2023 年度　応用統計学

大阪公立大学 大学院理学研究科 数学専攻

今野　良彦

2024 年 2 月 6 日

書き加える事項のメモ

1. 概要をキチンと書く (0615).
2. 定理の使用例を少なくとも一つのせる (0615) .

目 次

はじめに

この講義録は 2023 年度応用統計学のためのものである．Krosese, D.P. *et. al* による『Data Science and Machine Learning (2020)』[1]の第 2 章から 6 章を参考にした.

2024 年 1 月 13 日更新

[1]東京化学同人より『データサイエンスと機械学習 (2022 金森敬文監訳)』と翻訳も出版されている.

目 次

記号について

ここに掲げる規則は Jordan Stoyanov (2023, IMS Bulletin **52**, Issue 4, 25-26) の借用である.

3 つの基本規則

- 規則 1: ひとつの項目や対象に対してひとつの文字か記号を使用すること.
- 規則 2: 対象の同じグループに対しては同じ字体を使用すること.
- 規則 3: 対象の異なるグループに対しては異なる字体を使用すること.

派生規則

- 確率, 確率分布, 期待値, 分散, 共分散には `\mathsf` を使用する. すなわち, Pr, P, E, Var, Cov のように記す.
- 重要な空間には `\mathbb` を使用する.
- 集合族には `\mathcal` を使用する.
- 略称/略語は「p.m.f.」等のように書く.
- 分布名は `\mathsf` を使用する. たとえば, $\mathsf{Poi}(\lambda)$ で母数 $\lambda > 0$ の Poisson 分布を表す.
- 母数と母数空間等の未知のものは Greek letters を使用する.
- ベクトルと行列は小文字と大文字の `\mathbf` を使用する.
- 内部等の数学の概念は `\mathrm` を使用する. たとえば, 母数空間 $\mathsf{\Theta}$ の内部を $\mathrm{int}\mathsf{\Theta}$ (`\mathrm{int}\mathsf{\Theta}`) と書く.

記号一覧

記号	説明
$\mathbb{N}$	自然数全体の集合
$\mathbb{Z}$	整数全体の集合
$\mathbb{Q}$	有理数全体の集合
$\mathbb{R}$	実数全体の集合
$\mathbb{R}^n$	有限 n 個の実数空間の直積集合
$\mathbb{C}$	複素全体の集合
$\mathbb{R}^n$	有限 n 個の実数空間の直積集合
c.d.f.	累積分布関数 (cumulative distribution function).
p.d.f.	確率密度関数 (probability density function)
p.m.f.	確率関数/確率質量関数 (probability mass function)
$\overline{A}$	集合 A の閉包. すなわち, A を含む最小の閉集合.
$\mathsf{supp}(f)$	実数値関数 f の支え/台. $\{x \in \mathbb{R};\, f(x) > 0\}$ を含む閉包.
$\mathrm{Mat}(n, m; \mathbb{R})$	n 行 m 列の実行列全体のなす集合. $\mathrm{Mat}(n, n; \mathbb{R})$ を $\mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ と書く.
$\mathrm{Sym}(n, \mathbb{R})$	n 行 n 列の対称行列全体のなす集合.
$\mathrm{Sym}^{+}(n, \mathbb{R})$	n 行 n 列の半正値対称行列全体のなす集合.
$\mathrm{Sym}^{++}(n, \mathbb{R})$	n 行 n 列の正値対称行列全体のなす集合.
$\mathrm{Herm}(n, \mathbb{C})$	n 行 n 列のエルミート行列全体のなす集合.
$\mathrm{Herm}^{+}(n, \mathbb{C})$	n 行 n 列の半正定値エルミート行列全体のなす集合.
$\mathrm{Herm}^{++}(n, \mathbb{C})$	n 行 n 列の正定値エルミート行列全体のなす集合.
$\mathbf{I}_n$	n 次の単位行列
$\mathbf{0}_n$	$\mathbb{R}^n$ の零ベクトル
$\mathbf{A}^\top$	m 行 n 列の行列 $\mathbf{A}$ の転置行列.
$\mathbf{A}^{-1}$	正方行列 $\mathbf{A}$ の逆行列
$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$	σ 集合族.

第1章　統計的学習の考え方

1.1　導入

sec:a1-1

データサイエンスにおいて, データの視覚化や整理[1]は重要であるが, 主な課題はデータの数理的な解析である. データの不確実性 (ランダム性) のモデル化や定量化を目的とするとき, これらのことを扱う分野を**統計的推測/統計的学習**といい, 大規模データを用いた予測に重点をおく分野を**機械学習**または**データマイニング**という. 何に重きをおくかの違いで, ふたつの文化[2]が存在する.

データのモデリングにはふたつの目的がある.

(1) ある変量の将来の値を正確に予測すること.

(2) データの中にある未知の面白いパタンを発見すること.

この目的を達成するために, 数理科学の 3 つの重要な支柱からの知識を利用する.

(1) **関数の近似**: データに対して数理モデルを作ることは, ある変数が他の変数にどのように依存/関係しているかを理解することである. 変数間の関連を表現する最も自然なやり方は, 関数もしくは写像を用いることである. この関数ないしは写像が解析者[3]には完全には特定できないとき, データに基づきこの関数の近似を試みる.

(2) **最適化**: 統計的モデル[4]が与えられたとき, この族の中で最もよい確率分布をみつけたい. このために, 効率的な探索と最適化の手続きが必要となる. 最適化のステップは観測データへの関数のあてはめや校正と考えることができる. このステップでは, 最適化アルゴリズムや効率的なプログラミングが必要となる.

---

[1]いわゆる記述統計学の重要な内容.

[2]Breiman (2001): Statist Sci **16**(3), pp. 199-231 を参照のこと.

[3]統計家, データサイエンティストなどデータを分析する人々の総称として解析者とよぶことにする.

[4]統計的推測では, 確率分布の族を統計的モデルという. 「モデル」という言葉が何をさしているかを文脈から正確に理解することが大切である.

(3) **確率論と統計的推測**: モデルをあてはめるデータはランダムな過程の実現値とみなす．ここでは, 分布や確率が重要になる．将来の予測を行うときに内包する不確実性を定量化するために, 確率論や統計的推測論の知識が肝要である．

多次元のデータを扱う場合には, これらの知識に加えて, 線型代数の知識が重要となる．

1.2 教師あり学習と教師なし学習

sec:a1-2

入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ が与えられたとき, 出力 y の予測をすることが機械学習の主な目的である．たとえば, $\boldsymbol{x}$ をデジタル化された署名データとし, y を 2 値の出力で, 署名が「本人のもの」か「本人のものではない」のいずれかを表すとする．別の例では, 入力 $\boldsymbol{x}$ は妊婦の体重と喫煙嗜好とし, 出力 y を生まれてくる新生子の体重とする．入力 $\boldsymbol{x}$ による出力 y の予測値を関数 g を用いて, $g(\boldsymbol{x})$ と表す．g の定義域は, 入力 $\boldsymbol{x}$ の取りうる値の集合を含むものであり, 終域は y の取りうる値の集合である．関数 g のことを**予測関数**とよぶことにする．関数 g は, データがもつランダム性を除いた入力 $\boldsymbol{x}$ と出力 y の関連性についての情報を内包するものである．出力 y が実数値をとるとき, 出力から入力を予測することを**回帰問題**といい, 出力 y が 2 値もしくは有限集合に値をとるとき, **判別問題**[5]という．

入力 $\boldsymbol{x}$ による出力 y の予測値を $\widehat{y} := g(\boldsymbol{x})$ と書いたとき, この予測値の精度を**損失関数** $\mathsf{Loss}(y, \widehat{y})$ で測る．損失関数は非負値関数で, 精度がわるいほどおおきな値をとるものである．2 値の判別問題では, 損失関数を **0-1 損失**とすることが基本的である．すなわち

$$\mathsf{Loss}(y, \widehat{y}) = \mathbb{1}\{y \neq \widehat{y}\} = \begin{cases} 1 & (y \neq \widehat{y}) \\ 0 & (y = \widehat{y}) \end{cases}$$

である．後で 2 値の判別問題でも別の損失関数を考えることになる．回帰問題では, 2 乗損失

$$\mathsf{Loss}(y, \widehat{y}) = \bigl(y - \widehat{y}\bigr)^2$$

が最もよく使われる．

すべての入力と出力の組 $(\boldsymbol{x}, y)$ に対して正確な予測をすることができる予測関数をみつけることは一般に不可能である．これはデータのもつランダム性に由来する．さきほどの例において同じ値の入力に対して異

[5]分類問題ともいう．

なる出力をもつ組が存在することを考えればよい．すなわち各 $(\boldsymbol{x}, y)$ はある同時分布に従う確率ベクトル $(\boldsymbol{X}, Y)$ の実現値と考えることにする．このことで予測関数 g の精度を**期待損失** (**誤差**/**リスク**) で定量化する．すなわち

$$\mathsf{Err}(g) := \mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}\big(Y, g(X)\big)\big]$$

である．ただし期待値 $\mathsf{E}[\cdot]$ は $(\boldsymbol{X}, Y)$ の同時分布に関するものである．$0-1$ 損失を用いた判別問題では, 誤差は誤差判別の確率となる．すなわち

$$\mathsf{Err}(g) = \mathsf{Pr}\big[Y \neq g(\boldsymbol{X})\big]$$

である．この文脈では予測関数のことを**判別器**とよぶ．

確率ベクトル $(\boldsymbol{X}, Y)$ の同時分布と損失関数が与えられると, 最良の判別器を求めることができる．$c \in \mathbb{N}$, $c \geq 2$ とし, Y は $\{0, 1, \ldots, c-1\}$ に値を取るとする．このとき

$$g^* \in \arg\min_g \mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}(Y, g(\boldsymbol{X}))\big]$$

を誤差を最小とする判別器とする．すなわち, 任意の判別器 g に対して

$$\mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}(Y, g(\boldsymbol{X}))\big] \geq \mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}(Y, g^*(\boldsymbol{X}))\big]$$

が成立している．

$X = \boldsymbol{x}$ が与えられたとき, $g^*(\boldsymbol{x})$ を具体的に求めてみる．そのために, $X = \boldsymbol{x}$ が与えられたときの Y の条件付き p.d.f. (または p.m.f.) を $\mathsf{p}^*(y|\,\boldsymbol{x})$ と書く．すなわち

$$\mathsf{p}^*(y|\,\boldsymbol{x}) = \mathsf{Pr}\big(Y = y\big|\,\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\big)$$

である．このとき

ここでは p は回帰関数なので, そのままの字体. 2023/08/24 記.

$$\mathsf{E}[\mathsf{Loss}(Y, g(\boldsymbol{X}))] = \mathsf{Pr}[Y \neq g(\boldsymbol{X})] = 1 - \mathsf{Pr}[Y = g(\boldsymbol{X})]$$

なので

$$\begin{aligned} g^*(\boldsymbol{x}) &= \arg\min_{y\in\{0,1,\ldots,c-1\}} \mathsf{E}[\mathsf{Loss}(Y, y)|\,\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}] \\ &= \arg\min_{y\in\{0,1,\ldots,c-1\}} \big\{1 - \mathsf{Pr}(Y = y|\,\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})\big\} \\ &= \arg\max_{y\in\{0,1,\ldots,c-1\}} \mathsf{Pr}(Y = y|\,\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) \\ &= \arg\max_{y\in\{0,1,\ldots,c-1\}} \mathsf{p}^*(y|\,\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$

となる．上式の 3 番目の等号は $1 - \mathsf{Pr}(Y = y|\,\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$ を最小にする y の値は $\mathsf{Pr}(Y = y|\,\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x})$ を最大にする y の値に一致することからわかる．回帰問題で 2 乗損失を用いたとき最適の予測関数 g^* を**回帰関数**とよぶ．

thm:a1-1

定理 1.1. 回帰問題において 2 乗損失 $\mathsf{Loss}(y, \widehat{y}) = \left(y - \widehat{y}\right)^2$ を用いる．$\mathsf{E}[Y^2] < \infty$ を仮定する．このとき最適予測関数 g^* は次で与えられる．

$$g^*(\boldsymbol{x}) = \mathsf{E}[Y \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}].$$

すなわち $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ を与えたときの Y の条件付き期待値である．

Proof. $g^*(\boldsymbol{x}) = \mathsf{E}[Y \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}]$ とする．任意の (2 乗可積分な) 関数 g を考える．すると

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\left[\left\{Y - g(\boldsymbol{X})\right\}^2\right] &= \mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X}) + g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}^2\right] \\
&= \mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}^2\right] + \underbrace{\mathsf{E}\left[\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}^2\right]}_{\geq 0} \\
&\quad + 2\,\mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}\right] \\
&\geq \mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}^2\right] + 2\,\mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}\right]
\end{aligned}$$

となる．上の不等式の等号は $g(\boldsymbol{x}) = g^*(\boldsymbol{x})$ のとき成立する． しかし

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}\right] &= \mathsf{E}\left[\mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}\middle|\boldsymbol{X}\right]\right] \\
&= \mathsf{E}\left[\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}\mathsf{E}\left[Y - g^*(\boldsymbol{X})\middle|\boldsymbol{X}\right]\right] \\
&= \mathsf{E}\left[\{g^*(\boldsymbol{X}) - g(\boldsymbol{X})\}\underbrace{\left\{\mathsf{E}\left[Y\middle|\boldsymbol{X}\right] - g^*(\boldsymbol{X})\right\}}_{=0}\right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

となる． よって

$$\mathsf{E}\left[\left\{(Y - g(\boldsymbol{X})\right\}^2\right] \geq \mathsf{E}\left[\{Y - g^*(\boldsymbol{X})\}^2\right]$$

がわかる． □

定理 thm:a1-1 1.1 により $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ を与えたときの出力 Y を次のように表現できる．

$$Y = g^*(\boldsymbol{x}) + \epsilon(\boldsymbol{x}).$$

すると

$$\mathsf{E}[\epsilon(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}] = \mathsf{E}\left[Y - g^*(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\right] = \mathsf{E}[Y \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}] - g^*(\boldsymbol{x}) = 0.$$

さらに

$$\mathsf{Var}[\epsilon(\boldsymbol{X}) \mid \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}] =: \nu^2(\boldsymbol{x})$$

と書ける．$\nu(\boldsymbol{x})$ は未知であり $\epsilon(\boldsymbol{x})$ の分布は平均が 0 であること以外は未知である．

一般に, 最適予測関数 g^* は $(\boldsymbol{X}, Y)$ の同時分布に依存し, その分布は未知である. したがって g^* を実際の問題では用いることができない. $(\boldsymbol{X}, Y)$ の同時分布 $\mathsf{p}_{(X,Y)}(\boldsymbol{x}, y)$ に従う n 個の確率変数列を

$$\mathfrak{T}_n = \{(\boldsymbol{X}_1, Y_1), (\boldsymbol{X}_2, Y_2), \ldots, (\boldsymbol{X}_n, Y_n)\}$$

と書き $\mathfrak{T}_n$ を**訓練集合**という. この訓練集合の実現値を

$$\mathfrak{t}_n = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$$

と書く.

目標は訓練集合 $\mathfrak{T}_n$ が与えられたとき, 未知の最適予測関数 g^* を推定/学習することである. 訓練集合 $\mathfrak{T}$ に基づく g^* の近似/推定量を $g_{\mathfrak{T}}$ と書くこと[6]にする. ここで $g_{\mathfrak{T}}$ はランダムな関数であることに注意せよ. 実現値 $\mathfrak{t}_n$ により計算されたものが実現値になり, $g_{\mathfrak{t}}$ と書く. 訓練集合 $\mathfrak{T}_n$ により未知の関数

$$g^* : \boldsymbol{x} \mapsto \widehat{y}$$

を学習する学習器が $g_{\mathfrak{T}}$ である. 教師が真の関係に基づき n 個の出力と入力の対 $\mathfrak{T}_n$ を見本として与え, その見本で学習器 $g_{\mathfrak{T}}$ を訓練する. 新しい入力 $\boldsymbol{X}$ に対して教師によって与えられていない出力 Y を $g_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{X})$ で予測することになる. この設定を**教師あり学習**といい, 入力のことを**説明変数**, 出力のことを**応答変数**ということもある.

以下の記述が妥当かどうかを確認すること. 2023/08/24 記.

一方, **教師なし学習**では変数に説明変数と応答変数の区別はない. データの同時分布 $\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x}, y)$ を学習することになる. この変数を $(\boldsymbol{X}, Y)$ と書くことにする. $(\boldsymbol{X}, Y)$ の分布 p^* の推定量 p に対して誤差は

$$\mathsf{Err}(\mathsf{p}) = \mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}\big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{X}, Y), \mathsf{p}(\boldsymbol{X}, Y)\big)\big]$$

となる. 教師なし学習の例としては, コンビニエンスストアの客の購買行動の解析を考える. 100 個の商品があるとする. ある客が, $i\,(i = 1, 2, \ldots, 100)$ 番目の商品を買うか買わないの結果を $0, 1$ に対応させる. 客の購買パタンは $\boldsymbol{x} \in \{0, 1\}^{100}$ となる. 訓練集合の実現値 $\mathfrak{t}_{100} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, , \ldots, \boldsymbol{x}_{100}\}$ に基づいて, 客の購買パタンを見つけたい. 教師なし学習の手法としては, **クラスタリング**, **主成分分析**, **カーネル密度推定**, **決定木**等がある.

以下の節では, 教師あり学習についてみていくことにする.

1.3 教師あり学習における訓練誤差と汎化誤差

sec:a1-3

以下では X を太文字 $\boldsymbol{X}$ にすべきか? 2023/08/24 記.

任意の予測関数 (以後は学習器とよぶことにする.) g が与えられたとき**予測誤差**を

$$\mathsf{Err}(g) := \mathsf{E}\bigl[\mathsf{Loss}\bigl(Y,\, g(\boldsymbol{X})\bigr)\bigr]$$

で定義する. これを求めることは解析者は一般にはできない. なぜならば統計家にとって $(\boldsymbol{X},\, Y)$ の同時分布は未知だからである. 学習器 g の予測誤差 $\mathsf{Err}(g)$ を近似/推定するために訓練集合 $\mathfrak{T}_n$ に基づく**訓練誤差**

$$\widehat{\mathsf{Err}} := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mathsf{Loss}\bigl(Y_j,\, g(\boldsymbol{X}_j)\bigr)$$

を用いる. 訓練集合 $\mathfrak{T}_n$ は $(\boldsymbol{X},\, Y)$ の同時分布に独立同一に従う確率変数列なので

$$\mathsf{Err}(g) = \mathsf{E}\bigl[\widehat{\mathsf{Err}}(g)\bigr]$$

が成立していることが簡単にわかる. すなわち $\widehat{\mathsf{Err}}(g)$ は $\mathsf{Err}(g)$ の不偏推定量である.

最適予測関数を g^* を近似/学習/推定するために, 学習器の候補の集まりである関数族を $\mathcal{G}$ を選択する. すなわち, 訓練誤差を最小にする学習器をみつけることを目指す. 新しいデータ $\boldsymbol{X}$ の学習器の予測精度を測る尺度を導入する. 訓練集合の実現値 $\mathfrak{t}_n$ を固定する. すなわち, $(\boldsymbol{X}_j,\, Y_j) = (\boldsymbol{x}_j,\, y_j)\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$ とする.

訓練集合の実現値 $\mathfrak{t}_n$ の基づく学習器 $g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}$ を

$$g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}} \in \operatorname*{arg\,min}_{g\in\mathcal{G}} \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mathsf{Loss}\bigl(y_j,\, g(\boldsymbol{x}_j)\bigr)$$

で定義する. $(\boldsymbol{X},\, Y)$ を訓練集合 $\mathfrak{T}_n$ とは独立に同時分布 $\mathsf{p}_{(X,Y)}(\boldsymbol{x},\, y)$ に従う確率ベクトルとしたとき学習器 $g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}$ の**汎化誤差** $\mathsf{Err}\bigl(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\bigr)$ を

$$\mathsf{Err}\bigl(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\bigr) := \mathsf{E}\bigl[\mathsf{Loss}\bigl(Y,\, g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\bigr)\bigr]$$

で定義する. ただし期待値 $\mathsf{E}[\,\cdot\,]$ は $(\boldsymbol{X},\, Y)$ の同時分布 $\mathsf{p}_{(X,Y)}(\boldsymbol{x},\, y)$ に関して取ったものである.

ランダムな訓練集合 $\mathfrak{T}_n$ に基づく学習器 $g_{\mathfrak{T}}^{\mathcal{G}}$ の汎化誤差 $\mathsf{Err}\bigl(g_{\mathfrak{T}}^{\mathcal{G}}\bigr)$ はランダムになるので, $\mathfrak{T}_n$ の同時分布に関して期待値をとったものを**期待汎化誤差**という. すなわち

$$\mathsf{E}\bigl[\mathsf{Err}\bigl(g_{\mathfrak{T}}^{\mathcal{G}}\bigr)\bigr] = \mathsf{E}\bigl[\mathsf{Loss}\bigl(Y,\, g_{\mathfrak{T}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\bigr)\bigr]$$

である. 左辺の $\mathsf{E}[\,\cdot\,]$ は $\mathfrak{T}_n$ の同時分布に関する期待値であり, 右辺の $\mathsf{E}[\,\cdot\,]$ は $\mathfrak{T}_n$ と $(\boldsymbol{X},\, Y)$ の同時分布に関する期待値である.

[6] 本来ならば, $g_{\mathfrak{T}_n}$ と書くべきだろうが, 煩雑になるので, 簡単に $g_{\mathfrak{T}}$ と書くことにした.

re:a1-2 **注意 1.2.** (多項式回帰) (U, Y) の同時分布を以下のように定める．$U \sim \mathsf{Unif}(0, 1)$ とし $U = u\,(0 < u < 1)$ が与えられたときの Y の条件付き分布は $\mathsf{N}(\theta, \sigma^2)$ とする．ただし，

$$\theta = 10 - 140u + 400u^2 - 250u^3, \quad \sigma^2 = 25$$

である．2 乗損失を用いたとき最良予測関数は

$$g^*(u) = \mathsf{E}[Y \,|\, U = u] = 10 - 140u + 400u^2 - 250u^3$$

となる．これは以下の議論からわかる．

$$\begin{aligned}
\mathsf{Err}(g) &= \mathsf{E}[(Y - g(U))^2] = \mathsf{E}[\{Y - \mathsf{E}[Y|U] + \mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}^2] \\
&= \mathsf{E}[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}^2] + \mathsf{E}[\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}^2] \\
&\quad + 2\mathsf{E}[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}] \\
&= \mathsf{E}[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}^2] + \mathsf{E}[\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}^2] \\
&\quad + 2\mathsf{E}\left[\mathsf{E}\left[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}\{\mathsf{E}[Y|U] + g(U)\}\,\middle|\, U\right]\right] \\
&= \mathsf{E}[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}^2] + \mathsf{E}[\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}^2] \\
&\quad + 2\mathsf{E}\left[\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}\underbrace{\mathsf{E}\left[Y - \mathsf{E}[Y|U]\,\middle|\, U\right]}_{=0\,(\because \text{注 } \overset{\texttt{re:0-2-26}}{\text{A.44(2)}})}\right] \\
&= \mathsf{E}\big[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}^2\big] + \underbrace{\mathsf{E}\big[\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}^2\big]}_{\geq 0\,(\because \text{注 } \overset{\texttt{re:0-2-2}}{\text{A.30(2)}})} \\
&\geq \mathsf{E}\big[\{Y - \mathsf{E}[Y|U]\}^2\big]
\end{aligned}$$

となり，等号成立は $\mathsf{E}\big[\{\mathsf{E}[Y|U] - g(U)\}^2\big] = 0$ のときある．一般に 2 乗可積分な確率変数 W に関して $\mathsf{E}[W^2] = 0$ ならば，$\mathsf{Pr}(W = 0) = 1$ であること[7]に注意すると $g^*(u) = \mathsf{E}[Y \,|\, U = u]$ がわかる．

$d \in \mathbb{N}$, $d \geq 2$ とする．$d - 1$ 次元の u の多項式がなす関数族を考える．

$$\mathcal{G}_d := \{g(u) = \beta_0 + \beta_1 u + \beta_2 u^2 + \cdots + \beta_{d-1} u^{d-1};\, \beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_{d-1} \in \mathbb{R}\}.$$

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_{d-1})^\top, \quad \boldsymbol{x} = (1, u, u^2, \ldots, u^{d-1})^\top$$

とおくと

$$\mathcal{G}_d = \{g(u) = \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta};\, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d\}$$

と書ける．$d \geq 4$ とする．

$$\boldsymbol{\beta}^* = (10, -140, 400, -250, 0, \ldots, 0)^\top$$

[7] $\mathsf{E}[W] = 0$ であっても $\mathsf{Pr}(W = 0) \neq 1$ である．しかし，$\mathsf{E}[W^2] = 0$ ならば $\mathsf{Pr}(W = 0) = 1$ は正しい主張である．この主張の証明はすこし技術的な議論が必要にある．

としたとき $g^*(u) = \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta}^*$ が最良予測関数となる．訓練データを

$$(u_1,\, y_1),\, (u_2,\, y_2),\, \ldots,\, (u_n,\, y_n)$$

とし

$$\boldsymbol{x}_j = (1,\, u_j,\, u_j^2,\, \ldots,\, u_j^{d-1})^\top$$

と書く．これらを行列とベクトルで表記する．

$$\underbrace{\mathbf{X}}_{n\times d\text{ 行列}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top \\ \boldsymbol{x}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & u_1 & u_1^2 & \cdots & u_1^{d-1} \\ 1 & u_2 & u_2^2 & \cdots & u_2^{d-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & u_n & u_n^2 & \cdots & u_n^{d-1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

とおく．すると学習器 $g(u) = \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta}$ の訓練誤差は

$$\widehat{\mathsf{Err}}(g) = \frac{1}{n}\left|\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right|_{2,\,n}^2$$

となる．ただし $|\cdot|_{2,\,n}$ は $\mathbb{R}^n$ の Euclid ノルムである．すると

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} \in \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\beta}\in\mathcal{G}_d}\left|\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\right|_{2,\,n}^2$$

とすれば $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ は最小 2 乗推定量となる．$\mathbf{X}$ の列で張られた線型部分空間を $\mathrm{span}(\mathbf{X})$ と書く．$\mathrm{span}(\mathbf{X})$ への射影行列を $\mathbf{P}$ とすれば $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ は

$$\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{P}\boldsymbol{y}$$

をみたすことがわかる．すると $d\times n$ の行列 $\mathbf{X}^\dagger$ が存在[8]して

$$\mathbf{P} = \mathbf{X}\mathbf{X}^\dagger$$

と書けることが知られている．したがって

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^\dagger \boldsymbol{y}$$

と書けることがわかる．よって

$$g_{\mathrm{t}}^{\mathcal{G}_d}(u) = \boldsymbol{x}^\top \widehat{\boldsymbol{\beta}}, \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^\dagger \boldsymbol{y}$$

となる．特に $\mathbf{X}^\top\mathbf{X}$ が正則のとき

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\mathbf{X}^\top\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^\top \boldsymbol{y}$$

となる． □

[8] $\boldsymbol{X}^\dagger$ は $\mathbf{X}$ の Moore-Penrose の一般逆行列と呼ばれるものである．補遺の chap:sig B 章を参照のこと．

1.4 教師あり学習における兼ね合い (trade-off)

sec:a1-4

教師ありの機械学習において汎化誤差

$$\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) = \mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}\big(Y,\, g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\big)\big]$$

もしくは

$$\mathsf{E}\big[\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big)\big] = \mathsf{E}\big[\mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}\big(Y,\, g_{\mathfrak{T}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\big)\big]\big]$$

の最小化問題を考える．この問題を解くために関数族 $\mathcal{G}$ を適切に選択することが肝要である．選択の最には以下の点を考慮する必要がある．

- 関数族の複雑さ (最適予測関数を近似するために十分な豊かさを持つことが望ましい．最適予測関数を含む族であればなおさらよい)．
- 最適問題
  $$g_{\mathfrak{T}}^{\mathcal{G}} \in \arg\min_{g\in\mathcal{G}} \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mathsf{Loss}\big(Y_j,\, g(\boldsymbol{X}_j)\big)$$
  を解く学習器の訓練が容易である．
- 訓練誤差
  $$\widehat{\mathsf{Err}}(g) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mathsf{Loss}\big(Y_j,\, g(\boldsymbol{X}_j)\big)$$
  が予測誤差
  $$\mathsf{Err}(g) = \mathsf{E}\big[\mathsf{Loss}\big(Y,\, g(\boldsymbol{X})\big)\big]$$
  の推定量としてよい精度をもっているか?
- 特徴量のタイプは何か?

