かさないものを **互換** という.

定理 3.10 任意の置換 σ は互換の積で表されるが, 必要な互換の数は一意ではない. しかし, 互換の個数が偶数か奇数であるかは σ のみに依存して決定される. 証明は齋藤 (1966) p.76. 偶数個の時は偶置換, 奇数個の時は奇置換といい, それぞれに $\text{sgn}\sigma = +1, \text{sgn}\sigma = -1$ とする sgn を定義する.

定義 3.11 $n \times n$ 行列 A について, 行列式 determinant は以下のように定まる.

$$\det A = |A| = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sgn} \sigma \cdot a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \cdots a_{n\sigma(n)}$$

定義 3.12 A を $n \times n$ 行列とする. 首座小行列 **naturally ordered principal minor** A_k を以下のように定義する.

$$A_k = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{pmatrix}$$

定理 3.13 A を対称な $n \times n$ 行列とする.

- (a) $|A_k| > 0$ for $k = 1, \dots, n$ と, A が正値定符号であることは同値.
- (b) $(-1)^k |A_k| < 0$ for $k = 1, \dots, n$ と, A が負値定符号であることは同値.

証明は Debreu (1952).

4. 連続

定義 4.1 $A \subset \mathbb{R}^n, f: A \rightarrow \mathbb{R}^m$ とする. このとき, f は n 変数 m 次元ベクトル値関数という. 特に $m = 1$ のとき実数値関数という.

定義 4.2 $A \subset \mathbb{R}^n, f: A \rightarrow \mathbb{R}^m$ として, $a \in \bar{U}, b \in \mathbb{R}^m$ とする. x が a に近づくときの $f(x)$ の極限が b であるとは,

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0, \forall x \in A, |x - a| < \delta \Rightarrow |f(x) - b| < \varepsilon$$

であることを言う. これをイプシロン-デルタ論法という.

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow a} f(x) &= b \\ f(x) &\rightarrow b \ (x \rightarrow a) \end{aligned}$$

などと記す.

定義 4.3 $A \subset \mathbb{R}^n, f: A \rightarrow \mathbb{R}^m$ とする. $a \in A$ について

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0, \forall x \in A, |x - a| < \delta \Rightarrow |f(x) - f(a)| < \varepsilon$$

となるとき, f は a で連続 continuous であるという.

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a)$$

とも記す. 任意の $a \in A$ で連続なとき, 単に f は連続であるという.

定義 4.4 $A \subset \mathbb{R}^n, f: A \rightarrow \mathbb{R}^m, a \in \bar{A}$ について, $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = 0$ であることを, f は a において無限小であるという. $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = +\infty$ であることを, f は a において無限大であるという.

定義 4.5 $A \subset \mathbb{R}^n, f: A \rightarrow \mathbb{R}$ とし, $A \subset T \subset \mathbb{R}^n, g: T \rightarrow \mathbb{R}$ とし, $a \in A$ について $\exists \varepsilon > 0, \forall x \in U, 0 < \|x - a\| < \varepsilon \Rightarrow g(x) \neq 0$ とする. f が

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = 0$$

を満たすとき, a において f は g に比べて無視できるという. a において g に比べ無視できる任意の関数を一般に $o(g)(x \rightarrow a)$ と記す. f, g が a において共に無限小であるとき, f は g より高位の無限小であるという.

5. 一変数関数の微分法

定義 5.1 \mathbb{R} の开区間 I 上で定義される関数 $f: I \rightarrow \mathbb{R}^n$ があるとする. $t \in I$ に対し, 極限

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h} = c$$

が存在するとき, f は t で微分可能であるといい, c を f の t における微分係数 derivative という. このとき,

$$c = f'(t) = \frac{df}{dt}(t) = Df(t) = (f(t))'$$

などと表記する. I の各点で微分可能なとき, $I \rightarrow \mathbf{R}^n$ である関数 $t \mapsto f'(t)$ を f の**導関数 derivative** という.

命題 5.2 開区間 $I, f: I \rightarrow \mathbf{R}^n, t \in I, f(t) = \begin{pmatrix} f_1(t) \\ \vdots \\ f_n(t) \end{pmatrix}$ が微分可能であるなら $f'(t) = \begin{pmatrix} f_1'(t) \\ \vdots \\ f_n'(t) \end{pmatrix}$.

$f'(t)$ は接ベクトルともいう.