適切な関数族 $\mathcal{G}$ の選択には衝突する因子間の兼ね合いが伴う．簡単な関数族からの学習器の訓練は容易であるが, 最良予測関数 g^* をうまく近似/推定していないかもしれない．逆に g^* を含むかもしれない豊かな関数族 $\mathcal{G}$ からの学習器の訓練には計算コストがかかる．関数族の複雑さ, 計算コスト, 推定精度の関係を理解するために汎化誤差を複数の因子に分解する．分解には二通りある．ひとつは近似と推定精度の兼ね合いを説明するもので, 他方はバイアスと分散の兼ね合いを説明する分解である．

まず近似と推定誤差の兼ね合いを理解するための分解を考える．

$$\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) = \mathsf{Err}^* + \underbrace{\mathsf{Err}\big(g^{\mathcal{G}}\big) - \mathsf{Err}^*}_{\text{近似の精度}} + \underbrace{\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) - \mathsf{Err}\big(g^{\mathcal{G}}\big)}_{\text{推定の精度}}. \tag{1.1}$$

eq:aa1-1

ただし

$$\mathsf{Err}^* = \mathsf{Err}\big(g^*\big), \quad g^* \in \arg\min_{g} \mathsf{Err}(g), \quad g^{\mathcal{G}} \in \arg\min_{g\in\mathcal{G}} \mathsf{Err}(g).$$

eq:aa1-1 (1.1) の右辺の第 2 項目を**近似の精度**といい, 誤差の下限と関数族 $\mathcal{G}$ の中の最適な予測関数の誤差との差である. 関数族 $\mathcal{G}$ の選択と $\mathcal{G}$ 上の $\mathsf{Err}(g)$ の最小化問題は関数解析と数値解析の問題である. 訓練データ $\mathfrak{t}$ は関わらない. 近似精度をよくするためには, 関数族 $\mathcal{G}$ を大きくとればよい. 第 3 項は統計的誤差になる. これは訓練データにかかわるものである. $g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}$ がよりうまく $g^{\mathcal{G}}$ を推定するかどうかである. 標本数 n が無限大に近づくとこの精度は 0 に収束する. 近似と推定の精度をよくするためには互いに相反することが要求される. 推定精度をよくするためには $\mathcal{G}$ を小さくすればよい. 一方, 近似精度をよくするためには関数族 $\mathcal{G}$ を大きく取ればよい. したがって兼ね合いが肝要となる.

2 乗損失を考える. この場合には汎化誤差は

$$\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) = \mathsf{E}\big[\big\{Y - g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\big\}^2\big]$$

である. 最良予測関数は

$$g^*(\boldsymbol{X}) = \mathsf{E}[Y \,|\, \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}]$$

であることを思い出そう. すると以下のようになる.

(1) 誤差の下限: $\mathsf{Err}^* = \mathsf{E}\big[\big(Y - g^*(\boldsymbol{X})\big)^2\big]$.

(2) 第 2 因子の近似精度: $\mathsf{Err}\big(g^{\mathcal{G}}\big) - \mathsf{Err}\big(g^*\big) = \mathsf{E}\big[\big(g^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^*(\boldsymbol{X})\big)^2\big]$.

(3) 第 3 因子の推定精度: $\mathcal{G} = \{g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{\beta};\ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d\}$ としたとき,

$$\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) - \mathsf{Err}\big(g^{\mathcal{G}}\big) = \mathsf{E}\big[\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\big)^2\big].$$

よって線型関数族 $\mathcal{G}$ に対して

$$\begin{aligned}\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) &= \mathsf{E}\big[\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - Y\big)^2\big]\\ &= \mathsf{Err}^* + \mathsf{E}\big[\big(g^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^*(\boldsymbol{X})\big)^2\big] + \mathsf{E}\big[\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X})\big)^2\big]\end{aligned}$$

となる.

次に 2 乗損失の場合についてバイアスと分散の兼ね合いについて説明する. まず

$$\begin{aligned}\mathsf{Err}\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}\big) &= \mathsf{E}\big[\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - Y\big)^2\big]\\ &= \mathsf{E}\big[\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^*(\boldsymbol{X}) + g^*(\boldsymbol{X}) - Y\big)^2\big]\\ &= \mathsf{E}\big[\big(Y - g^*(\boldsymbol{X})\big)^2\big] + \mathsf{E}\big[\big(g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^*(\boldsymbol{X})\big)^2\big]\\ &= \mathsf{Err}^* + \mathsf{E}\big[D^2(\boldsymbol{X},\, \mathfrak{t})\big]\end{aligned}$$

であることに注意する. ただし

$$D(\boldsymbol{X},\, \mathfrak{t}) = g_{\mathfrak{t}}^{\mathcal{G}}(\boldsymbol{X}) - g^*(\boldsymbol{X})$$

とおいた. さらに $D(\boldsymbol{X},\,\mathrm{t})$ の t に $\mathfrak{T}$ を代入したものを

$$D(\boldsymbol{X},\,\mathfrak{T}) = g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{X}) - g^*(\boldsymbol{X})$$

と書くことにする. すると

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\Big[\big(g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{x}) - g^*(\boldsymbol{x})\big)^2\Big|\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\Big] &= \mathsf{E}\big[D^2(\boldsymbol{x},\,\mathfrak{T})\big|\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\big] \\
&= \big\{\mathsf{E}[D(\boldsymbol{x},\,\mathfrak{T})|\,\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}]\big\}^2 + \mathsf{Var}\big[D(\boldsymbol{x},\,\mathfrak{T})|\,\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\big] \\
&\qquad (\because \text{注意 } \overset{\texttt{re:0-2-29}}{\text{A.47}}) \\
&= \big\{\mathsf{E}\big[g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{x}) - g^*(\boldsymbol{x})\big|\,\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\big]\big\}^2 + \mathsf{Var}\big[g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}|\,\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\big] \\
&= \big\{\underbrace{\mathsf{E}\big[g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{x})\big|\,\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\big] - g^*(\boldsymbol{x})}_{\text{バイアス}}\big\}^2 + \mathsf{Var}\big[g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}|\,\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}\big]
\end{aligned}$$

と書き直せることがわかる. よって

$$\mathsf{E}\big[\mathsf{Err}\big(g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}\big)\big] = \mathsf{Err}^* + \underbrace{\big\{\mathsf{E}\big[g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{X})\big|\boldsymbol{X}\big] - g^*(\boldsymbol{X})\big\}^2}_{(\text{バイアス})^2} + \underbrace{\mathsf{E}\big[\mathsf{Var}\big[g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}(\boldsymbol{X})\big|\boldsymbol{X}\big]\big]}_{\text{分散}}$$

と表現できる. 予測関数 $g^{\mathcal{G}}_{\mathfrak{T}}$ の期待汎化誤差は Err^* とバイアスの 2 乗と分散の和で表現できることがわかる.

1.5 教師なし学習における兼ね合い (trade-off)

sec:a1-5

記号が不統一. 再度よく読んで記号と統一すること. 2023/08/24 記.

応答変数 Y と説明変数ベクトル $\boldsymbol{X}$ の区別がある教師あり学習とは対照的に教師なし学習ではこのような変数の区別がない.

$n \in \mathbb{N}$ を標本 (観測データ) 数とする. 各標本 (観測データ) の次元を $k \in \mathbb{N}$ とし, 縦ベクトルで表すことにする. したがって, n 個の標本を $\boldsymbol{x}_j\ (j = 1,\,2,\,\ldots,\,n)$ と書いたとき, $k \times n$ の観測データ行列 $[\boldsymbol{x}_1,\,\boldsymbol{x}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{x}_n]$ から有用な情報やパタンを抽出することが教師なし学習の主目的になる.

標本 (観測データ) $\boldsymbol{x}_1,\,\boldsymbol{x}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{x}_n$ はある未知の確率分布からの n の独立同一標本の実現値と考え, データ行列からこの未知の確率分布を学習/推測することが教師なし学習の本質的な目標である.

観測データはある未知の確率分布からの n 個のランダム標本の実現値であると考えると, データの経験分布は未知の確率分布に関する重要な情報を含んでいる. 経験分布の概念とカーネル型密度推定については後ほど説明する.

どの節で説明するかを明記すること. これに対応する節はまだ書いていない.

教師なし学習における損失と誤差を導入する. 訓練データを

$$\mathfrak{T}_n := \{\boldsymbol{X}_1,\,\boldsymbol{X}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{X}_n\}$$

とする．ここで $\boldsymbol{X}_j\,(j=1,\,2,\ldots,\,n)$ は確率ベクトル $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^k$ の独立複製[9]とする．また $\boldsymbol{X}$ の未知の同時 p.d.f. を p^* と書く．この p^* を**真の分布**という．さらに，訓練データ $\mathfrak{T}_n$ の実現値 $\mathfrak{t}_n=\{\boldsymbol{x}_1,\,\boldsymbol{x}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{x}_n\}$ と書くことにする．

教師なし学習では未知の同時 p.d.f.(真の分布) p^* をうまく近似する p.d.f. p をみつけることが目標である．すなわち，$\mathsf{Loss}\big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x}),\,\mathsf{p}(\boldsymbol{x})\big)$ を損失関数[10] としたとき, その汎化誤差

$$\begin{aligned}\mathsf{Err}(\mathsf{p}) :&= \mathsf{E}\Big[\mathsf{Loss}\big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{X}),\,\mathsf{p}(\boldsymbol{X})\big)\Big]\\ &= \int \mathsf{Loss}\big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x}),\,\mathsf{p}(\boldsymbol{x})\big)\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

を小さくする p.d.f. p をみつけることが目標である．ただし, 上式の $\mathsf{E}[\,\cdot\,]$ は未知の真の確率分布 p^* に関する期待値である．

損失関数を

$$\mathsf{Loss}\big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x}),\,\mathsf{p}(\boldsymbol{x})\big)=\log\frac{\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})}{\mathsf{p}(\boldsymbol{x})}=\begin{cases}\log\dfrac{\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})}{\mathsf{p}(\boldsymbol{x})} & \big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})\mathsf{p}(\boldsymbol{x})>0\big),\\ 0 & \big(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})=0\big),\\ +\infty & \big(\mathsf{p}(x)=0,\,\mathsf{p}^*(x)>0\big)\end{cases}$$

と取れば, 汎化誤差は **Kullback-Leibler 情報量** (K-L 情報量とかくことにする) と呼ばれるものである．

以下では, K-L 情報量のもとで問題を考える．K-L 情報量を KL と書くことにする．すなわち, p.d.f. p に対する K-L 情報量 KL を

$$\mathsf{KL}(\mathsf{p})=\mathsf{E}\left[\log\frac{\mathsf{p}^*(\boldsymbol{X})}{\mathsf{p}(\boldsymbol{X})}\right]=\mathsf{E}\big[\log\mathsf{p}^*(\boldsymbol{X})\big]-\mathsf{E}\big[\log\mathsf{p}(\boldsymbol{X})\big]$$

で定める．ただし, 期待値は p^* に関するものである．さらに, 損失関数の定義から, $\mathsf{p}(\boldsymbol{x})=0$, $\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})>0$ のとき, $\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})\log\mathsf{p}(\boldsymbol{x})=-\infty$ と約束する．上の式の最右辺の第 1 項目は p に関係ないので $\mathsf{KL}(\mathsf{p})$ の最小化は

$$-\mathsf{E}\big[\log\mathsf{p}(\boldsymbol{X})\big]=-\int\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x})\log\mathsf{p}(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}$$

の最小化となる．ここで

$$\mathsf{CE}(\mathsf{p}):=-\mathsf{E}\big[\log\mathsf{p}(\boldsymbol{X})\big] \tag{1.2}$$

eq:a1-1

[9]すなわち, 確率変数 $X_1,\,X_2,\,\ldots,\,X_n$ は独立同一に確率変数 X と同じ分布に従うことである．

[10]本来であれば, 損失関数は $\mathsf{Loss}:\,(\mathsf{p}^*,\,\mathsf{p})\longrightarrow[0,\,\infty)\cup\{+\infty\}$ と書くべきであるが, 前節の流れを踏まえて, よりわかりやすいように $\mathsf{Loss}:\,(\mathsf{p}^*(\boldsymbol{x}),\,\mathsf{p}(\boldsymbol{x}))\longrightarrow[0,\,\infty)\cup\{+\infty\}$ と書いた．

と書く．ただし, 期待値は p^* に関するものである．これを**クロス・エントロピー誤差**と呼ぶことにする．

次に探索の対象となる確率密度関数の集まりを $\mathcal{P}$ と書くことにする．この確率分布の集まりを**統計的モデル**という．統計的モデル $\mathcal{P}$ が真の分布 p^* を含んでいる ($\mathsf{p}^* \in \mathcal{P}$ が成立する) とき，クロス・エントロピー誤差 $\mathsf{CE}(\mathsf{p})$ を最小とするものは p^* となる．すなわち，任意の $\mathsf{p} \in \mathcal{P}$ に対して

$$\mathsf{CE}(\mathsf{p}) \geq \mathsf{CE}(\mathsf{p}^*)$$

が成立する．しかし, 統計的モデル $\mathcal{P}$ が真の分布 p^* を含んでいる場合においても $\overset{\text{eq:a1-1}}{(1.2)}$ の最小化問題は一般に実行不可能である．なぜならば, この誤差 $\mathsf{CE}(p)$ は未知の分布 p^* に依存するからである．

そこで, $\mathsf{CE}(\mathsf{p})$ の代わりに訓練クロス・エントロピー誤差

$$\widehat{\mathsf{CE}}_{\mathsf{t}} := -\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}_j)$$

の $\mathsf{p} \in \mathcal{P}$ に関する最小化問題を考える．

ここでの重要なステップは探索の対象となる統計的モデル $\mathcal{P}$ の選択である．

まず, 統計的モデル $\mathcal{P}$ の元 p を添え字 $\boldsymbol{\theta}$ で添え字付ることにする．添え字 $\boldsymbol{\theta}$ の全体の成す集合 (この集合を添え字集合という) を Θ と書くことにする．すなわち, 集合 $\mathcal{P}$ を集合 Θ により母数化する．添え字 $\boldsymbol{\theta}$ を**母数**といい, Θ を**母数空間** と呼ぶことにする．すると $\mathcal{P}$ の中からの元 p の選択は Θ の中からの元 $\boldsymbol{\theta}$ の選択となる．

いま，$d \in \mathbb{N}$ とし, $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ とする．すなわち, 母数空間 Θ は有限次元で

$$\mathcal{P} := \{\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta});\ \boldsymbol{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\} \tag{1.3}$$

eq:a1-3

とする．$\overset{\text{eq:a1-3}}{(1.3)}$ のような形で与えられる統計的モデルを考える．統計学では, このような統計的モデル (母数空間が有限次元である統計的モデル) を伝統的に**母数モデル**と呼んでいる．すなわち, 母数モデルとは有限次元の母数空間によって添え字づけられている分布の集まり (統計的モデル) である．

以降では, 真の分布 p^* は母数モデル $\mathcal{P} = \{\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta});\ \boldsymbol{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ に含まれるとは限らない場合を想定して，未知の真の分布 p^* をうまく近似する確率分布を $\overset{\text{eq:a1-3}}{(1.3)}$ の中から学習することを考える．

そのためにまず，データから近似モデルを探すときの重要な概念を導入する．データの実現値 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ が与えられたときに関数

$$\boldsymbol{\theta} \mapsto \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}) \tag{1.4}$$

eq:a1-4

を**尤度関数**という．この関数の対数をとったもの $\log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$ の $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1,\, \theta_2,\, \ldots,\, \theta_d)^\top$ に関する勾配を**スコア関数**といい，$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$ と書くことにする．すなわち

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}) &:= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}) \\
&:= \left(\frac{\partial}{\partial \theta_1} \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}),\, \frac{\partial}{\partial \theta_2} \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}),\, \ldots,\, \frac{\partial}{\partial \theta_d} \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}) \right)^\top \\
&= \frac{1}{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})} \left(\frac{\partial \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1}, \frac{\partial \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2}, \ldots, \frac{\partial \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_d} \right)^\top \\
&=: \frac{1}{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})} \frac{\partial \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}
\end{aligned}$$

である．

ここで，$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$ の $\boldsymbol{x}$ に $\boldsymbol{X}$ を形式的に代入し，$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$ をランダムにしたものを $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})$ と書くことにする． そして $\boldsymbol{X}$ が分布 p^* に従うとし，スコア関数 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})$ の期待値を

$$\mathsf{E}\big[\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\big]$$

を考える．

真の分布 p^* が母数モデル $\mathcal{P}$ に属し，ある $\boldsymbol{\theta}^* \in \Theta$ が存在して，$\mathsf{p}^* = \mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta}^*)$ と書けるときには，$\mathsf{E}\big[\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta}^*)\big]$($\mathsf{E}\big[\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\big]$ の $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^*$ における値) は以下のように評価できる．形式に $\boldsymbol{\theta}^*$ を $\boldsymbol{\theta}$ と書きかえて計算をしていくと

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\big[\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\big] &= \int \frac{1}{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})} \left(\frac{\partial \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right) \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})\, d\boldsymbol{x} = \int \frac{\partial \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}\, d\boldsymbol{x} \\
&= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \int \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})\, d\boldsymbol{x} = \mathbf{0}_d \qquad (1.5)
\end{aligned}$$

eq:a1-5

となる．ただし，最後の等号は微分記号と積分記号の交換が可能であることを仮定[11]している．すなわち $\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta})$ の関する $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})$ の期待値は零ベクトルとなる．しかし，真の分布 p^* が母数モデル $\mathcal{P} = \{\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta});\, \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$ に含まれない場合には，スコア関数 $S(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})$ の真の分布 p^* に関する期待値は零ベクトルとはならないことに注意が必要であ.

さらに，真の分布 p^* に関する $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})$ の共分散行列を考える．これを

[11] 無条件でこの交換が可能なわけではない．通常は，交換が可能になるような正則条件を母数モデル $\mathcal{P}$ や真の分布 p^* に課す．ここの議論では，厳密性に欠くが，正則条件を気にせずに議論をする．

Fisher 情報量行列といい, $\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta})$ と記すことにする．すなわち

$$
\begin{aligned}
\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) &:= \mathsf{E}\big[\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{S}^{\top}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\big] \\
&= \mathsf{E}\begin{bmatrix}
\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1} & \frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2} & \cdots & \frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d} \\
\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1} & \frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2} & \cdots & \frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1} & \frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2} & \cdots & \frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d}\frac{\partial \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d}
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

で定義する．ただし, 上の式の期待値 $\mathsf{E}[\cdot]$ は真の分布 p^* に関するものである． さらに, $-\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})$ の Hesse 行列の真の分布 p^* に関する期待値を $\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta})$ を

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}) &:= -\mathsf{E}_{\boldsymbol{\theta}}\left[\frac{\partial \mathsf{S}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right] \\
&:= -\mathsf{E}_{\boldsymbol{\theta}}\begin{bmatrix}
\frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1\partial\theta_1} & \frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1\partial\theta_2} & \cdots & \frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_1\partial\theta_d} \\
\frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2\partial\theta_1} & \frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2\partial\theta_2} & \cdots & \frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_2\partial\theta_d} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d\partial\theta_1} & \frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d\partial\theta_2} & \cdots & \frac{\partial^2 \log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_d\partial\theta_d}
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

で定義する．

ある $\boldsymbol{\theta}^* \in \Theta$ が存在して $\mathsf{p}^* = \mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta}^*)$ となるとき

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}^*) = \mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}^*)$$

となること[12]がわかる．

n が十分大きいとき行列 $\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta})$, $\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta})$ はクロス・エントロピー誤差の近似において重要な役割を担うことが知られている．

---

[12] $d = 1$ として確認する．$d \geq 2$ の場合も本質的には同じである．以下では, θ^* を θ として計算を進めていく．

$$
\begin{aligned}
J(\theta) &= -\mathsf{E}\left[\frac{\partial^2 \log \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial\theta^2}\right] = -\mathsf{E}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\mathbf{p}(X|\,\theta)}\frac{\partial \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial\theta}\right)\right] \\
&= \mathsf{E}\left[\frac{1}{\mathbf{p}^2(X|\,\theta)}\left(\frac{\partial \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial\theta}\right)^2 - \frac{1}{\mathbf{p}(X|\,\theta)}\frac{\partial^2 \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial^2\theta}\right] \\
&= \mathsf{E}\left[\left(\frac{\partial \log \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial\theta}\right)^2\right] - \mathsf{E}\left[\frac{1}{\mathbf{p}(X|\,\theta)}\frac{\partial^2 \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial\theta^2}\right] \\
&= I(\theta) - \mathsf{E}\left[\frac{1}{\mathbf{p}(X|\,\theta)}\frac{\partial^2 \mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial\theta^2}\right].
\end{aligned}
$$

設定を簡単に記述するために, 母数モデル $\{\mathsf{p}(\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta});\,\boldsymbol{\theta}\in\Theta\}$ に探索範囲を限定すると $\mathsf{CE}(\mathsf{p})$ は $\boldsymbol{\theta}$ の関数になるので, 記号を乱用して, $\mathsf{CE}(\mathsf{p})$ を $\mathsf{CE}(\boldsymbol{\theta})$ と書くことにする.

$\mathsf{p}^{\mathcal{P}}=\mathbf{p}(\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta}^*)\,(\boldsymbol{\theta}^*\in\Theta)$ をクロス・エントロピー誤差

$$\mathsf{CE}(\boldsymbol{\theta}):=-\mathsf{E}\big[\mathbf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\big]$$

を母数モデル $\{\mathsf{p}(\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta});\,\boldsymbol{\theta}\in\Theta\}$ 内で最小にする点とする. すなわち, 任意の $\boldsymbol{\theta}\in\Theta$ に対して

$$\mathsf{CE}\big(\boldsymbol{\theta}\big)\ge\mathsf{CE}\big(\boldsymbol{\theta}^*\big)$$

である. この $\boldsymbol{\theta}^*$ は一般に $\mathsf{p}^*=\mathsf{p}(\cdot\,|\,\boldsymbol{\theta}^*)$ をみたすとは限らないことに注意する.

つぎに, クロス・エントロピー誤差 $\mathsf{CE}(\mathsf{p})$ をすべての分布に関して最小化したもの CE^* と書くことのする. すなわち

$$\mathsf{CE}^*:=\inf\{\mathsf{CE}(\mathsf{p});\ \mathsf{p}\text{ はすべての分布 }\}$$

である. 任意の p に対して

$$\mathsf{CE}(\mathsf{p})\ge\mathsf{CE}^*$$

となるに注意せよ.

特に, 真の分布 p^* が母数モデル $\mathcal{P}$ に含まれ, CE は $\boldsymbol{\theta}$ の関数として「なめらか」な関数で, $\boldsymbol{\theta}^*$ の近傍で狭義凸で 2 回連続微分可能[13]なとき, $\boldsymbol{\theta}^*$ の定義より

$$\mathbf{0}_d=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathsf{CE}\big(\boldsymbol{\theta}\big)\bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}=-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\mathsf{E}\big[\log\mathbf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\big]\bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}=-\mathsf{E}\bigg[\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\theta}}\log\mathbf{p}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta})\bigg]\bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^*}$$

となる. ただし微分記号と積分記号の交換が可能であることを仮定している. 同じように $\mathrm{J}\big(\boldsymbol{\theta}\big)$ は Err の Hesse 行列であることがわかる.

いま, $\mathbf{p}\big(\cdot\,|\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n\big)$ を訓練誤差

$$\mathsf{CE}_{\mathfrak{T}_n}\big(\boldsymbol{\theta}\big):=-\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\log\mathsf{p}\big(\boldsymbol{X}_j\big|\,\boldsymbol{\theta}\big)$$

しかし

$$\begin{aligned}\mathsf{E}\bigg[\frac{1}{\mathbf{p}(X|\,\theta)}\frac{\partial^2\mathbf{p}(X|\,\theta)}{\partial^2\theta}\bigg]&=\int\frac{1}{\mathbf{p}(x|\,\theta)}\frac{\partial^2\mathbf{p}(x|\,\theta)}{\partial\theta}\mathbf{p}(x|\,\theta)\,dx\\&=\int\frac{\partial^2 g(x|\,\theta)}{\partial\theta}\,dx=\frac{1}{\partial\theta^2}\int g(x|\,\theta)\,dx=0.\end{aligned}$$

[13]たとえば g が正規分布のときにはこの条件をみたしている.