定義 5.3 $f: I \rightarrow \mathbf{R}^n$ の導関数 f' が I で微分可能であるとき, f' の導関数である $(f')'$ が定義される. これを f の**二階導関数 second derivative** といい, f'' で表す. 帰納的に, k 階導関数 $f^{(k)}$ が定義され微分可能のとき, $f^{(k)}$ の導関数として $k+1$ 階導関数 $f^{(k)'} = f^{(k+1)}$ が定義される.

定義 5.4 $k \in \mathbf{N}$ とする. $f: I \rightarrow \mathbf{R}^n$ が I で k 階までの導関数が存在して, $f^{(k)}$ が連続であるとき, f は I で \mathbf{C}^k 級(k 回連続微分可能)であるという. 任意回数微分可能な関数を I で \mathbf{C}^∞ 級であるという.

定理 5.5 (Taylor) $n \in \mathbf{N}$ とする. 区間 $[a, x]$ (または $[x, a]$) $= I$ で n 回微分可能な実数値関数 $f: I \rightarrow \mathbf{R}$ について

$$f(x) = f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{f^{(i)}(a)}{i!} (x-a)^i + \frac{f^{(n)}(c)}{n!} (x-a)^n$$

となる $c \in \text{int} I$ が存在する. 更に,

$$f(x) = f(a) + \sum_{i=1}^n \frac{f^{(i)}(a)}{i!} (x-a)^i + o((x-a)^n), \quad (x \rightarrow a)$$

となる. $x-a=h$ とすれば,

$$f(a+h) = f(a) + \sum_{i=1}^n \frac{f^{(i)}(a)}{i!} h^i + o(h^n), \quad (h \rightarrow 0)$$

となる.

最適化で特に重要なのは,

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + o(h) \quad (\text{一次近似公式})$$

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2} h^2 + o(h^2) \quad (\text{二次近似公式})$$

の2つである.

6. 多変数関数の微分

定義 6.1 $A \subset \mathbf{R}^n, f: A \rightarrow \mathbf{R}^m, a \in A$ について, 任意の n 次元ベクトル $e \in \mathbf{R}^n$ に対し実変数 $t \in \mathbf{R}$ の関数

$$g(t) = f(a + te)$$

がある正数 $\varepsilon > 0$ によって定まる近傍 $(-\varepsilon, \varepsilon)$ で定義されているとしよう. この関数 $g(t)$ が $t=0$ で微分可能なら, 関数 f は a において e 方向に微分可能であるといい, $g'(0)$ を f の a における e 方向の微分係数といい,

$$g'(0) = D_e f(a) = \frac{\partial f}{\partial e}(a)$$

と記す.

命題 6.2 $D_e f(a) = \begin{pmatrix} D_e f_1(a) \\ \vdots \\ D_e f_m(a) \end{pmatrix}$ が命題 5.2と同様に成り立つ.

定義 6.3 $e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ を \mathbf{R}^n の自然基底という. $f: A \rightarrow \mathbf{R}^m$ が $a \in A$ において e_i 方向に微分可能であるとき, つまり極限

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(a_1, \dots, a_{i-1}, a_i + t, a_{i+1}, \dots, a_n) - f(a_1, \dots, a_n)}{t}$$

が存在するとき、 f は a において第 i 座標 x_i について偏微分可能であるという。 $D_{e_i}f(a)$ を偏微分係数といい、

$$D_{e_i}f(a) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(a) = f_{x_i}(a) = D_i f(a)$$

等と記す。 A の各点で微分可能なとき、関数 $\frac{\partial f}{\partial x_i}: a \mapsto \frac{\partial f}{\partial x_i}(a)$ を f の偏導関数という。

定義 6.4 偏導関数 $\frac{\partial f}{\partial x_i}: a \mapsto \frac{\partial f}{\partial x_i}(a)$ が第 j 座標 x_j に関し偏微分可能ならば、二階偏導関数

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}, & (i \neq j) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}(a), & (i = j) \end{cases}$$

が定義される。 $f_{ij}(x), f_{ii}(x)$ とも記す。同様に高階偏導関数も定義される。

定義 6.5 $k \in \mathbf{N}$ とする。開集合 $U \subset \mathbf{R}^n, f: U \rightarrow \mathbf{R}^m$ が k 階までの全ての偏導関数が存在して、 U 上連続であるとき、 f は A で C^k 級(k 回連続微分可能)であるという。任意回数微分可能な関数を C^∞ 級であるという。