を最小にする点とする．ただし $\mathfrak{T}_n = \{\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n\}$ はランダム標本の集合である． 教師あり学習の場合と同様に汎化誤差 $\mathsf{CE}\bigl(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n\bigr)$ を分解する．すると

$$
\begin{aligned}
\mathsf{CE}\bigl(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n\bigr) &= \mathsf{CE}\bigl(\boldsymbol{\theta}^*\bigr) + \mathsf{E}\left[\frac{\mathbf{p}\bigl(\boldsymbol{X}\big|\boldsymbol{\theta}^*\bigr)}{\mathbf{p}\bigl(\boldsymbol{X}\big|\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n\bigr)}\right] \\
&= \mathsf{CE}^* + \underbrace{\mathsf{CE}\bigl(\boldsymbol{\theta}^*\bigr) - \mathsf{CE}^*}_{\text{近似精度}} + \underbrace{\mathsf{CE}\bigl(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n\bigr) - \mathsf{CE}\bigl(\boldsymbol{\theta}^*\bigr)}_{\text{推定精度}}
\end{aligned}
$$

なる書きかえられる． $\boldsymbol{X}$ の分布で $\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)$ の期待値を取っても, $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n$ がランダムな量である $\mathfrak{T}_n$ に依存している．したがって, 上の式の $\mathsf{CE}\bigl(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n\bigr)$ はランダムな量であることに注意せよ．

1.6 最尤法

sec:6-2

$d \in \mathbb{N}$ とする．母数モデル $\mathcal{P} = \bigl\{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\bigr\}$ を考える．ただし $\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$ は p.d.f. もしくは p.m.f. とする．真の母数 $\boldsymbol{\theta}^*$ は母数空間 Θ に含まれるとする．すなわち, $\boldsymbol{\theta}^* \in \Theta$ である．

いま, $n \in \mathbb{N}$ とし,

$$\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}^*)$$

とする．

df:6-4

定義 1.3. $\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n = \boldsymbol{x}_n$ を観測したとき $\boldsymbol{\theta}$ の **尤(ゆう)度関数** $\mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta})$ を

$$\mathsf{lik}_n\bigl(\boldsymbol{\theta}\bigr) = \prod_{j=1}^{n} \mathsf{p}(\boldsymbol{x}_j|\,\boldsymbol{\theta})$$

で定義し, **対数尤度** $\ell_n(\boldsymbol{\theta})$ を

$$\ell_n(\boldsymbol{\theta}) = \log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta})$$

で定義する．

re:6-5

注意 1.4. 尤度関数は

$$\mathsf{lik}_n : \Theta \ni \boldsymbol{\theta} \mapsto \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} \mathsf{p}(\boldsymbol{x}_i|\,\boldsymbol{\theta}) \in [0, \infty)$$

であることに注意をせよ．一方, $\mathbb{X} = \bigl\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^k ;\, \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta}^*) > 0\bigr\}$ とおいたとき, $(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_n)$ の同時 p.d.f. または p.m.f. $\prod_{i=1}^{n} \mathsf{p}(\boldsymbol{x}_i|\,\boldsymbol{\theta}^*)$ は

$$\mathbb{X} \times \mathbb{X} \times \cdots \times \mathbb{X} \ni (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n) \mapsto \prod_{i=1}^{n} \mathsf{p}(\boldsymbol{x}_i|\,\boldsymbol{\theta}^*) \in (0, \infty)$$

である． □

ここで, arg max の記号を導入する. 関数 $g(x)$ の最大値を取る点を表す集合を

$$\mathop{\arg\max}_{x\in\mathbb{R}} g(x)$$

と書く. たとえば $g(x) = -(x-1)^2$ のとき

$$\mathop{\arg\max}_{0\leq x\leq 4\pi} g(x) = \{1\}$$

となる. $g(x) = \sin x$ のとき

$$\mathop{\arg\max}_{0\leq x\leq 4\pi} g(x) = \{\pi/2,\, 5\pi/2\}$$

となる.

df:6-6 **定義 1.5.** $\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{x}_2,\, \dots,\, \boldsymbol{X}_n = \boldsymbol{x}_n$ を観測したとき $\boldsymbol{\theta}^*$ の**最尤推定値** (maximum likelihood estimate) を $\mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta})$ を最大にする値 $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n(\boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{x}_2,\, \dots,\, \boldsymbol{x}_n)$ で定義する. すなわち

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n(\boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{x}_2,\, \dots,\, \boldsymbol{x}_n) \in \mathop{\arg\max}_{\boldsymbol{\theta}\in\Theta} \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}).$$

$(\boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{x}_2,\, \dots,\, \boldsymbol{x}_n)$ に $(\boldsymbol{X}_1,\, \boldsymbol{X}_2,\, \dots,\, \boldsymbol{X}_n)$ を代入したもの $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n(\boldsymbol{X}_1,\, \boldsymbol{X}_2,\, \dots,\, \boldsymbol{X}_n)$ を $\boldsymbol{\theta}$ の**最尤推定量** (maximum likelihood estimator=m.l.e.) という.

ているのは統計
ルの母数である
の推定量と書

re:6-7 **注意 1.6.** $X_1,\, X_2,\, \dots,\, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{Ber}(\theta^*)$ とする. ただし $(0,\, 1) =: \Theta \ni \theta^*$ は未知の真の母数とする. すなわち

$$\mathsf{p}(x|\,\theta^*) = (\theta^*)^x\bigl(1-\theta^*\bigr)^{1-x}, \qquad (x = 0,\, 1)$$

である. このとき

$$\mathsf{lik}_n(\theta) = \prod_{j=1}^n \mathsf{p}(x_j|\,\theta) = \prod_{j=1}^n \theta^{x_j}(1-\theta)^{1-x_j} = \theta^{t_n}(1-\theta)^{n-t_n}$$

となる. ただし $t_n = \sum_{j=1}^n x_j$ である. よって対数尤度は

$$\ell_n(\theta) = t_n\log\theta + (n-t_n)\log(1-\theta) \qquad (0 < \theta < 1)$$

となる. このことから, $0 < t_n < n$ のとき,

$$\frac{t_n}{n} \in \mathop{\arg\max}_{\theta\in(0,\,1)} \ell_n(\theta)$$

がわかる. したがって, $0 < t_n < n$ のとき, θ の最尤推定量は $\widehat{\theta}_n = \frac{\sum_{j=1}^n X_j}{n}$ となる. 一方, $t_n = 0,\, n$ のとき, θ^* の最尤推定値は存在しない. □

re:6-8 **注意 1.7.** $\boldsymbol{\theta}^* = (\mu^*, \sigma^*) \in \mathbb{R} \times (0, \infty)$ を真の母数とし

$$X_1, X_2, \ldots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{N}\big(\mu^*, (\sigma^*)^2\big)$$

とする. $X_j = x_j$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$ を観測したとき, 尤度関数は

$$\begin{aligned}
\mathsf{lik}_n(\mu, \sigma) &= \prod_{j=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x_j-\mu)^2}{\sigma^2}\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \frac{1}{\sigma^n} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{j=1}^{n}(x_j-\mu)^2\right\} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \frac{1}{\sigma^n} \exp\left\{-\frac{ns_n^2}{2\sigma^2}\right\} \exp\left\{-\frac{n(\overline{x}_n-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \qquad (1.6)
\end{aligned}$$

eq:6-2b

となる. ただし

$$\overline{x}_n = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j, \qquad s_n^2 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x}_n)^2$$

とした. また, (1.6) の最後の等号は

$$\sum_{j=1}^{n}(x_j-\mu)^2 = ns_n^2 + n(\overline{x}_n - \mu)^2 \qquad (1.7)$$

eq:6-2a

からわかる.

対数尤度は

$$\ell_n(\mu, \sigma) = -n\log\sigma - \frac{ns_n^2}{2\sigma^2} - \frac{n(\overline{x}_n-\mu)^2}{2\sigma^2}$$

となる. よって

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \ell_n(\mu, \sigma)}{\partial\mu}(\mu, \sigma) = \dfrac{n(\overline{x}_n-\mu)}{2\sigma^2} = 0 \\ \dfrac{\partial \ell_n}{\partial\sigma}(\mu, \sigma) = -\dfrac{n}{\sigma} + \dfrac{ns_n^2}{\sigma^3} + \dfrac{n(\overline{x}_n-\mu)^2}{\sigma^3} = 0 \end{cases}$$

を解くと

$$\mu = \overline{x}_n, \qquad \sigma = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\big(x_j - \overline{x}_n\big)^2}$$

となる. 最後に, $\ell_n(\mu, \sigma)$ の Hessian を求めると

$$\mathbf{H} := \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \ell_n^2}{\partial\mu^2}\big(\overline{x}_n, s_n\big) & \dfrac{\partial \ell_n^2}{\partial\mu\partial\sigma}\big(\overline{x}_n, s_n\big) \\ \dfrac{\partial \ell_n^2}{\partial\partial\sigma\mu}\big(\overline{x}_n, s_n\big) & \dfrac{\partial \ell_n^2}{\partial\sigma^2}\big(\overline{x}_n, s_n\big) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dfrac{n}{2{s_n}^2} & 0 \\ 0 & -\dfrac{2n}{s_n^2} \end{pmatrix} \qquad (1.8)$$

eq:6-3a

となる． $s_n > 0$ のとき， $-\mathbf{H}$ は正定値行列となるので, 関数

$$\Theta \ni (\mu, \sigma) \mapsto \ell_n(\mu, \sigma)$$

は $(\mu, \sigma) = (\overline{x}_n, s_n)$ で最大となる．$\mathsf{Pr}(S_n > 0) = 1$ となること[14]から, (μ, σ) の最尤推定量は

$$\widehat{\mu}_n = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j =: \overline{X}_n, \quad \widehat{s}_n = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\bigl(X_j - \overline{X}_n\bigr)^2}$$

となる． □

pro:6-1 **問 1.1.** (1.7) と (1.8) を確認せよ．

[14]なぜならば,

$$S_n = 0 \iff X_1 = X_2 = \cdots = X_n$$

であり, 正規分布の性質から $\mathsf{Pr}(X_1 = X_2 = \cdots = X_n) = 0$ が成立することがわかる．

第2章　Monte Carlo 法

2.1　乱数の発生法

Monte Carlo 法は乱数生成法のことである．区間 (0, 1) 上の一様乱数の列を発生させる．この列は決定的なアルゴリズムにより生成されるので真の意味ではランダム性を持たないので, 疑似乱数とよばれるものである．R では高速で安定した一様疑似乱数を発生するアルゴリズムである Mersenne twister 法を利用している．一様乱数を使って代表的な分布に従う疑似乱数を生成する．ここでは, 一様論数からある分布に従う (疑似) 乱数をどのように生成させるかを説明する．　まず, c.d.f や p.d.f.(p.m.f.) の性質を直接利用して, 目標の分布に従う乱数の生成法 (確率積分法とよぶことにする) をまず説明する．つぎに, 本質的に計算機を利用すること (計算機集中的な手法) で目標の疑似乱数を生成する方法である受容・棄却法やマルコフ連鎖法を説明する．

以下の議論では, 開区間 (0, 1) 上の一様疑似乱数は用意に生成し, そのように目的の分布の疑似乱数を生成するかを説明していく．以下では, (0, 1) 上の一様分布に対する疑似乱数のことを簡単に一様疑似乱数とよぶことにする．すなわち, 分布 P の疑似乱数を作成したとき, 一様疑似乱数から数 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ を作成する．もちろん, これらは互いに関連しない数[1]である．これらが任意の開集合 $A \subset \mathbb{R}$ に対して

$$\mathsf{P}(A) \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}_A(x_i)$$

となるようにする．上記のような関係をみたす数 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ を P の疑似乱数ということにする．

2.1.1　ベルヌーイ分布

$0 < \theta < 1$ なる θ に対して, Ber(θ) に従う乱数を発生させる場合には

- 一様乱数 u を発生させる．

[1]確率変数の言葉でいえば, 独立となるが, 数に対して独立を定義できないであろう．

- $0 < u \leq \theta \Longrightarrow x = 1,\ \theta < u < 1 \Longrightarrow x = 0$ とおく.

このとき x は $\mathsf{Ber}(\theta)$ の疑似乱数となる.

2.1.2　2 項分布

$n \in \mathbb{N},\ 0 < \theta < 1$ とする.

- $\mathsf{Ber}(\theta)$ の疑似乱数 $x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n$ を発生させる.
- $s = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$ とする.

このとき s は $\mathsf{Bin}(n,\ \theta)$ の疑似乱数となる.

2.1.3　標準正規分布

Box-Müller 法を用いる.

- 一様乱数 $u_1,\ u_2$ を発生させる.
- $r = \sqrt{-2\log u_1},\ \theta = 2\pi u_2$ とする.
- $x = r\cos\theta,\ y = r\sin\theta$ とする.

このとき $x,\ y$ は　$\mathsf{N}(0,\ 1)$ の 2 つの疑似乱数となる.

これは以下のことからわかる. 大文字が確率変数で小文字はその実現値とする. たとえば, r は確率変数 R の実現値とみる. まず R の p.d.f. は

$$\mathsf{p}_R(r) = \begin{cases} r\exp\left(-\dfrac{r^2}{2}\right) & (r > 0) \\ 0 & (r \leq 0) \end{cases}$$

となることに注意する. したがって $(R,\ \Theta)$ の同時 p.d.f. は

$$\mathsf{p}_{(R,\,\Theta)}(r,\ \theta) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\pi} r\exp\left(-\dfrac{r^2}{2}\right) & (r > 0,\ 0 < \theta < 2\pi) \\ 0 & (\text{その他の場合}) \end{cases} \tag{2.1}$$

eq:a2-1

である. ここで変換

$$\boldsymbol{h} = (h_1,\ h_2) : (r,\ \theta) \mapsto (r\cos\theta,\ r\sin\theta) = (x,\ y)$$

を考える.

$$r = \sqrt{x^2 + y^2},\ \cos\theta = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}},\ \sin\theta = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

である. 変換 $\boldsymbol{h}$ の Jacobian は

$$J_{\boldsymbol{h}}(r,\,\theta) = \mathrm{Det}\begin{pmatrix} \dfrac{\partial h_1}{\partial r} & \dfrac{\partial h_1}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial h_2}{\partial r} & \dfrac{\partial h_2}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \mathrm{Det}\begin{pmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix} = r$$

となるので

$$J_{\boldsymbol{h}^{-1}}(x,\,y) = \frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}.$$

eq:a2-1

(2.1) に対して p.d.f. の変換公式を用いれば

Jacobi 変換公式の説明を書くこと. 2023/08/29 記.

$$\begin{aligned} \mathsf{p}_{(X,Y)}(x,\,y) &= p_{(R,\Theta)}\left(\sqrt{x^2+y^2},\,\arccos\left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\right)\right)\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{x^2+y^2}\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2}\right)\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ &= \frac{1}{2\pi}\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2}\right) \end{aligned}$$

となることよりわかる.

2.1.4 正規分布

$-\infty < \mu < \infty$, $0 < \sigma < \infty$ とする. $\mathsf{N}(\mu,\,\sigma^2)$ に従う疑似乱数を生成させるには

- $\mathsf{N}(0,\,1)$ の疑似乱数 z を発生させる.
- $x = \mu + \sigma z$ とおく.

このとき x は $\mathsf{N}(\mu,\,\sigma^2)$ の疑似乱数となる.

2.1.5 確率の積分変換

連続型分布の c.d.f. F に対してその逆関数 F^{-1} が陽にわかれば F に従う疑似乱数を発生させることができる.

- 一様疑似乱数 u を発生させる.
- $x = \mathsf{F}^{-1}(u)$ とおく. ただし, c.d.f. F は, $\mathsf{supp}(\mathsf{F}) := \overline{\{x \in \mathbb{R};\, \mathsf{F}(x) > 0\}}$ 上で連続かつ狭義単調増加であることを仮定している.

このとき, x は F の疑似乱数となる. なぜならば, $X \sim \mathsf{F}$ としたとき, $\forall x \in \{x \in \mathbb{R};\, \mathsf{F}(x) > 0\}$ に対して

$$\mathsf{Pr}\big(X \le x\big) = \mathsf{Pr}\big(\mathsf{F}^{-1}(U) \le x\big) = \mathsf{Pr}\big(U \le \mathsf{F}(x)\big) = \mathsf{F}(x)$$

よりわかる.

2.1.6 受容・棄却法

疑似乱数をこれまでに説明してきた確率積分法等で発生させるのが難しい (疑似) 乱数の生成法を考える． 生成した乱数が従う分布の p.d.f. を p とする． さらに, 容易に乱数が生成できる分布の p.d.f. を q とする．この q はつぎのように取ることができたとする．

ある定数 $C \geq 1$ が存在して $\forall x$ に対して

$$\mathsf{p}(x) \leq C\mathsf{q}(x)$$

をみたす．この q に従う疑似乱数を用いて p に従う疑似乱数を発生させることができる．

- q の疑似乱数 x を発生させる．
- $\mathsf{Unif}\big(0,\, C\mathsf{q}(x)\big)$ の疑似乱数 u を発生させる．
- $\mathsf{p}(x) \geq u \Longrightarrow \widetilde{x} = x$, $\mathsf{p}(x) < u \Longrightarrow x$ を捨てる．

このとき $\widetilde{x}$ は p の疑似乱数となる．

このことは以下からわかる．まず

$$X \sim \mathsf{q}, \quad U|\, X = x \sim \mathsf{Unif}\big(0,\, C\mathsf{q}(x)\big)$$

に注意する．$-\infty < x < \infty$, $0 < u < C\mathsf{q}(x)$ のとき，$(X,\, U)$ の同時 p.d.f. $\mathsf{p}_{(X,U)}$ は

$$\mathsf{p}_{(X,U)}(x,\, u) = \mathsf{p}_{U|\,X}(u|\,x)\mathsf{q}(x) = \frac{1}{C\mathsf{q}(x)}\mathsf{q}(x) = \frac{1}{C}$$

で与えられることに注意する． よって

$$\mathsf{p}_{(X,U)}(x,\, u) = \begin{cases} \dfrac{1}{C} & (-\infty < x < \infty,\, 0 < u < C\mathsf{q}(x)) \\ 0 & (\text{その他の場合}) \end{cases}$$

である[2]. $t \in \mathsf{supp}(\mathsf{p}) \subset \mathbb{R}$ に対して

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\mathsf{Pr}\big(\widetilde{X} \le t\big) &= \frac{d}{dt}\mathsf{Pr}\big(X \le t \big|\, \mathsf{p}(X) \ge U\big) \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\mathsf{Pr}\big(X \le t,\, \mathsf{p}(X) \ge U\big)}{\mathsf{Pr}\big(\mathsf{p}(X) \ge U\big)} \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_0^t \left\{ \int_0^{\mathsf{p}(x)} \mathsf{p}_{(X,U)}(x,\, u)\, du \right\} dx}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_0^{\mathsf{p}(x)} \mathsf{p}_{(X,U)}(x,\, u)\, du \right\} dx} \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_{-\infty}^t \left\{ \int_0^{\mathsf{p}(x)} \frac{1}{C}\, du \right\} dx}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_0^{\mathsf{p}(x)} \frac{1}{C}\, du \right\} dx} \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_{-\infty}^t \frac{\mathsf{p}(x)}{C}\, dx}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathsf{p}(x)}{C}\, dx} \\
&= \frac{\dfrac{\mathsf{p}(t)}{C}}{\dfrac{1}{C}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{p}(x)\, dx} = \mathsf{p}(t)
\end{aligned}
$$

からわかる.

re:a2-1 **注意 2.1.** $C \ge 1$ としているが, $1/C$ の割合で X を採用しているので, C は 1 に近いほど乱数生成の計算効率はよいことがわかる. □

ex:a2-2 **例 2.2.** $\alpha = 1.3$, $\lambda = 5.6$ としたときの $\mathsf{Ga}(\alpha,\, \lambda)$ に従う乱数を発生させよう. すなわち,

$$
\mathsf{p}(x) = \begin{cases} \dfrac{\lambda^{\alpha} x^{\alpha-1} e^{-\lambda x}}{\Gamma(\alpha)} & (x \ge 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}
$$

に従う疑似乱数を生成する. ただし $\Gamma(\alpha) = \displaystyle\int_0^{\infty} x^{\alpha-1} e^{-x}\, dx$ である. 簡

[2] もちろん, $\mathsf{p}_{(X,U)}$ は同時 p.d.f. の条件をみたしている. なぜならば

$$
\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{p}_{(X,U)}(x,\, u)\, dx\, du = \frac{1}{C}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{ \int_0^{C\mathsf{q}(x)} du \right\} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{q}(x)\, dx = 1
$$

からわかる.

単に生成できる乱数の p.d.f. q として $\mathsf{Exp}(4)$ を用いる．すなわち

$$\mathsf{p}(x) = \begin{cases} 4e^{-4x} & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0). \end{cases}$$

である． $C = 1.2$ とすれば $x \geq 0$ のとき

$$\mathsf{p}(x) \leq C\mathsf{q}(x)$$

となることが計算機で確認することができる．$\mathsf{Exp}(4)$ の c.d.f. G は

$$\mathsf{G}(x) = \begin{cases} 1 - e^{-4x} & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

となるので, $0 < u < 1$ に対して

$$\mathsf{G}^{-1}(u) = -\frac{\log(1-u)}{4}$$

となる．さらに $1 - U \sim \mathsf{Unif}(0,\,1)$ であることに注意すれば

$$U \sim \mathsf{Unif}(0,\,1) \Longrightarrow X = -\frac{\log U}{4} \sim \mathsf{Exp}(4)$$

となることがわかる．

よって, 以上の議論を踏まえると分布 p の疑似乱数の生成アルゴリズムは以下のようになる．

- 一様疑似乱数 v_1 を発生させる．
- $x = -\dfrac{\log v_1}{4}$ とおく．
- 別の一様疑似乱数 v_2 を発生させる． $u = C\mathsf{q}(x)v_2$ とおく．
- $u \leq \mathsf{p}(x) \Longrightarrow \widetilde{x} = x$ とする．$u > \mathsf{p}(x)$ のときには x を捨てる．

この操作を繰り返せば, p に従う疑似乱数列を得る． □

2.2 Markov **連鎖** Monte Carlo **法** (MCMC 法)

節は Kaipio
meralo (2005,
98) を借用．例
から借用．

μ を $\mathbb{R}^n$ 上の確率測度とする．すなわち $\mu : \mathcal{B}(\mathbb{R}^n) \ni A \mapsto \mu(A) \in [0,\,1]$ は以下の条件をみたす．

- $\mu(\mathbb{R}^n) = 1$.

- $A_1,\, A_2,\, \ldots \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^n),\; A_i \cap A_j = \varnothing\,(i \neq j)$ に対して

$$\mu\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = \sum_{j=1}^{\infty} \mu(A_j).$$

ただし, $\mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$ は $\mathbb{R}^n$ 上の Borel 集合族である.

$f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は μ 可積分関数としたとき積分

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})\, d\mu(\boldsymbol{x})$$

を求めた.

求積法では台 $\boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{x}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^N$ と重み $w_1,\, w_2,\, \ldots,\, w_n\,(N \in \mathbb{N})$ をうまく選んで

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})\, d\mu(\boldsymbol{x}) \approx \sum_{j=1}^{N} w_j f(\boldsymbol{x}_j)$$

と近似することを目指す.

Monte Carlo 積分では, 台 $\boldsymbol{x}_j$ を確率測度 μ からランダムに生成させ, 重み w_j は分布 μ によって決める. X を μ に従う確率ベクトルとしたとき

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})\, d\mu(\boldsymbol{x}) = \mathsf{E}[f(X)] \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} f(\boldsymbol{x}_j) \tag{2.2}$$

eq:mcmc-1

となることが期待される. ただし $\{\boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{x}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{x}_N\}$ は μ からのランダム標本の実現値である. MCMC 法では eq:mcmc-1 (2.2) をみたすような標本を生成する体系的な方法である.

2.2.1 基本的な考え方

$\mathcal{B} := \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ を $\mathbb{R}^d$ 上の Borel 集合族とする. 写像

$$P : \mathbb{R}^d \times \mathcal{B} \longrightarrow [0,\, 1]$$

は次の条件をみたす**確率推移核** (probability transition kernel) とよぶ.

(1) 各 $B \in \mathcal{B}$ に対して写像

$$\mathbb{R}^d \ni \boldsymbol{x} \mapsto P(\boldsymbol{x},\, B) \in [0,\, 1]$$

は可測関数.

(2) 各 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ に対して写像

$$\mathcal{B} \ni B \mapsto P(\boldsymbol{x}, B) \in [0, 1]$$

は確率測度.

離散時間確率過程は確率変数 $\boldsymbol{X}_j \in \mathbb{R}^d\,(j = 1, 2, \ldots)$ の添え字集合 $\mathbb{N}$ で順序付けられた集合 $\{\boldsymbol{X}_j\}_{j=1}^{\infty}$ である. 推移核 P をもつ時間等質的な Markov 連鎖とは確率過程 $\{\boldsymbol{X}_j\}_{j=1}^{\infty}$ で次の性質を持つものである.

$$\mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}(B_{j+1}|\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_j) = \mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}(B_{j+1}|\,\boldsymbol{x}_j) = P(\boldsymbol{x}_j, B_{j+1})$$
$$(B_{j+1} \in \mathcal{B}, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_j \in \mathbb{R}^d).$$

ただし $\boldsymbol{X}_j$ の確率測度を $\mu_{\boldsymbol{X}_j}$ と書き, $\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_j = \boldsymbol{x}_j$ を与えたときの $\boldsymbol{X}_{j+1}$ の条件付き確率測度を $\mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}(\,\cdot\,|\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_j)$ と書いた. すなわち $\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{X}_j = \boldsymbol{x}_j$ を与えたときの $\boldsymbol{X}_{j+1}$ の条件付き分布は $\boldsymbol{X}_j = \boldsymbol{x}_j$ にのみ依存する. そして $\boldsymbol{X}_{j+1}$ の分布 $\mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}$ は時間に関して等質である. すると $\boldsymbol{X}_{j+1}$ の分布 $\mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}$ は次のように表現される.

$$\mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}(B_{j+1}) = \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{x}_j, B_{j+1})\mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}(d\boldsymbol{x}_j) =: \mu_{\boldsymbol{X}_{j+1}}P(B_{j+1}).$$

さらに 3 つの概念を導入する. $\mu P(\,\cdot\,) = \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{x}, \cdot)\, d\mu(\boldsymbol{x})$ とおく.

- 測度 μ は推移核 $P(\boldsymbol{x}_j, B_{j+1})$ の**不変測度**であるとは

  $$\mu P = \mu \Longleftrightarrow \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{x}, B)\, d\mu(\boldsymbol{x}) = \mu(B) \qquad (B \in \mathcal{B})$$

  をみたすときをいう.

- 推移核 P は μ に関して**既約**であるとは各 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ と $B \in \mathcal{B}$ で $\mu(B) > 0$ なるものに対して, ある正の整数 k が存在して

  $$P^{(k)}(\boldsymbol{x}, B) > 0$$

  をみたすときをいう. ただし

  $$P^{(k)}(\boldsymbol{x}, B) = \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{y}, B)P^{(k-1)}(\boldsymbol{x}, d\boldsymbol{y})$$
  $$P^{(1)}(\boldsymbol{x}, B) = P(\boldsymbol{x}, B) \quad (\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d, B \in \mathcal{B})$$

  である.

- P は既約な推移核とする．P は**周期的**であるとはある整数 $m \geq 2$ が存在して互いに異なる空でない集合 $E_j\,(j = 1, 2, \ldots, m)$ と $\boldsymbol{x} \in E_j$ に対して
$$P(\boldsymbol{x}, E_{j+1(\mathrm{mod}\ m)}) = 1 \qquad (\forall x \in E_j)$$
であるときをいう．P が周期的でないとき **非周期的**であるという．

pro:mh-3 **命題 2.3.** μ は $\mathbb{R}^d$ 上の確率測度とし，$\{\boldsymbol{X}_j\}_{j=1}^{\infty}$ は推移核 P を持つ時間等質な Markov 連鎖とする．さらに μ は推移核 P に関して不変測度とし，P は既約で非周期的とする．このとき $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ に対し

$$\lim_{N\to\infty} P^{(N)}(\boldsymbol{x}, B) = \mu(B) \qquad (B \in \mathcal{B}) \tag{2.3}$$ eq:mh-4c

と μ 可積分な関数 f に対して

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} f(\boldsymbol{X}_j) = \int_{\mathbb{R}^d} f(\boldsymbol{x})\,d\mu(\boldsymbol{x})$$

がほとんど確実に成立する．

Proof. 信じることにする． □

re:mh-3a **注意 2.4.** 生成する乱数の従う分布を μ と考えることになる．既約で非周期的な推移確率核 P がわかると μ は (2.3) でつくることができるわけである．P の構成の仕方として, 次の節で詳解する Metropolitan-Hasting 法が有名である． □

2.2.2 推移核の Metropolis-Hastings による構成

μ は $\mathbb{R}^d$ 上の確率測度とし $\mathbb{R}^d$ 上の Lebesgue 測度 $\mathsf{m}(\cdot)$ に関して絶対連続と仮定する．このことより $\mathbb{R}^d$ 上の非負関数 $\pi(\cdot)$ が存在して

$$\frac{d\mu}{d\mathsf{m}}(\boldsymbol{x}) = \pi(\boldsymbol{x})$$

と書ける．

P は任意の推移核とする．点 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ が与えられたとき推移核 P は点 $\boldsymbol{x}$ を異なる点 $\boldsymbol{y}$ に移動させるか, そのまま留める．このことから推移核 P は以下のように分解できると仮定する．

$$P(\boldsymbol{x}, B) = \int_B K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\,dm(\boldsymbol{y}) + r(\boldsymbol{x})\mathbb{1}_B(\boldsymbol{x}).$$

ただし

$$\mathbb{1}_B(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & (\boldsymbol{x} \in B) \\ 0 & (\boldsymbol{x} \notin B) \end{cases}$$

である．核 $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \longrightarrow [0, \infty)$ に対して，$\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{y}$ を含む微小な領域 $d\mathsf{m}(\boldsymbol{y})$ に移す確率は $K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{y})$ とし，$\boldsymbol{x}$ に留めおく確率を $r(\boldsymbol{x})$ である．条件 $P(\boldsymbol{x}, \mathbb{R}^d) = 1$ から

$$r(\boldsymbol{x}) = 1 - \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) \tag{2.4}$$

eq:mpa-2

を得る．

次に μ が P に関して不変になるための条件を K と π で表現してみよう．

まず $B \in \mathcal{B}$ に対して

$$\begin{aligned}
\mu P(B) &= \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{x}, B)\, d\mu(\boldsymbol{x}) \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{x}, b) \frac{d\mu}{dm}(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} P(\boldsymbol{x}, B)\, \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \int_B K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) + r(\boldsymbol{x}) \mathbb{1}_B(\boldsymbol{x}) \right\} \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ \int_B K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) \right\} \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) + \int_{\mathbb{R}^d} r(\boldsymbol{x}) \pi(\boldsymbol{x}) \mathbb{1}_B(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) \\
&= \int_B \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) \right\} d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) + \int_B r(\boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) \\
&\qquad \text{(2 項目の積分の変数を } \boldsymbol{x} \text{ から } \boldsymbol{y} \text{ に変更)} \\
&= \int_B \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} + r(\boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{y}) \right\} d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) \qquad (2.5)
\end{aligned}$$

eq:2-4a

と書きかえられることに注意する．すると $\pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x})$ が P に関して不変測度になるためには

$$\begin{aligned}
\mu P = \mu &\Longleftrightarrow \mu P(B) = \mu(B) \qquad (\forall B \in \mathcal{B}) \\
&\Longleftrightarrow \int_B \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) + r(\boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{y}) \right\} d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) = \int_B \pi(\boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) \qquad (\forall B \in \mathcal{B}) \\
&\Longleftrightarrow \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) + r(\boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{y}) = \pi(\boldsymbol{y}) \qquad (\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d) \\
&\Longleftrightarrow \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) = \pi(\boldsymbol{y})(1 - r(\boldsymbol{y})) \qquad (\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d)
\end{aligned} \tag{2.6}$$

eq:2-4b

eq:mpa-2 eq:2-4b

となる．(2.4) を (2.6) の最右辺に代入 ($\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{y}$ に変更した式) すると

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) = \pi(\boldsymbol{y}) \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) \\
&\Longleftrightarrow \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \pi(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} K(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) \pi(\boldsymbol{y})\, d\mathsf{m}(\boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{2.7}$$

eq:mpa-3

を得る．この式を**釣合方程式** (balance equation) とよぶ．K が

$$\pi(\boldsymbol{x})K(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) = \pi(\boldsymbol{y})K(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x}) \quad (\forall\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^d) \tag{2.8}$$

eq:mpa-4

をみたすとき K は**詳細的釣合方程式** (detailed balance equation) をみたすという．

Metropolis-Hastings アルゴリズムでは (2.8) をみたす推移核 K を構成する．

$q: \mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d \longrightarrow [0,\,\infty)$ は任意の関数で

$$\int q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})\,d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) = 1$$

をみたす．この関数 q を用いて推移核 Q を

$$Q(\boldsymbol{x},\,B) = \int_B q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})\,d\mathsf{m}(\boldsymbol{y}) \qquad (\forall B\in\mathcal{B})$$

で定める．q が詳細的釣合方程式をみたし

$$K(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) = q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}), \quad r(\boldsymbol{x}) = 0$$

と仮定する．みたしていなければ乗数倍で修正すればよいので，一般性を失わずに上記のことを仮定してよいことが以下の考察からわかる．まず

$$K(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) = \alpha(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) \tag{2.9}$$

eq:emp-4a

とおく．この α の選び方はいかのようにする． ある $\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^d$ に対して

$$\pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x}) < \pi(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})$$

ならば

$$\pi(\boldsymbol{y})\alpha(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x}) = \pi(\boldsymbol{x})\alpha(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})$$

となるように α を選ぶ．これは

$$\alpha(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x}) = 1, \qquad \alpha(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) = \frac{\pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x})}{\pi(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})} < 1$$

とすればよいことがわかる．したがって，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ を入れ替えることで

$$\begin{aligned}\alpha(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) &= \min\left\{1,\,\frac{\pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x})}{\pi(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})}\right\},\\ K(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}) &= \alpha(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y})\end{aligned}$$

とすると K は詳細的釣合方程式をみたすことがわかる．実際, q が釣合方程式を満たしているときは, $\alpha = 1$ なので自明．そうでないときは $\alpha(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}) = \dfrac{\pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x})}{\pi(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y})}$ なので

$$
\begin{aligned}
\pi(\boldsymbol{x})K(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}) &= \pi(\boldsymbol{x})\alpha(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y})q(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}) \\
&= \pi(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y})\frac{\pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x})}{\pi(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y})} \\
&= \pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

からわかる．

候補分布 q が対称とする．すなわち

$$
q(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}) = q(\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x}) \qquad (\forall \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d)
$$

とする．すると

$$
\alpha(\boldsymbol{x},,\, \boldsymbol{y}) = \min\left\{1,\, \frac{\pi(\boldsymbol{y})}{\pi(\boldsymbol{x})}\right\} \tag{2.10}
$$

eq:mpa-4b

となる．対称な q の例としては

$$
\begin{aligned}
&q(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}) = g(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}), \\
&g : \mathbb{R}^d \longrightarrow [0,\, \infty) \text{ で } g(\boldsymbol{x}) = g(-\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

をみたすものがある．

以上の議論から繰り返し回数 K のアルゴリズムは以下のようになる．

Step 1 ： 初期値 $\boldsymbol{x}_1 \in \mathbb{R}^d$ を選び, $k = 1$ とする．

Step 2 ： $q(\boldsymbol{x}_k,\, \boldsymbol{y})$ に従う疑似乱数 $\boldsymbol{y}$ を生成する．

Step 3 ： $\alpha(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}) = \min\left\{1,\, \dfrac{\pi(\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x}_k)}{\pi(\boldsymbol{x}_k)q(\boldsymbol{x}_k,\, \boldsymbol{y})}\right\}$ を計算する．

Step 4 ： $\mathsf{Unif}(0,\, 1)$ に従う疑似乱数 t を生成する．

Step 5 ：

$$
\begin{aligned}
\alpha(\boldsymbol{x}_k,\, \boldsymbol{y}) \geq t &\Longrightarrow \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{y}. \\
\alpha(\boldsymbol{x}_k,\, \boldsymbol{y}) < t &\Longrightarrow \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k
\end{aligned}
$$

とおく．

Step 6 ： $k = K$ ならば $\boldsymbol{x}_k$ を求めたい乱数として出力する．$k < K$ ならば $k \longrightarrow k+1$ として, Step 2 に戻る．

をみたすものがある．

re:mcmc-4 **注意 2.5.** 上記アルゴリズムの Step 4 で得られた $\boldsymbol{X}_{k+1}$ の分布を確認する．以後は, 簡単のために $d = 1$ とする．$X_k = x_k$ のときの条件付き p.d.f. を $\mathsf{q}(y|\, x_k)$ とする． 以下では $d\mathsf{m}(y)$ を簡単に dy と書くことにする． $Y \sim \mathsf{q}(y|\, x_k)$ かつ $U \sim \mathsf{Unif}(0, 1)$ で Y と U は独立とする．このとき $t \in \mathbb{R}$ に対して

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\mathsf{Pr}(X_{k+1} \le t) &= \frac{d}{dt}\mathsf{Pr}\big(Y \le t \big|\, \alpha(X_k, Y) \ge U\big) \qquad (\because \text{Step 5 より}) \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\mathsf{Pr}\big(Y \le t,\, \alpha(X_k, Y) \ge U)\big)}{\mathsf{Pr}\big(\alpha(X_k, Y) \ge U\big)} \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_{-\infty}^{t}\left\{\int_0^{\alpha(x_k,\, y)} du\right\} q(x_k,\, y)\, dy}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\int_0^{\alpha(x_k,\, y)} du\right\} q(x_k,\, y)\, dy} \\
&= \frac{\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_{-\infty}^{t} \alpha(x_k,\, y) q(x_k,\, y)\, dy}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \alpha(x_k,\, y) q(x_k,\, y)\, dy} \\
&= \frac{\alpha(x_k,\, t) q(x_k,\, t)}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \alpha(x_k,\, y) q(x_k,\, y)\, dy}
\end{aligned}
$$

となり, (2.9) eq:emp-4a から, $X_k = x_k$ を与えたときの X_{k+1} の条件付き分布は

$$
X_{k+1} \sim \frac{K(x_k,\, y)}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} K(x_k,\, y)\, dy}
$$

となることがわかる． □

例 2.6. p.d.f.

$$
\pi(x) = Cx^{-4}\big(1 + |x|^3\big) \qquad (x \in \mathbb{R}) \tag{2.11}
$$
eq:mpa-4c

から乱数を発生させることを考える．ただし

$$
C^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} x^{-4}\big(1 + |x|^3\big)\, dx
$$

である．候補 p.d.f. として

$$
Y|\, x_k \sim \mathsf{N}(x_k,\, 1)
$$

を採用する．すなわち

$$q(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp\left\{-\frac{1}{2}(y - x)^2\right\}$$

である．ここで π は円周率である．すると (2.10) と (2.11) から

eq:mpa-4b eq:mpa-4c

$$\alpha(x, y) = \min\left\{1,\, e^{-y^4+x^4} \frac{1 + |y|^3}{1 + |x|^3}\right\}$$

となる．

以上の議論から繰り返し回数 K のアルゴリズムは以下のようになる．

Step 1 : 初期値 $x_1 \in \mathbb{R}$ を選び, $k = 1$ とする．

Step 2 : $\mathsf{N}(x_k, 1)$ からの疑似乱数 y を生成する．

Step 3 : $\alpha(x_k, y) = \min\left\{1,\, e^{-y^4+x_k^4} \dfrac{1 + |y|^3}{1 + |x_k|^3}\right\}$ を計算する．

Step 4 : $\mathsf{Unif}(0, 1)$ からの疑似乱数 t を生成する．

Step 5 :

$$\alpha(x_k, y) \geq t \Longrightarrow x_{k+1} = y.$$
$$\alpha(x_k, y) < t \Longrightarrow x_{k+1} = x_k$$

とおく．

Step 6 : $k = K$ ならば $\boldsymbol{x}_k$ を求めたい乱数として出力する．$k < K$ ならば $k \longrightarrow k + 1$ として, Step 2 に戻る．

□

2.3 Gibbs サンプリング法

and Somer-
05, pp.98-106)

2.4 ブートストラップ法

ブートストラップ法は推定量の標準誤差を推定する方法である．F を未知の c.d.f. とし, $X_1, X_2, \ldots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{F}$ とする．未知の母数には依存し

ないある関数 g があって $S_n = g(X_1, X_2, \ldots, X_n)$ と書く. すなわち, S_n は統計量である. このときに

$$T(\mathsf{F}) = \mathsf{Var}_{\mathsf{F}}\big[S_n\big]$$

を推定したいとする. 一般にこの量は未知の分布 F に依存する. たとえば $S_n = \overline{X}_n$ のとき,

$$\mathsf{Var}_{\mathsf{F}}\big[S_n\big] = \frac{\sigma^2}{n}$$

であり, 未知の母数 σ に依存する. ただし $\sigma^2 = \mathsf{E}\big[(X_1 - \mu)^2\big]$, $\mu = \mathsf{E}[X_1]$ である. $T(\mathsf{F})$ の推定量として, 差し込み推定量を考える.

$$T(\widehat{\mathsf{F}}_n) = \mathsf{Var}_{\widehat{\mathsf{F}}_n}\big[S_n\big].$$

ここで 大数の法則を思い出す. $B \in \mathbb{N}$ とし, G を c.d.f. とする. $Y_1, Y_2, \ldots, Y_B \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{G}$ とする. $B \to \infty$ のとき

$$\overline{Y}_B = \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B} Y_j \xrightarrow{P} \mathsf{E}[Y]$$

となる. ただし $Y \sim \mathsf{G}$ である. さらに, 関数 h は有限な期待値 $h(Y)$ をもつとする. すると $B \to \infty$ のとき

$$\frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B} h(Y_j) \xrightarrow{P} \mathsf{E}\big[h(Y)\big].$$

$\mathsf{Var}_{\widehat{\mathsf{F}}_n}\big[S_n\big]$ をシミュレーションで近似することを考える. $\mathsf{Var}_{\widehat{\mathsf{F}}_n}\big[S_n\big]$ は「データが分布 $\widehat{\mathsf{F}}_n$ に独立同一にしたがっているときの S_n の分散」と考えることができる. $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^* \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \widehat{\mathsf{F}}_n$ とし, $S_n^* = g(X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*)$ を計算する.

- 現実の世界: $\mathsf{F} \Longrightarrow X_1, X_2, \ldots, X_n \Longrightarrow S_n = g(X_1, X_2, \ldots, X_n)$.
- ブートストラップの世界: $\widehat{\mathsf{F}}_n \Longrightarrow X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^* \Longrightarrow S_n^* = g(X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*)$.

では, $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*$ を $\widehat{\mathsf{F}}_n$ からどのように発生させるのだろうか? $\widehat{\mathsf{F}}_n$ は各 $X_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ に確率 $1/n$ をのせたものであったことを思い出そう.

$\widehat{\mathsf{F}}_n$ に従う確率変数 $X_j^*\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ はもとのデータ
$X_1, X_2, \ldots, X_n$ から無作為抽出されたものと同じ分布になる

したがって $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^* \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \widehat{\mathsf{F}}_n$ を発生させるためには, $X_1, X_2, \ldots, X_n$ からデータを復元抽出すればよい. 手続きをまとめると以下のようになる.

- $X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^* \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \widehat{\mathsf{F}}_n$ を発生させる. $X_1, X_2, \ldots, X_n$ から復元抽出をするだけでよい.
- $S_n^* = g(X_1^*, X_2^*, \ldots, X_n^*)$ を計算する.
- 上のふたつのステップを B 回繰り返し, $S_{n,1}^*, S_{n,2}^*, \ldots, S_{n,B}^*$ を求める.
- $$\mathsf{v}_{\text{boot}} = \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B}\left(S_{n,j}^* - \frac{1}{B}\sum_{k=1}^{B}S_{n,k}^*\right)^2$$
  を計算する.

このとき

$$\mathsf{Var}_F\big(S_n\big) \overbrace{\approx}^{\text{そん色ない}} \mathsf{Var}_{\widehat{F}_n}\big(S_n\big) \overbrace{\approx}^{\text{小さい}} \mathsf{v}_{\text{boot}}.$$

$0 < \alpha < 1$ に対して, $z_{\alpha/2}$ を標準正規分布の両側 α 点とすれば, $T(\mathsf{F}) = \mathsf{E}\big[S_n\big]$ とし

$$\widehat{\mathsf{se}}_{\text{boot}} := \sqrt{\mathsf{v}_{\text{boot}}}$$

としたとき

$$S_n \pm z_{\alpha/2}\widehat{\mathsf{se}}_{\text{boot}}$$

は $T(\mathsf{F})$ の近似 $(1-\alpha)\%$ 信頼区間となる. すなわち

$$\mathsf{Pr}\left(S_n - z_{\alpha/2}\widehat{\mathsf{se}}_{\text{boot}} \leq T(F) \leq S_n + z_{\alpha/2}\widehat{\mathsf{se}}_{\text{boot}}\right) \approx 1-\alpha$$

となることが期待される. 実際, 適当な仮定のもとで上記の主張を理論的に正当化できることが知られている.

第3章　最尤推定値の計算と EM アルゴリズム

ここでは最尤推定値を数値計算で求める方法を 3 つ紹介する．節 3.1 では Newton-Raphson 法による最尤推定値の計算法を説明する．次節では, Newton-Raphson 法を修正した Fisher のスコア法を説明する．節 3.3 では, 欠損値データに対して最尤推定値を求めるときに有効な EM アルゴリズムについて説明する．

3.1　Newton-Raphson 法

sec:3-1

いま $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を 2 回微分可能な関数とし, 方程式 $g(x) = 0$ をみたす解 $x = c$ をみつけたいとする．そのために c に近い x のまわりで, 関数 g を Taylor 展開をする．

$$0 = g(c) \approx g(x) + \dot{g}(x)(c - x)$$

を得る． ただし $\dot{g}(x) = dg/dx$ である．また「$\approx$」 は「近い」と漠然と理解することにする．

$\dot{g}(x) \neq 0$ のとき $g(x) + \dot{g}(x)(x - c) \approx 0$ を c について解けば

$$c \approx x - \frac{g(x)}{\dot{g}(x)}$$

を得る．初期値 x_0 を取り点列 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ を逐次的に

$$x_{n+1} = x_n - \frac{g(x_n)}{\dot{g}(x_n)}, \qquad n = 0, 1, \ldots \tag{3.1}$$

eq:newton1

で定義する．そして $|g(x_n)/\dot{g}(x_n)|$ が十分小さくなるまで操作を繰り返すとする．

区間 $I = [a, b]$ 上で $\ddot{g}(x) > 0$ かつ $g(a)g(b) < 0$ のとき, $g(x_0) > 0$ となる $x_0 \in (a, b)$ をひとつ見つければ, (3.1) で得られる点列 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ は I 上における零点 c に収束することが知られている[1]. Newton-Raphson 法

[1] 杉浦「解析入門 I (東京大学出版会)」p.105 を参照.

を用いて尤度方程式の解として定義される最尤推定値を求めることができる．

いま $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$ は同時 p.d.f. または p.m.f. $p(\boldsymbol{x}|\,\theta)$ を持つとする．ここで, p はほとんどいたるところの $\boldsymbol{x}$ で θ に関して 2 回連続微分可能とする．また $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}$ で $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ である．$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ が与えられたときの尤度関数を $\mathsf{lik}_n(\theta|\,\boldsymbol{x}) = \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)$ と書くことにする．したがって, 最尤推定値 $\widehat{\theta}_n$ は関数

$$\Theta \ni \theta \mapsto \mathsf{lik}_n(\theta|\,\boldsymbol{x})$$

の θ に関する最大値である．したがって, 最尤推定値 $\widehat{\theta}_n$ は尤度方程式

$$S_n(\theta|\,\boldsymbol{x}) = \frac{d}{d\theta}\log \mathsf{lik}_n(\theta|\,\boldsymbol{x}) = 0 \tag{3.2}$$ eq:lequation

の解となる．

方程式 (3.2) の解である最尤推定値を Newton-Raphson 法で求めよう．そのために, $m\,(m \in \mathbb{N})$ 回操作を行ったのちの θ の推定値を $\widehat{\theta}_n^{(m)}(\boldsymbol{x})$ とする．(3.1) から $H_n(\widehat{\theta}_n^{(m)}|\,\boldsymbol{x}) \neq 0$ のとき

$$\widehat{\theta}_n^{(m+1)}(\boldsymbol{x}) = \widehat{\theta}_n^{(m)}(\boldsymbol{x}) + \frac{S_n(\widehat{\theta}_n^{(m)}(\boldsymbol{x})|\,\boldsymbol{x})}{H_n(\widehat{\theta}_n^{(m)}(\boldsymbol{x})|\,\boldsymbol{x})}$$

と書ける[2]．ただし

$$H_n(\theta|\,\boldsymbol{x}) = -\frac{d^2}{d\theta^2}\log \mathsf{lik}_n(\theta|\,\boldsymbol{x})$$

である．この操作を $\widehat{\theta}_n^{(m+1)}(\boldsymbol{x})$ と $\widehat{\theta}_n^{(m)}(\boldsymbol{x})$ との差が十分小さくなるまで繰り返す．

re:newton-1 **注意 3.1.** H_n の定義において, 対数尤度の 2 階微分に「マイナス」をつけるのが統計学の慣例である．このような面倒なことをする理由は, 真の母数が統計的モデルを添え字付ける母数空間に含まれる場合には, 対数尤度の 2 階微分にマイナスをつけて, 標本に対応する確率変数を代入して, 期待値を取ったものを Fisher 情報量に一致するからである． □

Newton-Raphson 法を用いるために初期推定値 $\widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{x})$ が必要である．初期推定値に何を用いるかによってアルゴリズムは収束したりしなかったりする．また尤度方程式 $S_n(\theta|\,\boldsymbol{x}) = 0$ が複数の解を持つ場合には, 尤度方程式 (3.2) の解は尤度関数の極小点, 極大点, 鞍馬点 (saddle point) に対応するので, $\widehat{\theta}_n^{(m)}(\boldsymbol{x})$ は最尤推定値とは異なる点に収束する可能性がある．収束先が最尤推定値と異なるかどうかが不明な場合には, 複数の初期

[2] (3.1) の右辺の第 2 項の「-」は H に入れていることに注意せよ．

値で試すとよい．また初期値として, 別の推定値 (モーメント推定量などの別の推定量の実現値) を用いることもできる．

たとえば $\widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{X})$ が θ の十分よい推定量ならば一段階推定量

$$\widehat{\theta}_n^{(1)}(\boldsymbol{X}) = \widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{X}) + \frac{S_n(\widehat{\theta}_n^{(0)} |\, (\boldsymbol{X}))}{H_n(\widehat{\theta}_n^{(0)} |\, (\boldsymbol{X}))}$$

は最尤推定量と同じ性質を漸近的には同じ性質をもつことが知られている．ただし, $\widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{X})$, $S(\widehat{\theta}_n^{(0)} |\, \boldsymbol{X})$ と $H_n(\widehat{\theta}_n^{(0)} |\, \boldsymbol{X})$ は $\widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{x})$, $S_n(\widehat{\theta}_n^{(0)} |\, \boldsymbol{x})$, $H_n(\widehat{\theta}_n^{(0)} |\, \boldsymbol{x})$ の $\boldsymbol{x}$ に $\boldsymbol{X}$ を形式的に代入したものとする． 正確に言えば $\sqrt{n}\big\{\widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{X}) - \theta\big\}$ は正規分布に分布収束するならば $\sqrt{n}\big\{\widehat{\theta}_n^{(1)}(\boldsymbol{X}) - \widehat{\theta}_n^{(0)}(\boldsymbol{X})\big\} \xrightarrow{P} 0\,(n \to \infty)$ となる．ただし $\widehat{\theta}_n(\boldsymbol{X})$ は θ の最尤推定量である．

auchy-newton

例 3.2. この例では推定値のみを扱うので $\widehat{\theta}_n(\boldsymbol{x})$ を $\widehat{\theta}_n$ と書くことにする．$S(\theta |\, \boldsymbol{x})$, $H(\theta |\, \boldsymbol{x})$ も $S(\theta)$, $H(\theta)$ と書く．$\theta > 0$ とする．つぎの p.d.f. を持つ Cauchy 分布からの大きさ n のランダム標本を $X_1, X_2, \ldots, X_n$ とする．

$$\mathsf{p}(x |\, \theta) = \frac{1}{\pi\{1 + (x-\theta)^2\}} \qquad (-\infty < x < \infty).$$

このとき実現値 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ に対する対数尤度関数は

$$\log \mathsf{lik}_n(\theta) = -\sum_{i=1}^{n} \log\{1 + (x_i - \theta)^2\} - n \log \pi$$

となる．最尤推定値 $\widehat{\theta}_n$ は尤度方程式

$$S_n(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \frac{2(x_i - \theta)}{1 + (x_i - \theta)^2} = 0$$

の解である．$S_n(\theta)$ は θ の単調関数でないので, 与えられた $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ に対して尤度方程式は複数の解を持つ可能性がある．したがって適切な初期値 $\widehat{\theta}^{(0)}$ を選ぶことが重要である．Cauchy 分布は $\mathsf{E}[X_1]$ が定義されないので, 初期値として標本平均を用いるのは適当ではない．X_1 の分布は θ に関して対称であることに注目して, 標本中央値を初期値 $\widehat{\theta}^{(0)}$ として用いる．これを用いて逐次的に $\widehat{\theta}^{(m)}\,(m = 1, 2, \ldots)$ を

$$\widehat{\theta}_n^{(m)} = \widehat{\theta}_n^{(m-1)} + \frac{S_n(\widehat{\theta}^{(m-1)})}{H_n(\widehat{\theta}^{(m-1)})}$$

で定める．ただし

$$H_n(\theta) = 2\sum_{i=1}^{n} \frac{1 - (x_i - \theta)^2}{\{1 + (x_i - \theta)^2\}^2}$$

である．$\theta = 10$ の Cauchy 分布から標本の大きさ $n = 100$ のランダム標本に基づいて最尤推定値を求めた例が次である．

m	$\widehat{\theta}^{(m)}_{100}$	$\log \mathsf{lik}_{100}(\widehat{\theta}^{(m)}_{100}) + 100\log(\pi)$
0	9.932387	11.95144
1	9.98055	11.9517
2	9.980323	11.9517
3	9.980323	11.9517

□

つぎに母数の次元が $k\,(k \in \mathbb{N},\, k \geq 2)$ の場合を考える. 母数 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1,\, \theta_2,\, \ldots,\, \theta_k)^\top$ が k 次元のとき, $\boldsymbol{\theta}$ の最尤推定値 $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n(\boldsymbol{x})$ は尤度方程式

$$\boldsymbol{S}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}_k$$

の解として定義される. ただし

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) &= \left(\frac{\partial}{\partial\theta_1}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}),\, \frac{\partial}{\partial\theta_2}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}),\, \ldots,\, \frac{\partial}{\partial\theta_k}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x})\right)^\top \\ \mathbf{0}_k &= (\underbrace{0,\, 0,\, \ldots,\, 0}_{k\ \text{個}})^\top\end{aligned}$$

である. さらに $\mathbf{H}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x})$ を $k \times k$ の行列で, $i,\, j = 1,\, 2,\, \ldots,\, k$ について $\mathbf{H}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x})$ の $(i,\, j)$ 成分は

$$H_{n,\,ij}(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) = -\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta})$$

で定義されるものとする. $\mathbf{H}_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m-1)}_n|\,\boldsymbol{x})$ が正則のとき, $m\,(m \in \mathbb{N})$ 回目の逐次解 $\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m)}_n(\boldsymbol{x})$ は

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m)}_n(\boldsymbol{x}) = \widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m-1)}_n(\boldsymbol{x}) + \left\{\mathbf{H}_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m-1)}_n|\,\boldsymbol{x})\right\}^{-1} S_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m-1)}_n|\,\boldsymbol{x}) \tag{3.3}$$

eq:newton2

で定義される.

3.2 Fisher のスコア法

sec:3-2

Newton-Raphson アルゴリズムの簡単な修正として Fisher のスコアアルゴリズムがある. Fisher のスコアアルゴリズムは (3.3) の中の $\boldsymbol{H}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x})$ の代わりに

eq:newton2

$$\mathbf{H}^*_n(\boldsymbol{\theta}) = \mathsf{E}_\theta[\mathbf{H}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{X})] = -\mathsf{E}_\theta\left[\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}^\top}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{X})\right]$$

である. ただし

$$\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}^\top}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{X})$$

の $(i,\, j)$ 成分は

$$\frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\log \mathsf{lik}_n(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{X}) \qquad (i,\, j = 1,\, 2,\, \ldots,\, k)$$

である.

したがって $m\,(m \in \mathbb{N})$ 回目の逐次解 $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^{(m-1)}(\boldsymbol{x})$ は

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^{(m)}(\boldsymbol{x}) = \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^{(m-1)}(\boldsymbol{x}) + \left[\mathbf{H}_n^*(\widehat{\boldsymbol{\theta}}^{(m-1)})\right]^{-1}\boldsymbol{S}_n\big(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n^{(m-1)}|\,\boldsymbol{x}\big) \tag{3.4}$$

eq:fisher-1

で定義される.