定理 6.6 (Young) $f: U \rightarrow \mathbf{R}^m$ が C^k 級ならば、 f の k 階までの全ての偏導関数は偏微分の順序によらない。

定義 6.7 開集合 $U \subset \mathbf{R}^n$ で定義される $f: U \rightarrow \mathbf{R}^m$ が $x \in U$ で微分可能であるとは、 $h \in \mathbf{R}^n$ とし、ある $m \times n$ 行列 M が存在して

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x) - Mh}{|h|} = 0$$

となることである。 $f(x+h) - f(x) = Mh + o(|h|)$ と同値である。 M を微分係数といい、 $M = f'(x)$ などと記す。

命題 6.8 $f'(x) = \begin{pmatrix} f_1'(x) \\ \vdots \\ f_n'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$. ヤコビ行列 **Jacobian matrix** と呼ばれる。

定理 6.9 $f'(x)$ が C^1 級 $\Leftrightarrow f$ は微分可能で $f'(x)$ は連続

定理 6.10 (多変数の Taylor) $U \subset \mathbf{R}^n, f: U \rightarrow \mathbf{R}$ が C^k 級とする。二点 $x, x+h$ を結ぶ線分が U に含まれているとすれば、 $0 < \theta < 1$ となる実数 θ が存在して

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + \sum_{m=1}^{k-1} \frac{1}{m!} (d^m f)_x(h) + \frac{1}{k!} (d^k f)_{x+\theta h}(h) \\ (d^m f)_x(h) &= \sum_{1 \leq i_1, \dots, i_m \leq n} \frac{\partial^m f}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_m}}(x) h_{i_1} h_{i_2} \cdots h_{i_m} \end{aligned}$$

最適化で特に重要なのは、

$$f(x+h) = f(x) + Df(x+\theta h)h$$

$$f(x+h) = f(x) + Df(x)h + \frac{1}{2} h^T D^2 f(x+\theta h)h$$

$$f(x+h) = f(x) + Df(x)h + \frac{1}{2} h^T D^2 f(x)h + o(|h|^2)$$

である。 $Df(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$ は $\nabla f(x)$ とも記す。 $D^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \cdots & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$ はヘッセ行列 **Hessian matrix** といい、Young の定理(定理 6.6)より f が C^2 級なら $D^2 f(x)$ は対称行列となる。

7. 微分公式

一変数実数値関数に関しては、以下のことが知られている。 $e = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$ をネイピア数という。 a, α を定数, $a > 0, a \neq 1$ として

$$(x^\alpha)' = \alpha x^{\alpha-1}, (e^x)' = e^x, (\log_e x)' = (\log x)' = \frac{1}{x}, (\log_a x)' = \frac{1}{x \log_e a}$$

開集合 $U \subset \mathbf{R}^n$ 上で定義される $f, g : U \rightarrow \mathbf{R}^m$ が微分可能なとき,

$$(f(x) \pm g(x))' = f'(x) \pm g'(x)$$

$$\alpha \in \mathbf{R}, (\alpha f(x))' = \alpha f'(x)$$

$m = 1$ のとき (実数値関数であるとき) は,

$$(f(x) \cdot g(x))' = f'(x)g(x) + f(x)g'(x)$$

$g(x) \neq 0$ のとき,

$$\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)' = \frac{g(x)f'(x) - f(x)g'(x)}{(g(x))^2}$$

合成関数について考える。開集合 $U \subset \mathbf{R}^m, W \subset \mathbf{R}^n$ について $f : U \rightarrow \mathbf{R}^n, g : W \rightarrow \mathbf{R}^l, f(U) \subset W$ とする。両関数が微分可能なとき,

$$(g(f(x)))' = g'(f(x))f'(x)$$

しばしば **連鎖律 chain rule** という。

定理 7.1 (Euler) $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が定数 λ と $t \in \mathbf{Z}$ について

$$f(\lambda x) = \lambda^t f(x)$$

となっているとする。このとき、 f は **t 次同次 homogeneous of degree t** であるという。すると,

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) x_i = t f(x)$$

が成立する。

以降、 U は凸集合かつ開集合であるとし、 $f : U \rightarrow \mathbf{R}$ が C^2 級であるとする。但し、指示や特別な文脈がある場合はその限りでない。また、最適化に関する条件は殆どが Taylor の定理 (定理 5.5, 定理 6.10) から証明されるが、ここでは紙幅の都合から扱わない。Sundaram(1996) 参照。