例 3.3. (例 3.2 の続き) ex:cauchy-newton

$$H_n(\theta) = 2\sum_{i=1}^{n}\frac{1-(x_i-\theta)^2}{\{1+(x_i-\theta)^2\}^2}$$

から

$$H_n^*(\theta) = \frac{2n}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1-(x-\theta)^2}{\{1+(x-\theta)^2\}^3}\,dx = \frac{n}{2} \tag{3.5}$$

eq:keisan

から Fisher のスコアアルゴリズムは

$$\widehat{\theta}_n^{(m)} = \widehat{\theta}_n^{(m-1)} + \frac{4}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i-\widehat{\theta}^{(m-1)}}{1+(x_i-\widehat{\theta}^{(m-1)})^2} \qquad (m = 1,\, 2,\, \ldots)$$

となる. 最後に (3.5) eq:keisan の計算をする. $z = x-\theta$ とおく. さらに $y = \tan\gamma$ とおけば

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1-y^2}{(1+y^2)^3}\,dy &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{2}{(1+y^2)^3}\,dy - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(1+y^2)^2}\,dy\\
&= 2\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{1}{(1+\tan\gamma^2)^3}\frac{1}{\cos\gamma^2}\,d\gamma - \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{1}{(1+\tan\gamma^2)^2}\frac{1}{\cos\gamma^2}\,d\gamma\\
&= 2\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos^4\gamma\,d\gamma - \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos^2\gamma\,d\gamma,\\
&= 2\left[\frac{\cos 4\gamma+1}{8} + \cos 2\gamma + \frac{1}{4}\right]_{-\pi/2}^{\pi/2} - \left[\frac{\cos 2\gamma+1}{2}\right]_{-\pi/2}^{\pi/2}\\
&= \frac{\pi}{4}
\end{aligned}$$

となることがわかる.

3.3 EM アルゴリズム

sec:3-3

$(\mathbb{X}, \mathcal{B}, \mu)$ を測度空間とする．ここで μ は σ 有限な測度[3]とする．$\mathbb{X}$ 値確率変数 $\boldsymbol{X}$ は母数 $\theta\,(\theta \in \Theta)$ の確率測度 P_θ を持つ．さらに P_θ は μ に関する p.d.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,\theta)$ をもつとする．すなわち

$$\mathsf{P}_\theta(B) = \int_B \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)\,d\mu(\boldsymbol{x}) \qquad (B \in \mathcal{B}).$$

をみたす非負関数 p が存在するとする．

いま $(\mathbb{X}, \mathcal{B})$ は隠れた空間で $\boldsymbol{X}$ のすべてを観測できないとする．実際にはある可測空間 $(\mathbb{Y}, \mathcal{C})$ と可測関数 $T : \mathbb{X} \mapsto \mathbb{Y}$ が存在して $\boldsymbol{Y} = T(\boldsymbol{X})$ のみが観測できるとする．T は $(\mathbb{Y}, \mathcal{C})$ 上の測度を誘導する．

$$\mathsf{Q}_\theta(C) = \mathsf{P}_\theta \circ T^{-1}(C) = \mathsf{P}_\theta(T^{-1}(C)) \qquad (C \in \mathcal{C})$$

とする．さらに ν を $(\mathbb{Y}, \mathcal{C})$ 上の σ 有限な測度としたとき, 確率測度 Q_θ は測度 ν に関して p.d.f. $\mathsf{q}(\cdot\,|\,\theta)$ を持つとする．

$$\mathsf{Q}_\theta(C) = \int_C \mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)\,d\nu(\boldsymbol{y}) \qquad (C \in \mathcal{C})$$

である．

EM アルゴリズムは観測 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{y}$ が与えられたとき, θ の関数として $\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)$ を最大化することで θ の最尤推定値を求める方法である．

EM アルゴリズムは以下のように行う．$\boldsymbol{y}$ が与えられたとき θ の初期推定値の $\widehat{\theta}^{(0)}(\boldsymbol{y})$ から始める．$\widehat{\theta}^{(0)}(\boldsymbol{y})$ より $\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}$ と $\mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(0)}} = \mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}} \circ T^{-1}$ が初期の推定された確率測度となる．

E 段階 (E-Step): 各 $\theta \in \Theta$ に対し, 条件付き期待値

$$\phi_1(\theta|\,\boldsymbol{y}) = \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\theta)\,\middle|\,T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \tag{3.6}$$

eq:emalgo-1

を求める．ただし $\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(0)}}[\,\cdot\,]$ は $\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\theta}^{(0)})$ に関して期待値を取ったものである．同様に $\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}$ は $\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\theta}^{(0)})$ のもとでの確率分布である．$\phi_1(\theta)$ は $\boldsymbol{y}$ の関数になることに注意する．$\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\big(T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\big) > 0$ [4]の場合には, $T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}$ が与えられたときの $\boldsymbol{X}$ の条件付き分布を求め, それに関して関数 $\boldsymbol{x} \mapsto \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)$ の期待値を求めればよい．$\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\big(T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\big) = 0$ のときは注意が必要であるが (3.6) の正当化は可能であることが知られている．以後は簡単のために $\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\big(T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\big) > 0$ の場合を考える．

eq:emalgo-1

みればよいの
記すること.
/30 記.

[3]ある部分集合の列 $\{G_n\}_{n=1}^{\infty}$, $G_n \in \mathcal{A}$ で $\cup_{n=1}^{\infty} G_n = \mathcal{X}$ かつ各 n に対して $\mu(G_n) < \infty$ なるものが存在することである．

[4]この記法には乱用があることに注意せよ．本来ならば, $\mathsf{Pr}\big(T(\boldsymbol{x}) = y\big)$ と記すべきところを $\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\big(T(\boldsymbol{X}) = y\big) := \mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\big(\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{X};\, T(\boldsymbol{x}) = y\}\big)$ の意味で書いている．

M 段階 (M-Step): θ に関して

$$\phi_1(\theta|\,\boldsymbol{y})$$

を最大化する．最大を与える点 (存在すれば) を $\widehat{\theta}^{(1)}(\boldsymbol{y})$ とおく．つぎに $\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(0)}}$ の代わりに $\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(1)}}$ を用いる．

E 段階 (E-Step): 各 $\theta \in \Theta$ に対して

$$\phi_2(\theta|\,\boldsymbol{y}) = \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(1)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\theta)\middle|\,T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right]$$

を求める．

M 段階 (M-Step): θ に関して

$$\phi_2(\theta|\,\boldsymbol{y})$$

を最大化する．最大を与える点 (存在すれば) を $\widehat{\theta}^{(2)}(\boldsymbol{y})$ とおく．
一般には m 段階 ($m = 1, 2, \ldots$) は以下のようになる．

E 段階 (E-Step): 各 $\theta \in \Theta$ に対し, 条件付き期待値

$$\phi_m(\theta|\,\boldsymbol{y}) = \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\theta)\middle|\,T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \tag{3.7}$$ eq:emalgo-2

を求める．

M 段階 (M-Step): θ に関して

$$\phi_m(\theta|\,\boldsymbol{y})$$

を最大化する．最大を与える点 (存在すれば) を $\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y})$ とおく．

この操作を $\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y})$ が $\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y})$ とほとんど変化がなくなるまで繰り返す．

例 3.4. $\theta > 0$ とする．$X_1, X_2, \ldots, X_n$ は独立同一に指数分布

$$\mathsf{p}(x|\,\theta) = \frac{1}{\theta}e^{-x/\theta}\mathbb{1}_{(0,\,\infty)}(x), \qquad \mathbb{1}_{(0,\,\infty)}(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x \leq 0) \end{cases}$$

に従う[5]とする．しかし各 $X_i\,(i = 1, 2, \ldots, n)$ は直接観測されず, 各 X_i の整数部分のみが観測されるとする．すなわち $Y_i = \lfloor X_i \rfloor$ である．$Y_1, Y_2, \ldots, Y_n$ の観測に基づいて θ の最尤推定値を求めよう．

[5]指数分布の p.d.f. は

$$\mathsf{p}(x|\,\lambda) = \lambda e^{-\lambda x}\mathbb{1}_{(0,\,\infty)}(x)$$

であるが, 母数を $\lambda = 1/\theta$ としている．

この場合, $\mathbb{X} = (0,\,\infty)^n$, $\mathcal{B}$ は $(0,\,\infty)^n$ 上の Borel 可測集合族[6]であり, P_θ は $\mathbb{R}^n$ 上の Lebesgue 測度[7]に関する p.d.f.

$$\mathsf{p}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}|\,\theta) = \mathsf{p}_{\boldsymbol{X}}(x_1,\,x_2,\,\ldots,\,x_n|\,\theta) = \prod_{i=1}^{n} \mathsf{p}(x_i|\,\theta) \tag{3.8}$$

$$= \theta^{-n} \exp\biggl(-\sum_{i=1}^{n} x_i/\theta\biggr) \qquad \bigl(\boldsymbol{x} = (x_1,\,x_2,\,\ldots,\,x_n)\bigr) \tag{3.9}$$

eq:ex3-1

を持つ．また $\mathbb{Y} = \{0,\,1,\,\ldots\}^n$ で, $\mathcal{C}$ は $\mathbb{Y}$ のすべての部分集合の集まりからなる σ 加法族である．さらに関数 $T:\mathbb{X} \mapsto \mathbb{Y}$ は

$$T(\boldsymbol{x}) = (\lfloor x_1 \rfloor,\,\lfloor x_2 \rfloor,\,\ldots,\,\lfloor x_n \rfloor)$$

で定義される．

$y \in \{0,\,1,\,2,\,\ldots\}$ に対して,

$$\mathsf{Pr}(Y_i = y) = \int_y^{y+1} \mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = e^{-y/\theta}(1 - e^{-1/\theta}) \tag{3.10}$$

eq:emalgo-2a

となる．このことより

$$\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta) = \mathsf{q}(y_1,\,y_2,\,\ldots,\,y_n|\,\theta) = \Pi_{i=1}^{n} e^{-y_i/\theta}(1 - e^{-1/\theta})$$

となることがわかる．直接 $\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)$ を θ に関して最大化して θ の最尤推定値を求めることはできるが, EM アルゴリズムを用いるとどうなるかを観てみよう．

まず $\lfloor X_i \rfloor = y_i$ が与えられたとき, θ のもとでの X_i の条件付き p.d.f. を求める．

$$\begin{aligned}
\mathsf{k}_\theta(x|\,y_i) &= \lim_{\Delta x \to 0;\,\Delta x > 0} \frac{1}{\Delta x} \frac{\mathsf{Pr}(x \le X_i < x + \Delta x,\,\lfloor X_i \rfloor = y_i)}{\mathsf{Pr}(\lfloor X_i \rfloor = y_i)} \\
&= \frac{1}{\mathsf{Pr}(\lfloor X_i \rfloor = y_i)} \lim_{\Delta x \to 0;\,\Delta x > 0} \frac{1}{\Delta x} \int_x^{x+\Delta x} \frac{1}{\theta} e^{-z/\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(z)\,dz \\
&= \frac{1}{\mathsf{Pr}(\lfloor X_i \rfloor = y_i)} \lim_{\Delta x \to 0;\,\Delta x > 0} \frac{1}{\Delta x} \Bigl[-e^{-z/\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(z)\Bigr]_x^{x+\Delta x} \\
&= \frac{1}{\mathsf{Pr}(\lfloor X_i \rfloor = y_i)} \lim_{\Delta x \to 0;\,\Delta x > 0} \frac{-e^{-(x+\Delta x)/\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(x + \Delta x) + e^{-x/\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(x)}{\Delta x} \\
&= \frac{-e^{-x/\theta}}{\mathsf{Pr}(\lfloor X_i \rfloor = y_i)} \lim_{\Delta x \to 0;\,\Delta x > 0} \frac{-e^{-\Delta x/\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(x + \Delta x) + \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(x)}{\Delta x} \\
&= \frac{-e^{-x/\theta}}{\mathsf{Pr}(\lfloor X_i \rfloor = y_i)} \Bigl(-\frac{1}{\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(x)\Bigr) \\
&= \frac{\theta^{-1} e^{-x/\theta} \mathbb{1}_{[y_i,\,y_i+1)}(x)}{e^{-y_i/\theta}(1 - e^{-y_i/\theta})} \qquad (\because (3.10))
\end{aligned}$$

eq:emalgo-2a

[6] $(0,\,\infty)^n$ の開集合族を含む最小の σ 加法族のこと．

[7] $d\boldsymbol{x}$ と書くことにする．また $\mathbb{R}$ 上の Lebesgue 測度は dx と書く．

を得る．これより

$$
\begin{aligned}
\phi_1(\theta) &= \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\left[\log p(\boldsymbol{X}|\,\theta)\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right] \\
&= \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\left[-\frac{1}{\theta}\sum_{i=1}^{n}X_i - n\log\theta\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right] \qquad (\text{eq:ex3-1}\ (3.9)\ \text{を代入}) \\
&= -\frac{1}{\theta}\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(0)}}\left[\sum_{i=1}^{n}X_i\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right] - n\log\theta
\end{aligned}
$$

と

$$
\begin{aligned}
\mathsf{E}_{P_{\widehat{\theta}^{(0)}}}\left[X_i|T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right] &= \int_{-\infty}^{\infty} x\,\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(0)}}(x|\,y_i)\,dx \\
&= \frac{1}{\widehat{\theta}^{(0)}e^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}}(1-e^{-1/\widehat{\theta}^{(0)}})}\int_{y_i}^{y_i+1} xe^{-x/\widehat{\theta}^{(0)}}\,dx \qquad (\text{eq:emalgo-2a}\ (3.10)\ \text{を代入}) \\
&= \frac{1}{e^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}}(1-e^{-1/\widehat{\theta}^{(0)}})}\left\{\left[-xe^{-x/\widehat{\theta}^{(0)}}\right]_{y_i}^{y_i+1} + \int_{y_i}^{y_i+1} e^{-x/\widehat{\theta}^{(0)}}\,dx\right\} \\
&= \frac{1}{e^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}}(1-e^{-1/\widehat{\theta}^{(0)}})}\Big\{-(y_i+1)e^{-(y_i+1)/\widehat{\theta}^{(0)}} + y_ie^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}} \\
&\qquad - \widehat{\theta}^{(0)}e^{-(y_i+1)/\widehat{\theta}^{(0)}} + \widehat{\theta}^{(0)}e^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}}\Big\} \\
&= \frac{1}{e^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}}(1-e^{-1/\widehat{\theta}^{(0)}})}\left\{-(y_i+\widehat{\theta}^{(0)})e^{-y_i/\widehat{\theta}^{(0)}}(1-e^{-1/\widehat{\theta}^{(0)}}) - e^{-(y_i+1)/\widehat{\theta}^{(0)}}\right\} \\
&= -\left(y_i - \frac{1}{e^{1/\widehat{\theta}^{(0)}}-1} + \widehat{\theta}^{(0)}\right)
\end{aligned}
$$

となる．よって E 段階は

$$
\phi_1(\theta|\,\boldsymbol{y}) = n\left(-\log\theta + \frac{1}{\theta(e^{1/\widehat{\theta}^{(0)}}-1)} - \frac{\bar{y}_n+\widehat{\theta}^{(0)}}{\theta}\right)
$$

となる．ただし $\bar{y}_n=(1/n)\sum_{i=1}^{n}y_i$ である．次に M 段階は上の式を θ に関して最大化する：

$$
\widehat{\theta}^{(1)}(\boldsymbol{y}) = \arg\max_\theta\phi_1(\theta|\,\boldsymbol{y}) = \widehat{\theta}^{(0)}(\boldsymbol{y}) + \bar{y}_n - \frac{1}{e^{1/\widehat{\theta}^{(0)}(\boldsymbol{y})}-1}
$$

となる[8]．したがって EM アルゴリズムは

$$
\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}) = \arg\max_\theta\phi_m(\theta|\,\boldsymbol{y}) = \widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}) + \bar{y}_n - \frac{1}{e^{1/\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y})}-1}
$$

で与えられる． □

[8] $\arg\max_\theta\phi(\theta)$ は関数 $\theta\mapsto\phi_\theta$ を最大にする点の集合を表す．したがって厳密には $\widehat{\theta}^{(1)}\in\arg\max_\theta\phi(\theta)$ と書くべきである．たとえば $\arg\max_{0\le\theta4\pi}\sin\theta=\{\pi/2,\,5\pi/2\}$ となる．

つぎに EM アルゴリズムがどうしてうまく働くかを観る. $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{y}$ が与えられたとき, $\widehat{\theta}$ を θ の最尤推定値とする. さらに, Θ の内部上で関数

$$\Theta \ni \theta \mapsto q(\boldsymbol{y}|\,\theta) \in \mathbb{R}$$

は微分可能と仮定する. このとき $\widehat{\theta}$ は関数 $\theta \mapsto \mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)$ を最大にする点なので

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)\bigg|_{\theta=\widehat{\theta}} = 0$$

である. ただし x が変数の関数 $f(x)$ に x_0 を代入することを $f(x)\big|_{x=x_0}$ と書いている.

いま $\widehat{\theta}^{(\infty)}(\boldsymbol{y})$ は Θ の内点とし, EM アルゴリズムの収束先とする. このとき, $\widehat{\theta}^{(\infty)}(\boldsymbol{y})$ は関数

$$\theta \mapsto \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(\infty)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}\big|\,\theta)|T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right] \tag{3.11}$$ eq:2.11

を最大化する. (3.11) は Θ の内部で微分可能とし, 期待値と微分記号の交換が可能とすれば, $\theta=\widehat{\theta}^{(\infty)}(\boldsymbol{y})$ において

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\theta}\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(\infty)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}\big|\,\theta)|T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\bigg|_{\theta=\widehat{\theta}^{(\infty)}} &= \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(\infty)}}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\theta)\bigg|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\bigg|_{\theta=\widehat{\theta}^{(\infty)}} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.12}$$ eq:emalgo-3

となる. ここで

$$S(\theta|\,\boldsymbol{x}) = \frac{\partial}{\partial\theta}\log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)$$

とおけば, 適当な仮定のもとで

$$\begin{aligned}\mathsf{E}_{\theta}\left[S(\theta|\,\boldsymbol{X})\big|T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right] &= \int_{T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}} S(\theta|\,\boldsymbol{x})\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)\,d\mu(\boldsymbol{x}) \\ &= \int_{T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)\right)d\mu(\boldsymbol{x}) \\ &= \frac{\partial}{\partial\theta}\int_{T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}}\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)\mu(d\boldsymbol{x}) \\ &= \frac{\partial}{\partial\theta}\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)\end{aligned}$$

となる. すなわち, EM アルゴリズムの収束先 $\widehat{\theta}^{(\infty)}$ は, $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{y}$ を与えたときの θ の最尤推定値 $\widehat{\theta}$ に一致することがわかる.

よって, $\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)>0$ となる $\boldsymbol{y}$ に対して, (3.12) は

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\log \mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)\bigg|_{\theta=\widehat{\theta}^{(\infty)}} = 0 \tag{3.13}$$ eq:emalgo-4

を意味する．したがって，最尤推定値が一意に存在するならば，$\widehat{\theta}=\widehat{\theta}^{(\infty)}$ となる．

$\theta=\widehat{\theta}^{(\infty)}$ なる解をもつ方程式

$$\mathsf{E}_{\theta}\{S(\theta|\,\boldsymbol{X})|T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\}=0$$

を**自己一致方程式** (self-consistency equation) という．

以上の議論から，つぎの場合には EM アルゴリズムはうまく機能されるかは保証されていないことがわかる．

1. 最大値を与える点が Θ の内点に含まれない．
2. 尤度関数がその最大を取る点で微分可能ではない．
3. スコア方程式 eq:emalgo-4 (3.13) が複数の解を持ち，そのいくつかは尤度関数を最大にしない．

最後に EM アルゴリズムの各段階で，対数尤度関数 $\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)$ は非減少であることを示す：すなわち

$$\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))\geq\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y})),\qquad m=0,\,1,\,\ldots \tag{3.14}$$ eq:emalgo-5

を示す．まず $T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}$ を与えたとき，$\boldsymbol{X}$ の条件付 p.d.f. $\mathsf{k}_{\theta}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})$ は

$$\mathsf{k}_{\theta}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})=\frac{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)}{\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)}\mathbb{1}_{T^{-1}(\boldsymbol{y})}(\boldsymbol{x})$$

となることに注意する．上式から，$T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}$, $\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)>0$, $\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)>0$ の場合，上式から

$$\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)=\log\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\theta)-\log\mathsf{k}_{\theta}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})$$

を得る．

以下では最尤推定値の候補は $\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)>0$ をみたしていなければいけないので，$\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)>0$ を仮定して議論を進める．なぜならば，そうでなければ，$\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)>0$ を最大にしないことからこのことはわかる．

各 m に対し

$$\begin{aligned}\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)&=\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\theta)\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\\&=\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log\mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\theta)-\log\mathsf{k}_{\theta}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\\&=\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log\mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\theta)\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]-\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log\mathsf{k}_{\theta}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\end{aligned} \tag{3.15}$$ eq:emalgo-6

となる．上式の最右辺の各項を別々に評価していく．

まず, $\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y})$ の定義から

$$\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\widehat{\theta}^{(m)})\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]-\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{p}(\boldsymbol{X}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)})\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\geq 0 \tag{3.16}$$

eq:emalgo-7

がわかる.

次に, (eq:emalgo-6 3.15) の最右辺の 2 項目を評価する：

$$\begin{aligned}
&\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]-\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\\
&\qquad=\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]\\
&\qquad\leq\log\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right]
\end{aligned}\tag{3.17}$$

eq:emalgo-6a

となる. 最後の不等号は Jensen(注意 re:0-3-11 4.55) の不等式よりわかる.

いま

$$\mathsf{g}(\boldsymbol{y})=\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left(\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}\,\middle|\,T(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{y}\right)\tag{3.18}$$

eq:emalgo-8b

とおく. 条件付き期待値の定義から任意の $C\in\mathcal{C}$ に対し

$$\int_C g(\boldsymbol{y})\,d\mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{y})=\int_{T^{-1}(C)}\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})}{k_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})}\,d\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{x})\tag{3.19}$$

eq:emalgo-8

となる. しかし

$$\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{y})}=\frac{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))}{\mathsf{q}(T(\boldsymbol{x})|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))}\cdot\frac{\mathsf{q}(T(\boldsymbol{x})|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}))}{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}))}\tag{3.20}$$

eq:emalgo-8a

に注意すれば (eq:emalgo-8 3.19) の右辺は

$$\begin{aligned}
&\int_{T^{-1}(C)}\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}\,d\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\\
&\quad=\int_{T^{-1}(C)}\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}))\,d\mu(\boldsymbol{x})\\
&\quad=\int_{T^{-1}(C)}\frac{\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))}{\mathsf{q}(T(\boldsymbol{x})|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))}\mathsf{q}(T(\boldsymbol{x})|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}))\,d\mu(\boldsymbol{x})\qquad(\because\ (\text{eq:emalgo-8a } 3.20))\\
&\quad=\int_{T^{-1}(C)}\frac{\mathsf{q}(T(\boldsymbol{x})|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}))}{\mathsf{q}(T(\boldsymbol{x})|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))}\,d\mathsf{P}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{x})\\
&\quad=\int_C\frac{\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}(\boldsymbol{y}))}{\mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m)}(\boldsymbol{y}))}\,d\mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{y})\qquad(\because\ \text{条件付き期待値の定義})\\
&\quad=\int_C 1\cdot\,d\mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{y})
\end{aligned}$$

となる．上式と (eq:emalgo-8 3.19) から，任意の $C \in \mathcal{C}$ に対して

$$\int_C g(\boldsymbol{y})\, d\mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{y}) = 1$$

とので

$$g(\boldsymbol{y}) = 1 \qquad (\mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\text{-a.e.})$$

がわかる．よって，(eq:emalgo-8b 3.18) から

$$\mathsf{g}(\boldsymbol{y}) = \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\frac{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}{\mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})}\middle| T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] = 1, \qquad a.e. \quad \mathsf{Q}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}$$

となる．この式と (eq:emalgo-6a 3.17) から

$$\mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y})\middle|\, T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] - \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}(\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{y}) | T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \le 0 \tag{3.21}$$

eq:emalgo-9

がわかる．よって (eq:emalgo-7 3.16) と (eq:emalgo-9 3.21) から

$$\begin{aligned}
\log \mathsf{q}\big(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m)}\big) &= \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{p}\big(\boldsymbol{X}|\,\widehat{\theta}^{(m)}\big)\,|\, T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \\
&\quad - \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m)}}\big(\boldsymbol{X}\big|\,\boldsymbol{y}\big)\big| T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \\
&\ge \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{p}\big(\boldsymbol{X}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}\big)\,|\, T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \\
&\quad - \mathsf{E}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\left[\log \mathsf{k}_{\widehat{\theta}^{(m-1)}}\big(\boldsymbol{X}\big|\,\boldsymbol{y}\big)\big| T(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{y}\right] \\
&= \log \mathsf{q}\big(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m-1)}\big)
\end{aligned}$$

となるので (eq:emalgo-5 3.14) は示せた．

re:emalog-4

注意 3.5. $\{\log \mathsf{q}(\boldsymbol{y}|\,\widehat{\theta}^{(m)})\}_{m=1}^{\infty}$ は非減少である．よって，この列が有界のとき，大域的に収束することがわかる．このことが EM アルゴリズムの安定性を保証することになる．(Wu, 黒田) [13, 17] を参照のこと．

黒田の 2 章の内容をきちんと書きたい．2023/09/11 記．

第4章　線型回帰モデル

4.1　線型単回帰モデルと最小 2 乗推定量

線型単回帰モデル (simple linear regression model) を考える．$n \in \mathbb{N}$ とし, n 個の観測の組を

$$(x_1,\, y_1),\, (x_2,\, y_2),\, \dots,\, (x_n,\, y_n)$$

とする．各 $y_j\,(j = 1,\, 2, \dots,\, n)$ は

$$y_j = \alpha^* + \beta^* x_j + \epsilon_j \qquad (j = 1,\, 2, \dots,\, n)$$

なる線型構造を持って分布しているとする．ここで $\alpha^* \in \mathbb{R}$ を y 切片項, $\beta^* \in \mathbb{R}$ を回帰係数と呼ぶ．これらは未知の母数 (パラメータ) と仮定する． y_j を**従属変数 (応答変数)**, x_j を**独立変数 (説明変数)** と呼ぶ. $\epsilon_1,\, \epsilon_2,\, \dots,\, \epsilon_n$ は独立同一分布に従う確率変数列で誤差項である.

この節において単回帰モデルの誤差項に以下の仮定 (1) $\sim$ (4) をおくことにする.

(1) 説明変数 $x_1,\, x_2,\, \dots,\, x_n$ は確率変数ではなく与えられた定数.
(2) $\mathsf{E}[\epsilon_j] = 0\,(j = 1,\, 2,\, \dots,\, n)$.
(3) $\mathsf{E}[\epsilon_j \epsilon_\ell] = 0\,(j \neq \ell)$.
(4) $\mathsf{Var}[\epsilon_j] = \sigma^2$. ただし分散 $\sigma^2\,(\sigma > 0)$ は未知とする.

未知の母数 $\alpha^*,\, \beta^*$ を推定するために最小 2 乗法を用いる．推定量導出のために

$$h(\alpha,\, \beta) := \sum_{j=1}^{n} \{y_j - (\alpha + \beta x_j)\}^2$$

を考える．$\alpha,\, \beta$ に関して h の最小化問題を考える．最小化問題の解 (存在すれば) を**最小 2 乗推定量**ということにする.

簡単のために,

$$\begin{aligned}
\overline{y} &= \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_j; \quad \overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j; \\
Q_{xy} &= \sum_{j=1}^{n} (x_j - \overline{x})(y_j - \overline{y}); \\
Q_{xx} &= \sum_{j=1}^{n} (x_j - \overline{x})^2; \quad Q_{yy} = \sum_{j=1}^{n} (y_j - \overline{y})^2
\end{aligned}$$

なる記号を導入する．以下では $Q_{xx} \neq 0$ と仮定する．

関数 h を変形すれば

$$h(\alpha, \beta) = Q_{xx}\left\{\beta - \frac{Q_{xy}}{Q_{xx}}\right\}^2 + n\{\overline{y} - \alpha - \beta\overline{x}\}^2 + \frac{Q_{xx}Q_{yy} - Q_{xy}^2}{Q_{xx}} \tag{4.1}$$

eq:2-1

と書ける．ここで

$$\widehat{\alpha} := \overline{y} - \widehat{\beta}\overline{x}; \qquad \widehat{\beta} := \frac{Q_{xy}}{Q_{xx}}$$

とおく．上の式より $h(\alpha, \beta)$ は $\alpha = \widehat{\alpha}$, $\beta = \widehat{\beta}$ のときに最小値を取る．

最小 2 乗推定量 (値) を用いて，回帰直線 $y = \widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x$ を引くことができる．回帰直線上の点 $(x_j, \widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_j)$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$ と観測 (x_j, y_j) との差

$$e_j := y_j - (\widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_j) \qquad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{4.2}$$

eq:2-1a

を**残差**といい

$$\mathsf{RSS} := \sum_{j=1}^n e_j^2 = \sum_{j=1}^n \{y_j - (\widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_j)\}^2$$

を**残差平方和**という．$n \geq 3$ のとき未知の分散 σ^2 を

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-2}\mathsf{RSS}$$

で推定することができる．

pro:2-1

命題 4.1. (1) $\mathsf{E}[\widehat{\beta}] = \beta^*$; $\mathsf{Var}[\widehat{\beta}] = \dfrac{\sigma^2}{Q_{xx}}$.

(2) $\mathsf{E}[\widehat{\alpha}] = \alpha^*$; $\mathsf{Var}[\widehat{\alpha}] = \sigma^2\left\{\dfrac{1}{n} + \dfrac{\overline{x}^2}{Q_{xx}}\right\}$.

(3) $\mathsf{Cov}[\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}] = -\dfrac{\overline{x}\sigma^2}{Q_{xx}}$.

(4) $\mathsf{E}[e_j] = 0$; $\sum_{j=1}^n \mathsf{Var}[e_j] = (n-2)\sigma^2$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$.

Proof. (1) の証明: 誤差項 ϵ_j $(j = 1, 2, \ldots, n)$ に対して

$$\overline{\epsilon} := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n \epsilon_j$$

とおく．すると

$$\begin{aligned}\epsilon_j - \overline{\epsilon} &= y_j + \alpha^* + \beta^* x_j - \left\{\overline{y} + \alpha^* + \beta^*\overline{x}\right\} \\ &= y_j - \overline{y} - \beta^*(x_j - \overline{x}),\end{aligned} \tag{4.3}$$

eq:2-1b

$$\sum_{j=1}^n (x_j - \overline{x})\overline{\epsilon} = 0 \tag{4.4}$$

eq:2-1c

となる．eq:2-1b (4.3) の両辺に $x_j - \overline{x}$ をかけて j について和を取ると

$$\sum_{j=1}^{n}(x_j-\overline{x})(\epsilon_j-\overline{\epsilon}) = \sum_{j=1}^{n}(x_j-\overline{x})(y_j-\overline{y}) - \beta^*\sum_{j=1}^{n}(x_j-\overline{x})^2 = Q_{xy}-\beta^*Q_{xx}$$
$$= Q_{xx}\{\widehat{\beta}-\beta^*\}$$

を得る．この式の右辺に eq:2-1c (4.4) を代入すると

$$\widehat{\beta}-\beta^* = \frac{\sum_{j=1}^{n}(x_j-\overline{x})\epsilon_j}{Q_{xx}} \tag{4.5}$$ eq:2-2

と得る． eq:2-2 (4.5) と $\mathsf{E}[\epsilon_j]=0$ に注意すると

$$\mathsf{E}[\widehat{\beta}-\beta^*]=0 \tag{4.6}$$ eq:2-2a

を得る．さらに, $\{\epsilon\}_{j=1}^{n}$ は互いに独立で $\mathsf{Var}[\epsilon_j]=\sigma^2\,(j=1,\,2,\,\ldots,\,n)$ に注意すると

$$\mathsf{Var}[\widehat{\beta}] = \mathsf{E}[(\widehat{\beta}-\beta^*)^2] = \frac{\sum_{j=1}^{n}(x_j-\overline{x})^2\mathsf{E}[\epsilon_j^2]}{Q_{xx}^2} = \frac{\sigma^2}{Q_{xx}} \tag{4.7}$$ eq:2-3

がわかる．

(2) の証明: また, $\widehat{\alpha}=\overline{y}-\widehat{\beta}\overline{x}$ と eq:2-2 (4.5) から

$$\widehat{\alpha}-\alpha^* = \overline{y}-\widehat{\beta}\overline{x}-\alpha^*-\widehat{\beta}\overline{x}-\alpha^* = \alpha^*+\beta^*\overline{x}+\overline{\epsilon}$$
$$= \overline{\epsilon}-\overline{x}(\widehat{\beta}-\beta^*) = \sum_{j=1}^{n}\left\{\frac{1}{n}-\frac{(x_j-\overline{x})\overline{x}}{Q_{xx}}\right\}\epsilon_j \tag{4.8}$$ eq:2-2b

がわかる．再度 $\mathsf{E}[\epsilon_j]=0\,(j=1,\,2,\,\ldots,\,n)$ と eq:2-2b (4.8) から

$$\mathsf{E}[\widehat{\alpha}-\alpha^*]=0$$

を得る．さらに, $\{\epsilon_j\}_{j=1}^{n}$ は互いに独立で $\mathsf{Var}[\epsilon_j]=\sigma^2\,(j=1,\,2,\,\ldots,\,n)$ から

$$\mathsf{Var}[\widehat{\alpha}] = \mathsf{E}[(\widehat{\alpha}-\alpha^*)^2] = \sum_{j=1}^{n}\left\{\frac{1}{n}-\frac{(x_j-\overline{x})\overline{x}}{Q_{xx}}\right\}^2\mathsf{E}[\epsilon_j^2]$$
$$= \sigma^2\left\{\frac{1}{n}+\frac{\overline{x}^2}{Q_{xx}}\right\} \tag{4.9}$$ eq:2-2c

がわかる．

(3) の証明: 同様に, eq:2-2 (4.5) と eq:2-2b (4.8) から

$$\begin{aligned}\mathsf{Cov}[\widehat{\alpha},\,\widehat{\beta}] &= \mathsf{E}[(\widehat{\alpha}-\alpha^*)(\widehat{\beta}-\beta^*)]\\ &= \frac{1}{Q_{xx}}\sum_{j=1}^{n}(x_j-\overline{x})\left\{\frac{1}{n}-\frac{(x_j-\overline{x})\overline{x}}{Q_{xx}}\right\}\mathsf{E}[\epsilon_j^2] = -\frac{\overline{x}\sigma^2}{Q_{xx}}\end{aligned}$$

がわかる.

(4) の証明: (4.2) から

$$
\begin{aligned}
e_j &= y_i - \left\{\widehat{\alpha} + \widehat{\beta}x_j\right\} = y_j - \left\{\overline{y} - \widehat{\beta}\overline{x} + \widehat{\beta}x_j\right\} \\
&= y_j - \overline{y} - \widehat{\beta}(x_j - \overline{x}) = (\epsilon_j - \overline{\epsilon}) - (x_j - \overline{x})(\widehat{\beta} - \beta^*) \qquad (4.10) \quad \boxed{\texttt{eq:2-2d}}
\end{aligned}
$$

と表さる. よって, $\mathsf{E}[\epsilon_j] = 0\,(j = 1, 2, \ldots, n$, $\mathsf{E}[\overline{\epsilon}] = 0$ と (4.7) から

$$\mathsf{E}[e_j] = 0$$

がわかる. つぎに, (4.10) の最右辺を展開して, j について和と期待値を取ると

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n} \mathsf{E}[e_j^2] &= \sum_{j=1}^{n} \mathsf{E}[(\epsilon_j - \overline{\epsilon})^2] - 2\sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})\mathsf{E}[(\epsilon_j - \overline{\epsilon})(\widehat{\beta} - \beta^*)] \\
&\quad + \sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})^2\mathsf{E}[(\widehat{\beta} - \beta^*)^2] \qquad (4.11) \quad \boxed{\texttt{eq:2-4}}
\end{aligned}
$$

と書ける. (4.5) から

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n} \mathsf{E}[(\epsilon_j - \overline{\epsilon})^2] &= \sum_{j=1}^{n} \epsilon_j^2 - n\mathsf{E}[\overline{\epsilon}^2] = (n-1)\sigma^2, \\
\sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})\mathsf{E}[(\epsilon_j - \overline{\epsilon})(\widehat{\beta} - \beta^*)] &= \sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})\mathsf{E}\left[\epsilon_j\left(\widehat{\beta} - \beta^*\right)\right] \\
&\quad - \underbrace{\sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})}_{=0}\,\mathsf{E}\left[\overline{\epsilon}\left(\widehat{\beta} - \beta^*\right)\right] \\
&= \sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})\mathsf{E}[\epsilon_j(\widehat{\beta} - \beta^*)] \\
&= \sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})\mathsf{E}\left[\frac{\epsilon_j \sum_{\ell=1}^{n}(x_\ell - \overline{x})\epsilon_\ell}{Q_{xx}}\right] \\
&= \sigma^2
\end{aligned}
$$

となる. これらの 2 つの式と (4.7) を (4.11) に代入すれば

$$\sum_{j=1}^{n} \mathsf{E}[e_j^2] = (n-2)\sigma^2$$

を得る. □

pro:2-2 **命題 4.2.** 正規性を仮定する. $n \geq 3$ のとき

$$
\begin{aligned}
&(1) \quad \begin{pmatrix} \widehat{\alpha} \\ \widehat{\beta} \end{pmatrix} \sim N_2\left(\begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix}, \frac{\sigma^2}{Q_{xx}}\begin{pmatrix} \frac{Q_{xx}}{n} + \overline{x}^2 & -\overline{x} \\ -\overline{x} & 1 \end{pmatrix}\right), \\
&(2) \quad \frac{(n-2)\widehat{\sigma}^2}{\sigma^2} = \frac{\mathsf{RSS}}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-2}, \\
&(3) \quad \widehat{\sigma}^2 \text{ と } (\widehat{\alpha}, \widehat{\beta}) \text{ は独立.}
\end{aligned}
$$

Proof. (1), (2) は命題 4.1 と正規性の仮定より直ちにわかる. $\mathsf{Cov}[e_j, \widehat{\alpha}] = \mathsf{Cov}[e_j, \widehat{\beta}] = 0$ より $\widehat{\sigma}^2$ と $(\widehat{\alpha}, \widehat{\beta})$ は独立 □

4.2 線型重回帰モデル

$d, n \in \mathbb{N}$ とし, n 個の観測の組を

$$(y_j, x_{j1}, x_{j2}, \ldots, x_{jd}) \qquad (j = 1, 2, \ldots, n)$$

とする. ただし $x_{j\ell}\,(j = 1, 2, \ldots, n;\ \ell = 1, 2, \ldots, d)$ 変量は定数とする. さらに変数間には

$$y_j = \beta_0^* + \beta_1^* x_{j1} + \beta_2^* x_{j2} + \cdots + \beta_d^* x_{jd} + \epsilon_j \qquad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{4.12}$$ eq:2-5

なるモデルを仮定する. ただし β_0^* は y 切片項, $\beta_1^*, \beta_2^*, \ldots, \beta_d^*$ は**重回帰係数**という. これらは未知とする. また $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots, \epsilon_n$ は独立同一分布に従う確率変数列 (誤差項) であり. $\mathsf{Var}[\epsilon_j] = \sigma^2\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ とする. ただし $\sigma^2\,(\sigma > 0)$ は未知とする. (4.12) を重回帰モデルという.

重回帰モデル (4.12) は

$$
\underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}}_{=\boldsymbol{y}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1d} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nd} \end{pmatrix}}_{=\mathbf{X}} \underbrace{\begin{pmatrix} \beta_0^* \\ \beta_1^* \\ \vdots \\ \beta_d^* \end{pmatrix}}_{=\boldsymbol{\beta}^*} + \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}}_{=\boldsymbol{\epsilon}}
$$

と表される. これは

$$\boldsymbol{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^* + \boldsymbol{\epsilon} \tag{4.13}$$ eq:2-6

と書ける.

回帰係数ベクトル $\boldsymbol{\beta}^*$ の最小 2 乗推定量は

$$h(\boldsymbol{\beta}) = h(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_d) = \sum_{j=1}^{n} \{y_j - (\beta_0 + \beta_1 x_{j1} + \beta_2 x_{j2} + \cdots + \beta_d x_{jd})\}^2$$

を最小化することにより得られる. 関数 h は

$$h(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

と書ける. ただし行列 A に対して $A^\top$ はその転置である.

以後, $\mathbf{X}^\top\mathbf{X}$ は正則と仮定する. ここで

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\boldsymbol{y}$$

とおくと

$$h(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}})^\top(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}) + (\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})^\top\mathbf{X}^\top\mathbf{X}(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}) \quad (4.14)$$ eq:2-7

と書ける. このことより $h(\boldsymbol{\beta})$ は $\boldsymbol{\beta} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}$ で最小となる. よって $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ は $\boldsymbol{\beta}^*$ の最小 2 乗推定量である.

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^* = (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\boldsymbol{\epsilon}$$

と書けるので

$$\begin{aligned} \mathsf{E}[\widehat{\boldsymbol{\beta}}] &= \boldsymbol{\beta}^*, \\ \mathsf{Var}[\widehat{\boldsymbol{\beta}}] &= \sigma^2(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}. \end{aligned}$$

さらに

$$\mathsf{RSS} := (\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}})^\top(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{y}^\top\left\{\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\right\}\boldsymbol{y}$$

とする. トレース, 期待値およびベキ等行列の性質より

$$\begin{aligned} \mathsf{E}[\mathsf{RSS}] &= \mathrm{Tr}\left[\left\{\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\right\}\mathsf{E}[\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^\top]\right] && (4.15) \\ &= \sigma^2\mathrm{Tr}\left[\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\right] && (4.16) \\ &= (n-d-1)\sigma^2. && (4.17) \end{aligned}$$ eq:2-7

よって $n \geq d+2$ のとき σ^2 の不偏推定量は

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-d-1}\mathsf{RSS}.$$

thm:2-1 **定理 4.3.** (Gauss-Markov の定理) 最小 2 乗推定量 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ は最良線型不偏推定量 (best linear unbiaed estimator, BLUE) である.

Proof. 任意の線型推定量は $(d+1) \times n$ 行列 $\mathbf{C}$ を用いて $\mathbf{C}\boldsymbol{y}$ と表される. これが不偏推定量となるためには

$$\mathsf{E}[\mathbf{C}\boldsymbol{y}] = \boldsymbol{\beta}^* \iff \mathbf{C}\mathbf{X} = \mathbf{I}_{d+1}$$

をみたさなければならない．さらに

$$\mathsf{Var}[\mathbf{C}\boldsymbol{y}] = \mathsf{E}[(\mathbf{C}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\beta}^*)(\mathbf{C}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\beta}^*)^\top] = \mathbf{C}\mathsf{E}[\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^\top]\mathbf{C}^\top = \sigma^2\mathbf{C}\mathbf{C}^\top.$$

最小 2 乗推定量は $\mathbf{C}^* := (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top$ に対応しており，

$$\begin{aligned}\mathbf{C}\mathbf{C}^\top &= (\mathbf{C} - \mathbf{C}^* + \mathbf{C}^*)(\mathbf{C} - \mathbf{C}^* + \mathbf{C}^*)^\top \\ &= (\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)(\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)^\top + \mathbf{C}^*(\mathbf{C}^*)^\top \\ &\quad +(\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)(\mathbf{C}^*)^\top + \mathbf{C}^*(\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)^\top.\end{aligned}$$

しかし

$$(\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)(\mathbf{C}^*)^\top = \{\mathbf{C} - (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\}\mathbf{X} = \mathbf{C}\mathbf{X} - \mathbf{I}_{d+1} = \mathbf{0}.$$

よって

$$\begin{aligned}\mathsf{Var}[\mathbf{C}\boldsymbol{y}] &= \sigma^2\mathbf{C}\mathbf{C}^\top = \sigma^2\mathbf{C}^*(\mathbf{C}^*)^\top + \sigma^2(\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)(\mathbf{C} - \mathbf{C}^*)^\top \\ &\succsim \sigma^2\mathbf{C}^*(\mathbf{C}^*)^\top = \mathsf{Var}[\widehat{\boldsymbol{\beta}}]\end{aligned}$$

を得る． ただし正方行列 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ に対して

$$\mathbf{A} \succsim \mathbf{B} \iff \mathbf{A} - \mathbf{B} \succsim \mathbf{0} \iff \mathbf{A} - \mathbf{B} \text{ は非負定値}$$

とした．したがって最小 2 乗推定量は共分散行列を最小 (上の $\succsim$ の意味で最小) となるので線型不偏推定量の族の中で最良である． □

pro:2-3 **命題 4.4.** $n \geq d + 2$ とする．$\boldsymbol{\epsilon} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}_n)$ を仮定する．このとき以下のことが成り立つ．
(1) $\widehat{\boldsymbol{\beta}} \sim \mathsf{N}_{d+1}(\boldsymbol{\beta}^*, \sigma^2(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1})$.
(2) $\dfrac{(n-d-1)\widehat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-d-1}$.
(3) $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ と $\widehat{\sigma}^2$ は独立.

Proof. $\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*)/\sigma$ とし

$$U = (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1/2}\mathbf{X}^\top\boldsymbol{z}; \qquad V = \boldsymbol{z}^\top\{\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\}\boldsymbol{z}$$

とおく．ただし正則な行列 $\mathbf{A}$ に対して $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{B}\mathbf{B}^\top$ をみたす行列 $\mathbf{B}$ を $\mathbf{A}^{-1/2}$ [1]と記した．すると命題の主張は
(1a) $U \sim \mathsf{N}_{d+1}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{d+1})$,
(2a) $V \sim \chi^2_{n-d-1}$,
(3a) U と V は独立,

[1]これは一意ではないことに注意せよ．

という形に簡略化される．$\mathbf{X}$ は $n \times (d+1)$ 行列でランクが $d+1$(フルランク) だから

$$\mathbf{X} = \mathbf{P\Lambda O}^\top$$

と分解できる．ただし $\mathbf{P}$ は $n \times (d+1)$ 行列で $\mathbf{P}^\top\mathbf{P} = \mathbf{I}_{d+1}$, $\mathbf{\Lambda}$ は正の成分をもつ $d+1$ 次の対角行列で $\mathbf{O}$ は $d+1$ 次の直交行列である．このとき

$$(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1} = \{\mathbf{O\Lambda P}^\top\mathbf{P\Lambda O}^\top\}^{-1} = \{\mathbf{O\Lambda}^2\mathbf{O}^\top\}^{-1} = \mathbf{O\Lambda}^{-2}\mathbf{O}^\top$$

より

$$(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1/2} = \mathbf{O\Lambda}^{-1}\mathbf{O}^\top.$$

これらより

$$\boldsymbol{U} = \mathbf{OP}^\top\boldsymbol{z}; \qquad V = \boldsymbol{z}^\top(\boldsymbol{I}_n - \mathbf{PP}^\top)\boldsymbol{z}$$

と書けることがわかる．ここで適当な $n \times (n-d-1)$ 行列 $\mathbf{Q}$ をうまくとり $n \times n$ 行列 $\mathbf{H} := (\mathbf{P} : \mathbf{Q})$ が n 次直交行列になるようにする．すると $\mathbf{I}_n = \mathbf{HH}^\top = \mathbf{PP}^\top + \mathbf{QQ}^\top$ であることから $\mathbf{I}_n - \mathbf{PP}^\top = \mathbf{QQ}^\top$．よって

$$V = \boldsymbol{z}^\top\mathbf{QQ}^\top\boldsymbol{z} = (\mathbf{Q}^\top\boldsymbol{z})^\top(\mathbf{Q}^\top\boldsymbol{z})$$

と表される．

$$\mathbf{H}^\top\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}^\top\boldsymbol{z} \\ \mathbf{Q}^\top\boldsymbol{z} \end{pmatrix} \sim N_n(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n)$$

であるから $\boldsymbol{U} = \mathbf{P}^\top\boldsymbol{z}$ と $V = \boldsymbol{z}^\top\mathbf{QQ}^\top\boldsymbol{z}$ は独立で $\boldsymbol{U} \sim N_{d+1}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{d+1})$, $V \sim \chi^2_{n-d-1}$ となる． □

4.3 変数選択の規準

説明変数 $x_{1j}, x_{2j}, \ldots, x_{dj}$ の個数 d を増やすにつれて, 線型モデル

$$y_j = \beta_0^* + \beta_1^* x_{1j} + \beta_2^* x_{2j} + \cdots + \beta_d^* x_{dj} + \epsilon_j \qquad (j = 1, 2, \ldots, n)$$

によるデータに対する説明力は増していき, 観測値に対するモデルの適合度は高くなる．しかし d を増やしていくにつれて未知母数である回帰係数の推定量の推定誤差は増していく．あとの章でわかるように

$$\mathsf{E}[\mathrm{Tr}\,\{(\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*)^\top(\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*)\}] \le \mathbf{C}\frac{\sigma^2 d}{n}$$

と評価できる．ただし $\mathbf{C}$ は n, d に依らない定数である．

以下では $n \ge d+1$ とし, $\mathbf{X}$ はフルランクとする．

4.3.1 自由度調整済み決定係数

決定係数

$$\mathsf{R}_d^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \widehat{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^n (y_j - \overline{y})^2}; \qquad \widehat{y}_j = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_{1j} + \widehat{\beta}_2 x_{2j} + \cdots + \widehat{\beta}_d x_{dj}$$

の値は説明変数の個数 d を増やせば 1 に近づいていく．そこで $\sum_{j=1}^n (y_j - \widehat{y}_j)^2$ と $\sum_{j=1}^n (y_j - \overline{y})^2$ をそれらの自由度 $n-d-1$, $n-1$ で割ったもので置き換えたもの

$$\mathsf{R}_d^{*2} = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \widehat{y}_j)^2/(n-d-1)}{\sum_{j=1}^n (y_j - \overline{y})^2/(n-1)}$$

を自由度調整済み決定係数という．これを書き直せば

$$\mathsf{R}_d^{2*} = 1 - \frac{n-1}{n-d-1}(1 - \mathsf{R}_d^2)$$

となる．この形からわかるように d が大きくなると $1 - \mathsf{R}_d^2$ は小さくなるものの分母の $n-d-1$ が小さくなるので R_d^{2*} は必ずしも 1 には近づかない．R_d^{2*} を最大にする説明変数の組 (d の選択) を選択すればよい．

4.3.2 Mallows C_p

モデルの誤差項 $\boldsymbol{\epsilon}$ とは独立な確率ベクトル $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \sim \mathsf{N}_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ に基づく将来の観測を

$$\tilde{\boldsymbol{y}} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^* + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$$

とする．未来の観測 $\tilde{\boldsymbol{y}}$ を $\widehat{\boldsymbol{y}} = \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\boldsymbol{y}$ で予測するとき，その平均 2 乗誤差は

$$\begin{aligned}
\mathsf{MSE}(\widehat{\boldsymbol{y}}) &= \mathsf{E}\big[(\tilde{\boldsymbol{y}} - \widehat{\boldsymbol{y}})^\top(\tilde{\boldsymbol{y}} - \widehat{\boldsymbol{y}}\big] \\
&= \mathsf{E}\big[\{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}} - \mathbf{X}(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^*)\}^\top\{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}} - \mathbf{X}(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^*)\}\big] \\
&= n\sigma^2 + \mathsf{E}\big[(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^*)^\top\mathbf{X}^\top\mathbf{X}(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^*)\big] \\
&= n\sigma^2 + \mathrm{Tr}\left\{\mathbf{X}^\top\mathbf{X}\mathsf{E}[(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^*)(\widehat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta}^*)^\top]\right\} \\
&= n\sigma^2 + (d+1)\sigma^2 = (n+d+1)\sigma^2
\end{aligned}$$

となる．一方，残差平方和 $\mathsf{RSS}_d = (\boldsymbol{y} - \widehat{\boldsymbol{y}})^\top(\boldsymbol{y} - \widehat{\boldsymbol{y}})$ の期待値は

$$\mathsf{E}[\mathsf{RSS}_d] = \mathsf{E}\big[\boldsymbol{y}^\top\{\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\}\boldsymbol{y}\big] = (n-d-1)\sigma^2 \qquad (4.18)$$ eq:2-7a

となるので，予測誤差は

$$\mathsf{MSE}(\widehat{\boldsymbol{y}}) = \mathsf{E}\big[\mathsf{RSS}_d + 2(d+1)\sigma^2\big]$$

となる．よって σ^2 が既知の場合, $\mathsf{RSS}_d + 2(d+1)\sigma^2$ が予測誤差の不偏推定量になっていることが分かる．

候補となる最大のモデルの説明変数の組を

$$(x_{j1}, x_{j2}, \ldots, x_{jd}, \ldots, x_{jK}) \qquad (1 \leq d \leq K)$$

とする．

$$\mathbf{X}_F = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \ldots & x_{1d} & \ldots & x_{1K} \\ x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2d} & \ldots & x_{2K} \\ \vdots & & \vdots & & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \ldots & x_{nd} & \ldots & x_{nK} \end{pmatrix}$$

としたとき分散 σ^2 の推定量を

$$\widehat{\sigma}_F^2 = \boldsymbol{y}^\top \{\mathbf{I}_n - \mathbf{X}_F(\mathbf{X}_F^\top \mathbf{X}_F)^{-1}\mathbf{X}_F^\top\}\boldsymbol{y}$$

とする．σ^2 の推定量 $\widehat{\sigma}_F^2$ で割ったもの

$$\mathsf{C}_p := \frac{\mathsf{RSS}_d}{\widehat{\sigma}_F^2} + 2(d+1)$$

を Mallows の C_p 規準といい, これを最小にする変数の組を選べばよい．これは

$$(\text{モデルの適合度}) + 2 \times (\text{モデルの母数の個数})$$

という形をしており, 第 2 項はモデルの複雑さに対する罰則項として機能する．

問 4.1. $\boldsymbol{y} \sim \mathsf{N}_n(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}_n)$ とする． $\mathbf{X}^\top\mathbf{X}$ は正則とし, $\mathbf{Q} := \mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top$ とおく．このとき, 以下の問いに答えよ．

(1) $\mathbf{Q}^\top = \mathbf{Q}$ と $\mathbf{Q}^2 = \mathbf{Q}$ を確認せよ．

(2) $\mathsf{E}[\mathbf{Q}\boldsymbol{y}]$ を求めよ．

(3) 式 (4.18) を証明せよ．

eq:2-7a

$\boldsymbol{y}$ の分布の仮定より $\mathsf{E}[\boldsymbol{y}] = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ と $\mathsf{Var}[\boldsymbol{y}] = \sigma^2\mathbf{I}_n$ となることと注意 A.41(2) を使うとよい．

re:0-2-19

4.3.3 AIC

df:2-1

定義 4.5. (Kullback-Leibler 情報量) p, q を Lebesgue 測度 m に関する確率密度関数とする．Kullback-Leibler 情報量を

$$\mathsf{KL}(\mathsf{p}, \mathsf{q}) = \int \log\left(\frac{\mathsf{p}}{\mathsf{q}}\right) \mathsf{p}\, d\mathsf{m}$$

で定義する．

re:2-1 **注意 4.6.** $x\log x \geq x-1\,(x>0)$ に注意して

$$\begin{aligned}\mathsf{KL}(\mathsf{p},\,\mathsf{q}) &= \int \log\left(\frac{\mathsf{p}}{\mathsf{q}}\right)\mathsf{p}\,d\mathsf{m} = \int \frac{\mathsf{p}}{\mathsf{q}}\log\left(\frac{\mathsf{p}}{\mathsf{q}}\right) g\,d\mathsf{m}\\ &\geq \int\left(\frac{\mathsf{p}}{\mathsf{q}}-1\right)\mathsf{q}\,d\mathsf{m} = 0.\end{aligned}$$

□

以下では $n \geq d+4$ とする. $\boldsymbol{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^* + \boldsymbol{\epsilon}$ の $\mathbb{R}^n$ 上の Lebeague 測度 m_n に関数る p.d.f. を $\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)$ とし, 将来の変数 $\tilde{\boldsymbol{y}} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^* + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ の確率密度関数を $\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)$ と書くことにする. $\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2$ の推定量 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})$ を $\mathsf{p}(\tilde{\boldsymbol{y}}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)$ に代入したもの

$$\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))$$

を推定されたモデルの分布とし, これで将来の分布 $\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)$ を予測するとき, それらの分布間の Kullback-Leibler 情報量

$$\begin{aligned}&\mathsf{KL}(\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2),\,\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})))\\ &= \int\cdots\int \log\left\{\frac{\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)}{\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))}\right\}\cdot \mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)d\mathsf{m}_n(\boldsymbol{t})\end{aligned}$$

で測る. これは $\boldsymbol{y}$ に依存するランダムな量なので, $\boldsymbol{y}$ に関して期待値を取ったもの

$$\mathsf{E}\left[\mathsf{KL}(\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2),\,\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})))\right]$$

を考える. するとこの関数が Mallows の C_p 規準で考えたところの平均 2 乗予測誤差に対応している.

$$\begin{aligned}&\mathsf{E}\left[\mathsf{KL}(\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2),\,\mathsf{p}(\,\cdot\,|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})))\right]\\ &= \mathsf{E}\left[\int\cdots\int \log\{\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)\}\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)d\mathsf{m}_n(\boldsymbol{t})\right]\\ &\quad -\mathsf{E}\left[\int\cdots\int \log\{\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\sigma^2(\boldsymbol{y}))\}\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)d\mathsf{m}_n(\boldsymbol{t})\right]\end{aligned}$$

と書き直せる. 右辺の第 1 項目は推定されたモデルの分布に無関係なので, 後者を 2 倍したものを

$$\mathsf{AI}(\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2) := -2\mathsf{E}\left[\int\cdots\int \log\{\mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\sigma^2(\boldsymbol{y}))\}\mathsf{p}(\tilde{\boldsymbol{y}}|\,\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\,\sigma^2)d\mathsf{m}_n(\boldsymbol{t})\right]$$

とおく. これを赤池情報量と呼ぶ. これの (漸近) 不偏推定量が AIC 規準となる.