8. 制約式のない最適化

制約式のない最適化問題は

$$\max_{x \in U} f(x)$$

というように定式化される。

定義 8.1 $f(x) \geq f(y)$ for all $y \in U \cap B(x; r)$ となる $r > 0$ が存在するとき、 $x \in U$ は f の **local maximum** であるという。 $f(x) > f(y)$ としたとき、**strict local maximum** という。 U で f が最大値をとるような点を **global maximum** という。 Minimum も同様に定義される。

定理 8.2 (FOC) 制約式のない場合を考える。 $x^* \in U$ が local maximum なら $Df(x^*) = 0$ となる。これを最適化の一階条件 **First Order Condition** という。

定理 8.3 (SOC) 制約式のないとき, 以下の条件を二階条件 **Second Order Condition** という.

- (A) f が local maximum を x で持つ $\Rightarrow D^2f(x)$ が負値半定符号.
- (a) f が local minimum を x で持つ $\Rightarrow D^2f(x)$ が正値半定符号.
- (B) $Df(x) = 0$ かつ $D^2f(x)$ が負値定符号 $\Rightarrow x$ は strict local maximum.
- (b) $Df(x) = 0$ かつ $D^2f(x)$ が正値定符号 $\Rightarrow x$ は strict local minimum.

9. 制約式のある最適化問題

$h_i: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}, i \in \{1, \dots, l\}$ について, $h_i(x) \geq 0, i \in \{1, \dots, l\}$ が不等式制約であるとしよう. このとき, 最適化問題は,

$$\begin{aligned} & \max_{x \in U} f(x) \\ & \text{subject to } x \in B = \{x \in U: h_i(x) \geq 0, i \in \{1, \dots, l\}\} \end{aligned}$$

というように定式化される.

定理 9.1 (KKT, FOC) 不等号制約式のある最適化問題を考える. $f: U \rightarrow \mathbf{R}, h_i: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}, i \in \{1, \dots, l\}$ が C^1 級であるとする. x^* が集合

$$B = \{x \in U: h_i(x) \geq 0, i \in \{1, \dots, l\}\}$$

上の f の local maximum であるとする. さらに, $h_i(x) = 0$ をみたす添え字の全体を $E \subset \{1, \dots, l\}$ として, $\text{rank} Dh_E(x^*) = \#E$ となるとき, 以下の条件を満たす $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_l^*) \in \mathbf{R}^n$ が存在する.

$$[\text{KT} - 1] \quad \lambda_j^* \geq 0 \text{ and } \lambda_j^* h_j(x^*) = 0 \text{ for } j = 1, \dots, l$$

$$[\text{KT} - 2] \quad Df(x^*) + \sum_{j=1}^l \lambda_j^* Dh_j(x^*) = 0$$

これらの条件は, 制約式のある最適化問題の FOC となっている.

10. 凹/凸関数と最適化

定義 10.1 $f: U \rightarrow \mathbf{R}$ について

- (a) subgraph $\text{sub}f = \{(x, y) \in U \times \mathbf{R}: f(x) \geq y\}$ が凸集合であるとき, 凹関数 **concave function** であるという.
- (b) epigraph $\text{epi}f = \{(x, y) \in U \times \mathbf{R}: f(x) \leq y\}$ が凸集合であるとき, 凸関数 **convex function** であるという.

命題 10.2 任意の $x, y \in U$ と任意の $\lambda \in (0, 1)$ について,

- (A) f が凹関数である. $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$
- (a) f が狭義凹関数 **strictly concave** である. $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) > \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$
- (B) f が凸関数である. $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$
- (b) f が狭義凸関数 **strictly convex** である. $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$

定理 10.3 $f: U \rightarrow \mathbf{R}$ が凹/凸関数で, (ルベーク測度が 0 となる集合上以外では), C^1 級である.

定理 10.4 $f: U \rightarrow \mathbf{R}$ について

- (A) f が凹関数である. \Leftrightarrow 任意の $x \in U$ についてヘッセ行列 $D^2f(x)$ が負値半定符号.
- (a) f が狭義凹関数である. \Leftrightarrow 任意の $x \in U$ についてヘッセ行列 $D^2f(x)$ が負値定符号.
- (B) f が凸関数である. \Leftrightarrow 任意の $x \in U$ についてヘッセ行列 $D^2f(x)$ が正値半定符号.
- (b) f が狭義凸関数である. \Leftrightarrow 任意の $x \in U$ についてヘッセ行列 $D^2f(x)$ が正値定符号.