具体的に $\mathsf{AI}(\boldsymbol{\beta}^*,\, \sigma^2)$ を計算してみると

$$-2\log \mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\, \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\, \widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})) = n\log(2\pi\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})) + \frac{(\boldsymbol{t}-\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}))^\top(\boldsymbol{t}-\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}))}{\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})}$$

であることと命題 pro:2-3 4.4 に注意し $\boldsymbol{t}$ に関して積分[2]する.

$$\begin{aligned}
&\int\cdots\int \left\{-2\log p(\boldsymbol{t}|\, \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\, \widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))\right\} \mathsf{p}(\boldsymbol{t}|\, \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*,\, \sigma^2)\, d\mathsf{m}_n(\boldsymbol{t}) \\
&\quad = \int\cdots\int \left\{ n\log(2\pi\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})) + \frac{\{\boldsymbol{s}+\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}^*-\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}))\}^\top\{\boldsymbol{s}+\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}^*-\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}))\}}{\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})} \right\} \\
&\qquad\qquad \times \mathsf{p}(\boldsymbol{s}|\, \mathbf{0},\, \sigma^2)\, d\mathsf{m}_n(\boldsymbol{s}) \qquad \left(\boldsymbol{t} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^* + \boldsymbol{s} \text{ と変換}\right) \\
&\quad = n\log(2\pi\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})) + \frac{n\sigma^2 + (\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})-\boldsymbol{\beta}^*)^\top\mathbf{X}^\top\mathbf{X}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})-\boldsymbol{\beta}^*)}{\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})}
\end{aligned}$$

と書ける. 命題 pro:2-3 4.4 から

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}[(\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})-\boldsymbol{\beta}^*)^\top\mathbf{X}^\top\mathbf{X}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})-\boldsymbol{\beta}^*)] &= (d+1)\sigma^2, \\
\mathsf{E}\left[\frac{\sigma^2}{\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})}\right] &= (n-d-1)\mathsf{E}\left[\frac{1}{\chi^2_{n-d-1}}\right] = \frac{n-d-1}{n-d-3}
\end{aligned}$$

である. さらに, $\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})$ と $\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})$ の独立性であることに注意すれば,

$$\mathsf{AI}(\boldsymbol{\beta}^*,\, \sigma^2) = \mathsf{E}[n\log(2\pi\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))] + \frac{(n+d+1)(n-d-1)}{n-d-3} \tag{4.19}$$

eq:2-11

と書けることがわかる.

次に, 期待最大対数尤度関数 (最大対数尤度の期待値) を計算する.

$$\begin{aligned}
\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}) &= \frac{1}{n-d-1}\boldsymbol{y}^\top\{\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\}\boldsymbol{y} \\
&= \frac{1}{n-d-1}\big(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})\big)^\top\big(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y})\big)
\end{aligned}$$

に注意して, 最大対数尤度の期待値を計算すると

$$\begin{aligned}
&\mathsf{E}\left[-\log \mathsf{p}(\boldsymbol{y}|\, \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\, \widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))\right] \\
&\quad = \mathsf{E}\left[n\log(2\pi\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})) + \frac{(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}))^\top(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}))}{\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})} \right] \\
&\quad = \mathsf{E}\big[n\log(2\pi\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))\big] + (n-d-1)
\end{aligned}$$

となる. これを eq:2-11 (4.19) に代入すれば

$$\mathsf{AI}(\boldsymbol{\beta}^*,\, \sigma^2) = \mathsf{E}\left[-2\log \mathsf{p}(\boldsymbol{y}|\, \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\, \widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y})) + 2(d+2)\frac{n-d-1}{n-d-3}\right]$$

[2]実際には, $\boldsymbol{s} \sim N_n(\mathbf{0},\, \sigma\boldsymbol{I}_n)$ に関して積分していることに注意せよ.

と書けることがわかる．すなわち，上の式の右辺の期待値記号の中身が $\mathsf{AI}(\boldsymbol{\beta}^*, \sigma^2)$ の不偏推定量になる．

$$\lim_{n\to\infty}\frac{n-d-1}{n-d-3}=1$$

なので，近似推定量として，

$$\mathsf{AIC} := -2\log \mathsf{p}(\boldsymbol{y}|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{y}),\,\widehat{\sigma}^2(\boldsymbol{y}))+2(d+2) \tag{4.20}$$ eq:2-12

が得られる．これを AIC 規準という．AIC を最小化する変数の組を選べばよい．Mallows の C_p 規準と同様，(4.20) の第 1 項目はデータの適合度，第 2 項目はモデルの複雑さに対する罰則と解釈できる．

4.3.4 交差検証法

観測 $(\mathbf{X}_1, y_1), \ldots, (\mathbf{X}_2, y_2), \ldots, (\mathbf{X}_n, y_n)$ から j 番目 $(j=1, 2, \ldots, n)$ のデータ $(\mathbf{X}_j, y_j)$ を除いた残りのデータからの $\boldsymbol{\beta}^*$ の推定量を考える．

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(j)} &= \{(\mathbf{X}^{(j)})^\top\mathbf{X}^{(j)}\}^\top(\mathbf{X}^{(j)})^\top\boldsymbol{y}^{(j)},\\ \boldsymbol{y}^{(j)} &= (y_1, \ldots, y_{j-1}, y_{j+1}, \ldots, y_n)^\top,\\ (\mathbf{X}^{(j)})^\top &= (\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_{j-1}, \boldsymbol{x}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{x}_n).\end{aligned}$$

を考える．y_j の予測量 $\widehat{y}_j=\boldsymbol{x}_j^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(j)}$ を構成し，y_j に対する予測誤差

$$\{y_j-\boldsymbol{x}_j^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(j)}\}^2$$

を計算する．この操作を繰り返し，予測誤差

$$\mathsf{CV} := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n\{y_j-\boldsymbol{x}_j^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(j)}\}^2$$

を得る．これを**交差検証法** (**クロス・バリデーション**) といい，CV を最小にする説明変数の組を選ぶ．

pro:2-4 **命題 4.7.** CV は以下のように表現できる．

$$\mathsf{CV}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^n\left\{\frac{y_j-\boldsymbol{x}_j^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}^*}}{1-\boldsymbol{x}_j^\top(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\boldsymbol{x}_j}\right\}^2.$$

Proof. 命題の主張を証明するために

$$\frac{y_1-\boldsymbol{x}_1^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}}{1-\boldsymbol{x}_1^\top(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\boldsymbol{x}_1}=y_1-\boldsymbol{x}_1^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}$$

を示せばよい.

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^\top &= (\boldsymbol{x}_1;\ (\mathbf{X}^{(1)})^\top),\\ \mathbf{X}^\top\mathbf{X} &= \boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top + (\mathbf{X}^{(1)})^\top\mathbf{X}^{(1)} =: \boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top + \mathbf{A}\end{aligned}$$

に注意する. 等式

$$(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1} \tag{4.21}$$

eq:2-13

より

$$\begin{aligned}1-\boldsymbol{x}_1^\top(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\boldsymbol{x}_1 &= 1-\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1 + \frac{\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\\ &= \frac{1-(\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1)^2+(\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1)^2}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\\ &= \frac{1}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1} \qquad (4.22)\end{aligned}$$

eq:2-14

を得る. これらより

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_1^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}} &= \boldsymbol{x}_1^\top(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\boldsymbol{y}\\ &= \boldsymbol{x}_1^\top\left\{\mathbf{A}^{-1}-\frac{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\right\}(\boldsymbol{x}_1;\ (\mathbf{X}^{(1)})^\top)\begin{pmatrix} y_1\\ \boldsymbol{y}^{(1)}\end{pmatrix}\\ &= \boldsymbol{x}_1^\top\left\{\mathbf{A}^{-1}-\frac{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\right\}\left\{\boldsymbol{x}_1y_1+(\mathbf{X}^{(1)})^\top\boldsymbol{y}^{(1)}\right\}\\ &= \boldsymbol{x}_1\left\{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1y_1-\frac{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1y_1}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}+\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(1)})^\top\boldsymbol{y}^{(1)}\right.\\ &\qquad\left.-\frac{\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(1)})^\top\boldsymbol{y}^{(1)}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\right\}\\ &= \boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1y_1-\frac{(\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1)^2y_1}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(1)})^\top\boldsymbol{y}^{(1)}\\ &\qquad-\frac{\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(1)})^\top\boldsymbol{y}^{(1)}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\\ &= \boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1y_1-\frac{(\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1)^2y_1}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}+\boldsymbol{x}_1^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}-\frac{\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1}\\ &= \frac{\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1y_1+\boldsymbol{x}_1^\top\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}}{1+\boldsymbol{x}_1^\top\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}_1} \qquad (4.23)\end{aligned}$$

eq:2-15

を得る. eq:2-14 (4.22) と eq:2-15 (4.23) より

$$
\begin{aligned}
\frac{y_1 - \boldsymbol{x}_1^\top \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}}{1 - \boldsymbol{x}_1^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \boldsymbol{x}_1} &= (1 + \boldsymbol{x}_1^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{x}_1) \left\{ y_1 - \frac{\boldsymbol{x}_1^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{x}_1 y_1 + \boldsymbol{x}_1^\top \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}}{1 + \boldsymbol{x}_1^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{x}_1} \right\} \\
&= (1 + \boldsymbol{x}_1^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{x}_1) \left\{ \frac{y_1 - \boldsymbol{x}_1^\top \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}}{1 + \boldsymbol{x}_1^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{x}_1} \right\} \\
&= y_1 - \boldsymbol{x}_1^\top \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)}
\end{aligned}
$$

を得る. □

4.3.5 BIC

線型回帰モデル

$$
\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^* + \boldsymbol{\epsilon}, \qquad \mathsf{Var}[\boldsymbol{\epsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n
$$

において, $(d+2)$ 個の未知母数 $\boldsymbol{\beta}^*$, σ^2 に正則な事前分布 $\pi_{d+2}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)$ を仮定する. ここで, 「正則」とは

$$
\int \cdots \int \pi_{d+2}(\boldsymbol{\beta}^*, \sigma^2)\, d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{\beta}^*)\, d\mathsf{m}(\sigma^2) = 1
$$

が成立していることである. ただし, m は $\mathbb{R}$ 上の Lebeague 測度である.

すると $\boldsymbol{y}$ の周辺分布

$$
\mathsf{p}_{\pi_{d+2}}(\boldsymbol{y}) = \int \cdots \int \mathsf{p}(\boldsymbol{y} |\, \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \pi_{d+2}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)\, d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{\beta})\, d\mathsf{m}(\sigma^2)
$$

で与えられる. これは σ^2 と $(d+1)$ 個の回帰係数 $\beta_0^*, \beta_1^*, \ldots, \beta_d^*$ に事前分布を想定した Bayes 的周辺尤度である. これを最大にする説明変数の組 (Bayes 的周辺尤度 $-2\log \mathsf{p}_{\pi_{d+2}}(\boldsymbol{y})$ を最小にする説明変数の組) を選択する. 基準となるモデルを定め, 比較するモデルとの周辺尤度の比を Bayes 因子 (Bayes factor) と呼ぶ.

例えば, 最も簡単なモデル

$$
y_j = \beta_0^* + \epsilon_j \qquad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{4.24}
$$

eq:2-16

を考え, 2 個の未知母数 β_0^*, σ^2 に事前分布 $\pi_2(\beta_0^*, \sigma^2)$ を想定した Bayes 的周辺尤度

$$
\mathsf{p}_{\pi_2}(\boldsymbol{y}) = \int\int \mathsf{p}(\boldsymbol{y} |\, \beta_0, \sigma^2) \pi_2(\beta_0, \sigma^2)\, d\mathsf{m}(\beta_0)\, d\mathsf{m}(\sigma^2)
$$

を考える. ただし, $\mathsf{p}(\boldsymbol{y} |\, \beta_0^*, \sigma^2)$ はモデル eq:2-16 (4.24) の確率密度関数である. これらの比

$$
\frac{\mathsf{p}_{\pi_{d+2}}(\boldsymbol{y})}{\mathsf{p}_{\pi_2}(\boldsymbol{y})}
$$

を考える．この値が 1/2 を超えていれば, d 個の説明変数は Bayes 的な意味を持つと解釈できる．これが Bayes 因子であり, この値を最大にする説明変数の組を選択すればよい.

Bayes 的周辺尤度や Bayes 因子の問題点は, これらが事前分布の取り方に依存していることである．ここでは, $n \to \infty$ とすることによりその極限を求める.

そのために Laplace 近似を用いる．以下の議論は数学的な厳密性にかけるものであることに注意せよ．章末の補遺を参照のこと．一般に $\boldsymbol{\theta}$ を k 次元の未知母数とし, $\boldsymbol{X}$ を n 次元確率変数とし, $\boldsymbol{\theta}$ を与えたときの $\boldsymbol{X}$ の条件付き確率密度関数を

$$\boldsymbol{X}|\,\boldsymbol{\theta} \sim \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$$

とし, $\boldsymbol{\theta}$ の事前分布を

$$\boldsymbol{\theta} \;\sim\; \pi(\boldsymbol{\theta})$$

とする．対数尤度

$$\ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) = \log \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})$$

を $\boldsymbol{\theta}$ の最尤推定量[3]$\widehat{\boldsymbol{\theta}}$ のまわりで Taylor 展開する.

$$\begin{aligned}
\ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \;\;\approx\;\; & \ell(\widehat{\boldsymbol{\theta}}|\,\boldsymbol{x}) + \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\widehat{\boldsymbol{\theta}}} \right)^{\top} (\widehat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}) \\
& + \frac{1}{2} (\widehat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^{\top} \left(\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\top}} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\widehat{\boldsymbol{\theta}}} \right) (\widehat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})
\end{aligned}$$

と近似できる．ただし

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \;\;&=\;\; \left(\frac{\partial}{\partial \theta_1} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}),\, \ldots,\, \frac{\partial}{\partial \theta_k} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \right)^{\top} \\
\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\top}} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \;\;&=\;\; \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \right)_{i,\,j=1,\,2,\,\ldots,\,k} \\
\boldsymbol{\theta} \;\;&=\;\; (\theta_1,\, \theta_2,\, \ldots,\, \theta_k)^{\top}
\end{aligned}$$

である．さらに

$$\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{n} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\top}} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\widehat{\boldsymbol{\theta}}}$$

とおいたとき $\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{X})$ はある正定値行列に確率収束すると仮定する．$\widehat{\boldsymbol{\theta}}$ は $\boldsymbol{\theta}$ の最尤推定量だから

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \bigg|_{\boldsymbol{\theta}=\widehat{\boldsymbol{\theta}}} = \mathbf{0}$$

[3]すなわち, 存在すれば,

$$\widehat{\theta} \in \mathrm{argmax}_{\theta \in \Theta} \ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x})$$

で定義する.

である．よって

$$\ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}) \;\approx\; \ell(\widehat{\boldsymbol{\theta}}|\,\boldsymbol{x}) - \frac{n}{2}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})^\top \widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})(\widehat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})$$

と近似できる．$\pi(\boldsymbol{\theta})$ は $\boldsymbol{\theta}$ に関して滑らかな関数で

$$\pi(\boldsymbol{\theta}) \approx \pi(\widehat{\boldsymbol{\theta}})$$

と近似できると仮定すると Bayes 的周辺分布は

$$\begin{aligned}
\mathsf{p}_\pi(\boldsymbol{x}) &= \int\cdots\int \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta})\,d\mathsf{m}_n\boldsymbol{\theta} \\
&= \int\cdots\int \exp\{\ell(\boldsymbol{\theta}|\,\boldsymbol{x}\}\pi(\boldsymbol{\theta})\,d\mathsf{m}_n\boldsymbol{\theta} \\
&\approx \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\boldsymbol{\theta}})\frac{(2\pi)^{d/2}}{|n\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})|^{1/2}}\pi(\widehat{\boldsymbol{\theta}}) \\
&\qquad \times \int\cdots\int \frac{|n\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})|^{1/2}}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}-\widehat{\boldsymbol{\theta}})^\top n\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{\theta}-\widehat{\boldsymbol{\theta}})\right\} d\mathsf{m}_n\boldsymbol{\theta} \\
&= \mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\boldsymbol{\theta}})\frac{(2\pi)^{d/2}}{|n\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})|^{1/2}}\pi(\widehat{\boldsymbol{\theta}})
\end{aligned}$$

で近似できることが知られている．これを Laplace 近似という．ここで「≈」の意味は以下である．$a \in \mathbb{R}$ と $\{a_n\}_{n=1}^\infty$ に対して,

$$a \approx a_n \Longleftrightarrow \lim_{n\to\infty}\frac{a}{a_n} = 1$$

である．したがって

$$-2\log\mathsf{p}_\pi(\boldsymbol{x}) \approx -2\log\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\boldsymbol{\theta}}) + d\times\log n + d\times\log\left(\frac{|\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})|^{1/(2d)}}{2\pi}\right) - 2\log\pi(\widehat{\boldsymbol{\theta}})$$

と書くことができる．n が大きいとき, 定式の右辺の 3, 4 項目

$$d\times\log\left(\frac{|\widehat{\mathbf{I}}(\boldsymbol{x})|^{1/(2d)}}{2\pi}\right) - 2\log\pi(\widehat{\boldsymbol{\theta}})$$

は $\log n$ に比較して無視できるので,

$$\mathsf{BIC} := -2\log\mathsf{p}(\boldsymbol{x}|\,\widehat{\boldsymbol{\theta}}) + d\times\log n$$

なる近似式を得る．これを Schwarz **の** Bayes **情報量規準**という．
　線型回帰モデルに適用してみると

$$\mathsf{BIC} = -2\log\mathsf{p}(\boldsymbol{y}|\,\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}},\,\widehat{\sigma}^2) + (d+2)\log n$$

を得る．

2-2 **注意 4.8.** AIC と比較すると, モデルの複雑さへの罰則項が異なる. すなわち, AIC は $2(d+2)$ で, BIC は $(d+2)\log n$ である. これらの違いから以下の性質が知られている. BIC は真のモデルの選択に対する一致性を持つ. 一方, AIC はその性質を持たない. しかし, AIC は予測誤差を最小にするモデルを選択するが, BIC はそのような性質を持たない. □

4.4 補遺：Laplace 近似について

pro:2-5 **命題 4.9.** 連続関数 $h,\, g\,:\,\mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ と $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^d$ に以下の条件を仮定する.

(1) h は $\boldsymbol{x}_0$ において最小値を取り,

$$h(\boldsymbol{x}) > h(\boldsymbol{x}_0) \qquad (\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_0).$$

(2) h は $\boldsymbol{x}_0$ において, 2 回連続微分可能で,

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} p(\boldsymbol{x})\right|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0} &= \boldsymbol{0}, \\ \mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0) &= \left.\left(\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} h(\boldsymbol{x})\right)_{1\le j,\,k\le d}\right|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0} \text{ は正定値}, \\ \boldsymbol{x} &= (x_1,\, x_2,\, \ldots,\, x_d)^\top. \end{aligned}$$

(3) ある $\delta > 0$ と $\epsilon > 0$ が存在して,

$$\lim_{\lambda\to\infty} e^{\lambda h(\boldsymbol{x}_0)-\epsilon} g(\boldsymbol{x}_0) \int_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_2>\lambda} \exp\{-\lambda h(\boldsymbol{x})\} g(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x}) = 0.$$

このとき

$$\lim_{\lambda\to\infty} e^{\lambda h(\boldsymbol{x}_0)} \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\lambda h(\boldsymbol{x})} g(\boldsymbol{x})\, d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x}) = g(\boldsymbol{x}_0)|\mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)|^{1/2}$$

が成立する.

Proof. まず

$$h(\boldsymbol{x}) - h(\boldsymbol{x}_0) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)^\top \mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)(1+o(1)) \qquad (\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}_0).$$

これと g の連続性より, $\forall\epsilon > 0$ に対して, $\delta > 0$ がうまく取れて, $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0|_2 \le \delta$ ならば,

$$\begin{aligned} (1-\epsilon)\left\{\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)^\top \mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)\right\} &\le h(\boldsymbol{x}) - h(\boldsymbol{x}_0) \\ &\le (1+\epsilon)\left\{\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)^\top \mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)\right\}, \\ (1-\epsilon) g(\boldsymbol{x}_0) &\le g(\boldsymbol{x}) \le (1+\epsilon) g(\boldsymbol{x}_0) \end{aligned}$$

となる．これから

$$
\begin{aligned}
&\lambda^{d/2}\int_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_2\le\delta}\exp\left\{-\frac{\lambda}{2}(1\pm\epsilon)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)^\top\mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)\right\}(1\pm\epsilon)g(\boldsymbol{x}_0)\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x})\\
&\quad=\int_{|\boldsymbol{y}|_2\le\sqrt{\lambda}\delta}\exp\left\{-\frac{1}{2}(1\pm\epsilon)\boldsymbol{y}^\top\mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)\boldsymbol{y}\right\}(1\pm\epsilon)g(\boldsymbol{x}_0)\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{y})\\
&\quad\quad\longrightarrow(1\pm\epsilon)^{-d/2+1}(2\pi)^{d/2}\sqrt{|\boldsymbol{I}(\boldsymbol{x}_0)|}g(\boldsymbol{x}_0)\qquad(\lambda\to\infty).
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
&(1-\epsilon)^{-d/2+1}g(\boldsymbol{x}_0)(2\pi)^{d/2}\sqrt{|\mathrm{I}(\boldsymbol{x}_0)|}\\
&\quad\le\liminf_{\lambda\to\infty}\lambda^{d/2}\int_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_2\le\delta}\exp\{-\lambda h(\boldsymbol{x})\}\,g(\boldsymbol{x})\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x})\\
&\quad\le\limsup_{\lambda\to\infty}\lambda^{d/2}\int_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_2\le\delta}\exp\{-\lambda h(\boldsymbol{x})\}\,g(\boldsymbol{x})\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x})\\
&\quad\le(1+\epsilon)^{-d/2+1}g(\boldsymbol{x}_0)(2\pi)^{d/2}\sqrt{|\mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)|}.
\end{aligned}
\tag{4.25}
$$

eq:2-17

次に, 容易にわかるように

$$
\int_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_2>\delta}\exp\bigl\{-\lambda h(\boldsymbol{x})\bigr\}g(\boldsymbol{x})\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x})=0. \tag{4.26}
$$

eq:2-18

よって, $\boldsymbol{x}_0$ の近くの評価 (eq:2-17 4.25) と遠方での評価 (eq:2-18 4.26) と $\epsilon>0$ は任意に取ったことより

$$
\lim_{\lambda\to\infty}\lambda^{d/2}\int_{\mathbb{R}^d}\exp\bigl\{-\lambda\{h(\boldsymbol{x})-h(\boldsymbol{x}_0)\}\bigr\}g(\boldsymbol{x})\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x})=g(\boldsymbol{x}_0)(2\pi)^{d/2}|\mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)|^{1/2}.
$$

したがって,

$$
\lim_{\lambda\to\infty}e^{\lambda h(\boldsymbol{x}_0)}\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{d/2}\int_{\mathbb{R}^d}\exp\bigl\{-\lambda h(\boldsymbol{x})\bigr\}g(\boldsymbol{x})\,d\mathsf{m}_d(\boldsymbol{x})=g(\boldsymbol{x}_0)|\mathbf{I}(\boldsymbol{x}_0)|^{1/2}.
$$

□

第5章　指数型分布族と一般化線型モデル

5.1　指数型分布族

Dobson の 3 章を借用して指数分布族と一般化線型モデルを借用．．そして, 岡留の『機械学習』の４章の分類のところを借用する．

$\Theta \subset \mathbb{R}$ を母数空間とし, 母数 $\theta \in \Theta$ をもつ確率分布に従う確率変数 X を考える．

eq:exp-1

定義 5.1. 確率変数 X の p.d.f. または p.m.f.(これを p と記す) の対数をとったものが次の形で記述されるとき, その分布は**指数型分布族**に属すると言われる．

$$\log \mathsf{p}(x|\,\theta) = t(x)b(\theta) + \kappa(\theta) + d(x).$$

ただし $\log 0 = 0$ と約束し, t, b, κ, d は関数で

$$t : \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad b : \Theta \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \kappa : \Theta \longrightarrow \mathbb{R}, \quad d : \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{R}$$

とする．ただしこれらの関数形は既知とし, $\mathbb{X} = \{x \in \mathbb{R};\, \mathsf{p}(x|\,\theta) > 0\}$ である．

$t(x) = x$ のとき, その分布は**正準型** (canonical form) であると言われ, $b(\theta)$ は**自然母数** (natural parameter) と呼ばれる．

re:exp-2

注意 5.2. もし関心のある未知母数 θ 以外に他の未知母数があるとき, それらを関数 b, κ を構成する**局外母数** (nuisance parameter) と呼ばれる．
□

ex:exp-3

例 5.3. (Bernoulli 分布) X は $\mathsf{Ber}(\theta)\,(0 < \theta < 1)$ に従うとき, X の p.m.f. p は

$$\mathsf{p}(x|\,\theta) = \theta^x (1-\theta)^{1-x} \qquad (x = 0,\, 1)$$

と書ける．これは

$$\log \mathsf{p}(x|\,\theta) = x \log\theta + (1-x)\log(1-\theta) = x\log\frac{\theta}{1-\theta} + \log(1-\theta)$$

と表現できるので

$$t(x) = x, \quad b(\theta) = \frac{\theta}{1-\theta}, \quad \kappa(\theta) = \log(1-\theta), \quad d(\theta) = 0.$$

□

ex:exp-4

例 5.4. (ポアソン分布) X は $\mathsf{Pois}(\theta)\,(\theta > 0)$ に従うとき, X の p.m.f. p は

$$\mathsf{p}(x|\,\theta) = \frac{\theta^x e^{-\theta}}{x!} \qquad (x = 0,\, 1,\, \ldots)$$

と書ける. ただし, $0! = 1$ と形式的に定める. これは

$$\log \mathsf{p}(x|\,\theta) = x \log \theta - \theta - \log x!$$

と表現できるので

$$t(x) = x, \quad b(\theta) = \log \theta, \quad \kappa(\theta) = -\theta, \quad d(x) = -\log x!.$$

□

ex:exp-5

例 5.5. (正規分布) X は $\mathsf{N}(\theta, \sigma^2)\,(\theta \in \mathbb{R},\, 0 < \sigma < \infty)$ に従うとき, X の p.d.f. p は

$$\mathsf{p}(x|\,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x-\theta)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (-\infty < x < \infty)$$

と書かれる. ここで, 関心のある母数は θ で, σ は局外母数で既知とする. このとき,

$$\log \mathsf{p}(x|\,\theta) = -\frac{x^2}{2\sigma^2} + \frac{x\theta}{\sigma^2} - \frac{\theta^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2)$$

と表現できるので,

$$t(x) = x, \quad b(\theta) = \frac{\theta}{\sigma^2}, \quad \kappa(\theta) = -\frac{\theta^2}{2\sigma^2} - \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2), \quad d(x) = -\frac{x^2}{2\sigma^2}.$$

□

sec:exp-2

5.2 指数型分布族の性質

以下では連続型分布の場合で議論を進める. 離散型分布の場合には積分記号を和の記号に書きかえればよい. さらに積分記号と微分記号の交換が可能であることが保証されていると仮定[1]して議論を進める.