定理 10.5 f は凹関数とする. 制約式のないときの f の local maximum は global maximum である. また,

global maximum となる点の集合は、空集合であるかと凸集合である。とくに狭義凹関数に関しては、空集合か一元集合となる。

定理 10.6 f は凹関数とする。 x が制約のないときの maximum となることと、 $Df(x) = 0$ は同値である。

定理 10.7 (KKT) $\max_{x \in U} f(x)$ subject to $x \in B = \{x \in U: h_i(x) \geq 0, i \in \{1, \dots, l\}\}$ という 9 節で考えた問題について、 $f: U \rightarrow \mathbf{R}, h_i: U \rightarrow \mathbf{R}, i \in \{1, \dots, l\}$ が全て凹関数であるとする。 $h_i(\bar{x}) > 0$ for all $i \in \{1, \dots, l\}$ となる \bar{x} が U にあると仮定する。定理 9.1 の [KT-1, 2] を満たす x^* と $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_l^*) \in \mathbf{R}^n$ が存在すると、 x^* は最適化問題の解である。

11. 準凹/凸関数と最適化

定義 11.1 $f: U \rightarrow \mathbf{R}$ について、任意の $a \in \mathbf{R}$ に対し

- (a) 上位集合 upper-contour set $U_f(a) = \{x \in U: f(x) \geq a\}$ が凸集合であるとき、**準凹関数 quasi-concave function** であるという。
- (b) 下位集合 lower-contour set $L_f(a) = \{x \in U: f(x) \leq a\}$ が凸集合であるとき、**準凸関数 quasi-convex function** であるという。

命題 11.2 任意の $x, y \in U$ と任意の $\lambda \in (0, 1)$ について、

- (A) f が準凹関数である。 $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \min\{f(x), f(y)\}$
- (a) f が狭義準凹関数である。 $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) > \min\{f(x), f(y)\}$
- (B) f が準凸関数である。 $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \max\{f(x), f(y)\}$
- (b) f が狭義準凸関数である。 $\Leftrightarrow f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \max\{f(x), f(y)\}$

命題 11.3 $C_k(x) = \begin{pmatrix} 0 & f_1(x) & \cdots & f_k(x) \\ f_1(x) & f_{11}(x) & \cdots & f_{1k}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_k(x) & f_{k1}(x) & \cdots & f_{kk}(x) \end{pmatrix}, \text{ for } k = 1, \dots, n \text{ とする.}$

- (a) f が準凹関数なら、 $(-1)^k |C_k(x)| \geq 0$ for $k = 1, \dots, n$.
- (b) $(-1)^k |C_k(x)| > 0$ for $k = 1, \dots, n$ なら、 f は準凹関数。

定理 11.4 f が狭義準凹関数であるとする。そのとき、制約式のないときの f の local maximum は global maximum になる。また、global maximum となる点は空集合か一元集合である。

定理 11.5 (KKT) $f: U \rightarrow \mathbf{R}, h_i: U \rightarrow \mathbf{R}, i \in \{1, \dots, l\}$ が全て準凹関数であるとする。定理 9.1 の [KT-1, 2] を満たす x^* と $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_l^*) \in \mathbf{R}^n$ が存在すると、 x^* は次の 2 条件のいずれかを満たせば最適化問題の解である。

$$[\text{QC}-1] \quad Df(x^*) \neq 0$$

$$[\text{QC}-2] \quad f \text{ が凹関数}$$

参考文献

- Debreu, G. (1952) Definite and Semidefinite Quadratic Forms, *Econometrica* 20 (2), pp.295-300
- Sundaram, R. K. (1996), *A First Course in Optimization Theory*. Cambridge University Press.
- 神谷和也・浦井憲 (1996), 『経済学のための数学入門』東京大学出版会。
- 齋藤正彦 (1966), 『線型代数入門』東京大学出版会。
- 杉浦光夫 (1980), 『解析入門 I』東京大学出版会。
- 二階堂副包 (1960), 『現代経済学の数学的方法—位相数学による分析入門』。
- 松坂和夫 (1968), 『集合・位相入門』岩波書店。