まず $\mathsf{p}(x|\,\theta)$ は p.d.f. であることから

$$\int_{\mathcal{X}} \mathsf{p}(x|\,\theta)\, dx = 1. \tag{5.1}$$

eq:exp-1

[1]実は, 指数型分布族の場合には積分記号と微分記号の交換が保証されることを示すことができる. Lehmann and Romano (2022, pp.52-53) を参照のこと.

ただし $\mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R};\ \mathsf{p}(x|\,\theta) > 0\}$ である. θ に関して eq:exp-1 (5.1) の両辺を微分すれば,

$$0 = \frac{d}{d\theta}1 = \frac{d}{d\theta}\int_{\mathbb{X}} \mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = \int_{\mathbb{X}} \frac{d}{d\theta}\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx$$

から

$$\int_{\mathbb{X}} \frac{d}{d\theta}\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = 0 \tag{5.2}$$

ex:exp-2

を得る. 同様に

$$\int_{\mathbb{X}} \frac{d^2\mathsf{p}(x|\,\theta)}{d\theta^2}\,dx = 0. \tag{5.3}$$

eq:exp-3

指数型分布族に属する分布の p.d.f. を eq:exp-1 (5.1) に代入すると

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{X}} \frac{d}{d\theta}\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx &= \int_{\mathbb{X}} \left(\frac{d}{d\theta}\log\mathsf{p}(x|\,\theta)\right)\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx \\ &= \int_{\mathbb{X}} \left\{t(x)\dot{b}(\theta) + \dot{\kappa}(\theta)\right\}\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = 0.\end{aligned}$$

ただし

$$\dot{b}(\theta) = \frac{db(\theta)}{d\theta}, \quad \dot{\kappa}(\theta) = \frac{d\kappa(\theta)}{d\theta}.$$

期待値の定義から

$$\int_{\mathbb{X}} t(x)\dot{b}(\theta)\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = \dot{b}(\theta)\mathsf{E}[a(X)], \quad \int_{\mathbb{X}} \dot{\kappa}(\theta)\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = \dot{\kappa}(\theta)$$

となるので,

$$\dot{b}(\theta)\mathsf{E}[a(X)] + \dot{\kappa}(\theta) = 0. \tag{5.4}$$

eq:exp-4

よって $\dot{b}(\theta) \neq 0$ のとき

$$\mathsf{E}[t(X)] = -\frac{\dot{\kappa}(\theta)}{\dot{b}(\theta)}. \tag{5.5}$$

eq:exp-5

同様に

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{d\theta^2}\mathsf{p}(x|\,\theta) &= \frac{d}{d\theta}\left[\left(\frac{d}{d\theta}\log\mathsf{p}(x|\,\theta)\right)\mathsf{p}(x|\,\theta)\right] \\ &= \left(\frac{d^2}{d\theta^2}\log\mathsf{p}(x|\,\theta)\right)\mathsf{p}(x|\,\theta) + \left(\frac{d}{d\theta}\log\mathsf{p}(x|\,\theta)\right)^2\mathsf{p}(x|\,\theta) \\ &= \left\{a(x)\ddot{b}(\theta) + \ddot{c}(\theta)\right\}\mathsf{p}(x|\,\theta) + \left\{t(x)\dot{b}(\theta) + \dot{\kappa}(\theta)\right\}^2\mathsf{p}(x|\,\theta).\end{aligned} \tag{5.6}$$

eq:exp-6

ただし

$$\ddot{b}(\theta) = \frac{d^2 b(\theta)}{d\theta^2}, \quad \ddot{c}(\theta) = \frac{d^2 c(\theta)}{d\theta^2}.$$

eq:exp-6 (5.6) の最右辺の第 2 項に eq:exp-5 (5.5) を代入すると

$$\begin{aligned}\bigl\{t(x)\dot{b}(\theta) + \dot{\kappa}(\theta)\bigr\}\mathsf{p}(x|\,\theta) &= \{\dot{b}(\theta)\}^2\left\{t(x) + \frac{\dot{\kappa}(\theta)}{\dot{b}(\theta)}\right\}^2\mathsf{p}(x|\,\theta) \\ &= \{\dot{b}(\theta)\}^2\bigl\{t(x) - \mathsf{E}[t(X)]\bigr\}^2\mathsf{p}(x|\,\theta)\end{aligned}$$

と表され

$$\int_{\mathbb{X}} \{t(x) - \mathsf{E}[t(X)]\}^2 \mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = \mathsf{Var}[t(X)]. \tag{5.7}$$

eq:exp-7

一方, eq:exp-3 (5.3) と eq:exp-7 (5.7) から eq:exp-6 (5.6) は以下のように書き直せる.

$$\begin{aligned}0 &= \int_{\mathbb{X}} \frac{d^2}{d\theta^2}\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx = \int_{\mathbb{X}}\bigl\{t(x)\ddot{b}(\theta) + \ddot{\kappa}(\theta)\bigr\}\mathsf{p}(x|\,\theta)\,dx + \{\dot{b}(\theta)\}^2\mathsf{Var}[t(X)] \\ &= \ddot{b}(\theta)\mathsf{E}[t(X)] + \ddot{\kappa}(\theta) + \{\dot{b}(\theta)\}^2\mathsf{Var}[t(X)].\end{aligned}$$

よって $\dot{b}(\theta) \neq 0$ のとき

$$\mathsf{Var}[t(X)] = \frac{\ddot{b}(\theta)\dot{\kappa}(\theta) - \ddot{\kappa}(\theta)\dot{b}(\theta)}{\{\dot{b}(\theta)\}^3}. \tag{5.8}$$

eq:exp-7a

次に $X = x$ が観測されたときの対数尤度関数

$$\ell(\theta|\,x) = \log \mathsf{p}(x|\,\theta)$$

の導関数の x に確率変数 X を形式的に代入して確率変数にしたもの $\ell(\theta|\,X)$ (これも対数尤度関数と乱暴に呼ぶことにする) の期待値と分散を求める.

$$S(\theta|\,x) := \frac{\partial \ell(\theta|\,x)}{\partial\theta} \quad = \frac{\partial}{\partial\theta}\{t(x)b(\theta) + \kappa(\theta) + d(x)\}\} = t(x)\dot{b}(\theta) + \dot{\kappa}(\theta).$$

うえの式の x に形式的に X を代入したもの $S(\theta|\,X)$ を**スコア関数**という. すると eq:exp-5 (5.5) から

$$\begin{aligned}\mathsf{E}[S(\theta|\,X)] &= \mathsf{E}[t(X)\dot{b}(\theta) + \dot{\kappa}(\theta)] = \dot{b}(\theta)\mathsf{E}[t(X)] + \dot{\kappa}(\theta) \\ &= \dot{b}\left[-\frac{\dot{\kappa}(\theta)}{\dot{b}(\theta)}\right] + \dot{\kappa}(\theta) = 0.\end{aligned} \tag{5.9}$$

eq:exp-8

$S(\theta|\,X)$ の分散を Fisher **情報量**といい, $I(\theta)$ と記すことにする. このとき

$$I(\theta) = \mathsf{Var}[S(\theta|\,X)] = \mathsf{Var}[a(X)\dot{b}(\theta) + \dot{\kappa}(\theta)] = \{\dot{b}(\theta)\}^2\mathsf{Var}[t(X)].$$

eq:exp-7
(5.7) から

$$\mathsf{Var}[S(\theta|\,X)] = \{\dot{b}(\theta)\}^2\mathsf{Var}[t(X)] = \frac{\ddot{b}(\theta)\dot{\kappa}(\theta)}{\dot{b}(\theta)} - \ddot{\kappa}(\theta).$$

さらに

$$\dot{S}(\theta|\,x) := \frac{dS(\theta|\,x)}{d\theta} = t(x)\ddot{b}(\theta) + \ddot{\kappa}(\theta)$$

と eq:exp-6 (5.6) から

$$\begin{aligned}\mathsf{E}[\dot{S}(\theta|\,X)] &= \ddot{b}(\theta)\mathsf{E}[t(X)] + \ddot{\kappa}(\theta) = \ddot{b}(\theta)\left[-\frac{\dot{\kappa}(\theta)}{\dot{b}(\theta)}\right] + \ddot{\kappa}(\theta)\\ &= -\frac{\ddot{b}(\theta)\dot{c}(\theta)}{\dot{b}(\theta)} + \ddot{c}(\theta) = -I(\theta) = -\mathsf{Var}[S(\theta|\,X)].\end{aligned}$$

5.3 一般化線型モデル (Generalized linear models(GLM))

GLM は独立な確率変数列 $Y_1, Y_2, \ldots, Y_n$ に対する統計的モデルで以下で定める性質をみたす.

- 各 $Y_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ の分布は同じ指数型分布族に属する. Y_j の p.d.f. または p.m.f. $\mathsf{p}_Y(y_j|\,\theta_j)$ は母数 $\theta_j \in \Theta \subset \mathbb{R}$ で添え字づけられ
$$\mathsf{p}_Y(y_j|\,\theta_j) = \exp\bigl\{y_j b(\theta_j) + \kappa(\theta_j) + d(y_j)\bigr\} \tag{5.10}$$
eq:glm-1
で与えられる.
- 母数 θ_j は直接興味ある対象ではなく, 母数 $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_d\,(d < n)$ に興味がある. ここで
$$\mu_j = \mathsf{E}[Y_j]$$
と書いたとき
$$g(\mu_j) = \boldsymbol{x}_j^\top\boldsymbol{\beta}$$
と表現される. ただし $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ は狭義単調関数で連続微分可能である. したがって μ_j は θ_j の関数で eq:exp-5 (5.5) から
$$\mu_j = -\frac{\dot{\kappa}(\theta_j)}{\dot{b}(\theta_j)}$$

と書ける．さらに $\boldsymbol{x}_j$ は非ランダムな説明変数（既知のもの）で $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_d)^\top$ は未知の回帰係数ベクトルで

$$
\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_d \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^d, \quad \boldsymbol{x}_j = \begin{bmatrix} x_{j1} \\ x_{j2} \\ \vdots \\ x_{jd} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^d,
$$

$$
\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top \\ \boldsymbol{x}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nd} \end{bmatrix}
$$

である．

したがって $(Y_1, Y_2, \ldots, Y_n)$ の同時 p.d.f. または p.m.f. $\mathsf{p}(y_1, y_2, \ldots, y_n | \theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n)$ は

$$
\begin{aligned}
\mathsf{p}(y_1, y_2, \ldots, y_n | \theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n) &= \prod_{j=1}^{n} \exp\{y_j b(\theta_j) + \kappa(\theta_j) + d(y_j)\} \\
&= \exp\left\{\sum_{j=1}^{n} y_j b(\theta_j) + \sum_{j=1}^{n} \kappa(\theta_j) + \sum_{j=1}^{n} d(y_j)\right\}
\end{aligned}
\tag{5.11}
$$

eq:glm-2

となる．

ex:glm-1 くこと.

例 5.6. (ロジスティック回帰モデル) □

5.4 GLM の最尤推定法

$Y_1, Y_2, \ldots, Y_n$ は eq:glm-1 (5.10) で与えられる GLM に従うとする．すると $Y_j = y_j \, (j = 1, 2, \ldots, n)$ を観測したときの対数尤度関数 $\ell_j(\theta_j)$ は

$$
\ell_j(\theta_j) = y_j b(\theta_j) + \kappa(\theta_j) + d(y_j)
$$

と書くことができる．さらに eq:exp-5 (5.5) と eq:exp-7a (5.8) から

$$
\mathsf{E}[Y_j] = \mu_j = -\frac{\dot{\kappa}(\theta_j)}{\dot{b}(\theta_j)} \tag{5.12}
$$

eq:glm-3

$$
\mathsf{Var}[Y_j] = \frac{\ddot{b}(\theta_j)\dot{\kappa}(\theta_j) - \ddot{\kappa}(\theta_j)\dot{b}(\theta_j)}{\{\dot{b}(\theta_j)\}^3} \tag{5.13}
$$

eq:glm-4

$$
g(\mu_j) = \boldsymbol{x}_j^\top \boldsymbol{\beta} =: \eta_j, \quad \boldsymbol{x}_j = (x_{j1}, x_{j2}, \ldots, x_{jd})^\top \tag{5.14}
$$

eq:glm-5

である．$(Y_1, Y_2, \ldots, Y_n)^\top$ の対数尤度関数 ℓ は

$$\ell = \sum_{j=1}^{n} \ell_j(\theta_j) = \sum_{j=1}^{n} y_j b(\theta_j) + \sum_{j=1}^{n} \kappa(\theta_j) + \sum_{j=1}^{n} d(y_j)$$

となる．$\boldsymbol{\beta}$ の最尤推定値を求めるために ℓ を $\boldsymbol{\beta}$ に関して偏微分をする．連鎖偏微分律から

$$\frac{\partial \ell}{\partial \beta_k} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial \ell_j}{\partial \beta_k} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial \ell_j}{\partial \theta_j} \cdot \frac{\partial \theta_j}{\partial \mu_j} \cdot \frac{\partial \mu_j}{\partial \beta_k} \quad (k = 1, 2, \ldots, d) \tag{5.15}$$

eq:glm-6

と書ける．最右辺の各項を計算して行く．(5.12) に注意すると

$$\frac{\partial \ell_j}{\partial \theta_j} = y_j \dot{b}(\theta_j) + \dot{\kappa}(\theta_j) = \dot{b}(\theta_j)\left\{ y_j + \frac{\dot{\kappa}(\theta_j)}{\dot{b}(\theta_j)} \right\} = \dot{b}(\theta_j)\{y_j - \mu_j\} \tag{5.16}$$

eq:glm-7

を得る．次に

$$\frac{\partial \theta_j}{\partial \mu_j} = 1 \Big/ \frac{\partial \mu_j}{\partial \theta_j}$$

であることと (5.12) に注意すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_j}{\partial \theta_j} &= -\frac{\partial}{\partial \theta_j}\left(\frac{\dot{\kappa}(\theta_j)}{\dot{b}(\theta_j)} \right) = -\frac{\ddot{\kappa}(\theta_j)}{\dot{b}(\theta_j)} + \frac{\ddot{b}(\theta_j)\dot{\kappa}(\theta_j)}{\{\dot{b}(\theta_j)\}^2} \\ &= \dot{b}(\theta_j)\left\{ \frac{\ddot{b}(\theta_j)\dot{\kappa}(\theta_j) - \dot{b}(\theta_j)\ddot{\kappa}(\theta_j)}{\{\dot{b}(\theta_j)\}^3} \right\} = \dot{b}(\theta_j)\mathsf{Var}[Y_j] \end{aligned} \tag{5.17}$$

eq:glm-8

を得る．最後の等号は (5.13) からわかる．最後に

$$\frac{\partial \mu_j}{\partial \beta_k} = \frac{\partial \mu_j}{\partial \eta_j} \cdot \frac{\partial \eta_j}{\partial \beta_k} = \frac{\partial \mu_j}{\partial \eta_j} x_{jk} \tag{5.18}$$

eq:glm-9

を得る．(5.16) – (5.18) を (5.15) に代入することでスコア関数は

$$S_k := \sum_{j=1}^{n} \frac{(Y_j - \mu_j)}{\mathsf{Var}[Y_j]} x_{jk} \left(\frac{\partial \mu_j}{\partial \eta_j} \right) \qquad (k = 1, 2, \ldots, d) \tag{5.19}$$

eq:glm-10

となることがわかる．

$S_1, S_2, \ldots, S_d$ の共分散行列を $J = (J_{k\ell})$ は

$$J_{k\ell} = \mathsf{E}[S_k S_\ell] \qquad (k, \ell = 1, 2, \ldots, d)$$

と書くことができる．すると (5.19) から

$$\begin{aligned} J_{k\ell} &= \mathsf{E}\left[\sum_{i=1}^{n} \left\{ \frac{(Y_i - \mu_i)}{\mathsf{Var}[Y_i]} x_{ik} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right) \right\} \sum_{j=1}^{n} \left\{ \frac{(Y_j - \mu_j)}{\mathsf{Var}[Y_j]} x_{j\ell} \left(\frac{\partial \mu_j}{\partial \eta_j} \right) \right\} \right] \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\mathsf{E}[(Y_i - \mu_i)^2]}{\{\mathsf{Var}[Y_i]\}^2} x_{ik} x_{i\ell} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i} \right)^2 \end{aligned}$$

を得る．最後から 2 番目の等号は $\mathsf{E}[(Y_i-\mu_i)(Y_j-\mu_j)]=0\,(i\neq j)$ からわかる．結局

$$J_{k\ell}=\sum_{i=1}^{n}\frac{x_{ik}x_{i\ell}}{\mathsf{Var}[Y_i]}\left(\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}\right)^2 \qquad (k,\,\ell=1,\,2,\,\ldots,\,d) \tag{5.20}$$ eq:glm-11

がわかる．

$m=1,\,2,\,\ldots$ とする．$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(0)}$ を $\boldsymbol{\beta}$ の初期推定値とし, 繰り返し計算で得られる m 回目の $\boldsymbol{\beta}$ の推定値を $\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)}$ と書くことにする．$J^{(m)}=(J_{k\ell}^{(m)})$ の $\boldsymbol{\beta}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)}$ での値とし, $\boldsymbol{S}^{(m)}=(S_1^{(m)},\,S_2^{(m)},\,\ldots,\,S_d^{(m)})^\top$ を S_k の $\boldsymbol{\beta}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)}$ での値とする．したがって (3.4) から

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m-1)}+\left[\mathbf{J}^{(m-1)}\right]^{-1}\mathbf{S}^{(m-1)} \tag{5.21}$$ eq:glm-12

を得る．上式の両辺に $\mathbf{J}^{(m-1)}$ を掛けると

$$\mathbf{J}^{(m-1)}\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)}=\mathbf{J}^{(m-1)}\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m-1)}+\mathbf{S}^{(m-1)} \tag{5.22}$$ eq:glm-13

を得る．

いま

$$\mathbf{W}=(W_{ij})_{i,\,j=1,\,2,\,\ldots,\,n}, \qquad W_{ij}=\begin{cases}\dfrac{1}{\mathsf{Var}[Y_i]}\left(\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}\right) & (i=j)\\ 0 & (i\neq j)\end{cases} \tag{5.23}$$ eq:glm-13a

とおき, $\boldsymbol{\beta}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)}$ での値を $\mathbf{W}^{(m)}$ と書く．すると

$$\mathbf{J}^{(m)}=\mathbf{X}^\top\mathbf{W}^{(m)}\mathbf{X}$$

と書ける．(5.22) の右辺のベクトルの第 j 成分 $(j=1,\,2,\,\ldots,\,d)$ は

$$\sum_{k=1}^{d}\sum_{i=1}^{n}\frac{x_{ij}x_{ik}}{\mathsf{Var}[Y_i]}\left(\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}\right)^2\widehat{\beta}_k^{(m-1)}+\sum_{i=1}^{n}\frac{(Y_i-\mu_i)x_{ij}}{\mathsf{Var}[Y_i]}\left(\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}\right)$$

と書ける．ただし $\mathsf{Var}[Y_i]$, μ_i, $\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}$ も $\boldsymbol{\beta}=\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m-1)}$ での値であることに注意せよ．さらに

$$\begin{aligned}\boldsymbol{z}^{(m)}&=(z_1^{(m)},\,z_2^{(m)},\,\ldots,\,z_d^{(m)})^\top,\\ z_i^{(m)}&=\sum_{k=1}^{d}x_{ik}\widehat{\beta}_k^{(m)}\left(\frac{\partial\mu_i}{\partial\eta_i}\right)+(Y_i-\mu_i)\end{aligned} \tag{5.24}$$ eq:glm-14

とおくと (5.22) の右辺は

$$\mathbf{X}^\top\mathbf{W}^{(m-1)}\widehat{\boldsymbol{z}}^{(m-1)}$$

と書けるので

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)}\mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)} = \mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)}\boldsymbol{z}^{(m-1)}$$

を得る．なぜならば $\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)}\boldsymbol{z}^{(m-1)}$ は第 j 成分 を $\{\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)}\boldsymbol{z}^{(m-1)}\}_j$ ($j = 1, 2, \ldots, d$) と書くと

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)}\boldsymbol{z}^{(m-1)}\}_j &= \sum_{i=1}^{n} x_{ij} W_{ii}^{(m-1)} \widehat{z}_i \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_{ij} \frac{1}{\mathsf{Var}[Y_i]} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i}\right) \left\{ \sum_{k=1}^{d} x_{ik} \widehat{\beta}_k^{(m)} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i}\right) + (Y_i - \mu_i) \right\} \\
&\qquad \left(\because \overset{\texttt{eq:glm-13a}}{(5.23)} \text{ と } \overset{\texttt{eq:glm-14}}{(5.24)} \text{ を代入}\right) \\
&= \sum_{k=1}^{d} \sum_{i=1}^{n} \frac{x_{ij} x_{ik}}{\mathsf{Var}[Y_i]} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i}\right)^2 + \sum_{i=1}^{n} \frac{(Y_i - \mu_i) x_{ij}}{\mathsf{Var}[Y_i]} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \eta_i}\right)
\end{aligned}$$

からわかる．

例 5.7. (Poissson 回帰)

y_j	2	3	6	7	8	9	10	11	12
x_j	-1	-1	0	0	0	0	1	1	1

応答変数 Y_j は Poisson 分布に従う確率変数とする．すると

$$\mu_j = \mathsf{E}[Y_j] = \mathsf{Var}[Y_j] \qquad (j = 1, 2, \ldots, n;\ n = 9) \tag{5.25}$$ eq:glm-15

となる．μ_j と x_j の間に線型関係を仮定する．

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}[Y_j] = \mu_j = \beta_1 + \beta_2 x_j = \boldsymbol{x}_j^\top \boldsymbol{\beta}&, \\
\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_j = \begin{bmatrix} 1 \\ x_j \end{bmatrix}& \quad (j = 1, 2, \ldots, n)
\end{aligned}$$

である．したがってリンク関数 g は恒等関数である．

$$g(\mu_j) = \mu_j = \boldsymbol{x}_j^\top \boldsymbol{\beta} =: \eta_j.$$

これより

$$\frac{\partial \mu_j}{\partial \eta_j} = 1$$

となる．$\overset{\texttt{eq:glm-13a}}{(5.23)}$ と $\overset{\texttt{eq:glm-15}}{(5.25)}$ から

$$W_{jj} = \frac{1}{\mathsf{Var}[Y_j]} = \frac{1}{\beta_1 + \beta_2 x_j} \quad (j = 1, 2, \ldots, n)$$

となる．$\mu_j = \boldsymbol{x}_j^\top \widehat{\boldsymbol{\beta}} = \widehat{\beta}_1 + \widehat{\beta}_2 x_j$ を eq:glm-14 (5.24) に代入すると

$$z_j = \widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j + y_j - \widehat{\beta}_1^{(m-1)} - \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j = y_j$$

となる．また

$$\mathbf{J} = \mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)} \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n \frac{1}{\widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j} & \sum_{j=1}^n \frac{x_j}{\widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j} \\ \sum_{j=1}^n \frac{x_j}{\widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j} & \sum_{j=1}^n \frac{x_j^2}{\widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)} \boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n \frac{y_j}{\widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j} \\ \sum_{j=1}^n \frac{x_j y_j}{\widehat{\beta}_1^{(m-1)} + \widehat{\beta}_2^{(m-1)} x_j} \end{bmatrix}$$

となる．よって

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)} \mathbf{X} \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(m)} = \mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(m-1)} \boldsymbol{y}$$

を得る．

$\widehat{\beta}_1^{(0)} = 7$, $\widehat{\beta}_2^{(0)} = 5$ とする．

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ \vdots \\ 12 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top \\ \boldsymbol{x}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_9^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

なので

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(0)} \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1.821429 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(0)} \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 9.869048 \\ 0.583333 \end{bmatrix}$$

なので

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(1)} &= \left[\mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(0)} \mathbf{X}\right]^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{W}^{(0)} \boldsymbol{y} \\ &= \begin{bmatrix} 0.729167 & 0.4375 \\ 0.4375 & 1.0625 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9.869048 \\ 0.583333 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.4514 \\ 4.9375 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

のように計算される．最尤推定値は

$$\widehat{\beta}_1 = 7.45163, \quad \widehat{\beta}_2 = 4.93530$$

となり，この値における $\mathbf{J}$ の逆行列の値は

$$\mathbf{J}^{-1} = \begin{bmatrix} 0.7817 & 0.4166 \\ 0.4166 & 1.1863 \end{bmatrix}$$

となる．繰り返し計算の結果は下記のようになった．

m	0	1	2	3
$\widehat{\beta}_1^{(m)}$	7	7.45139	7.45163	7.45163
$\widehat{\beta}_2^{(m)}$	5	4.93750	4.93531	4.93530

□

第6章　正則化とカーネル法

6.1　導入

訓練データの実現値を $\mathfrak{t}_n = \{(\boldsymbol{x}_j,\, y_j);\, j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n\}$ とする．ただし $\boldsymbol{x}_j \in \mathbb{R}^d,\, y_j \in \mathbb{R}$ である．予測関数 $g_{\mathfrak{t}}$ をみつけるために探索する関数族 $\mathcal{G} = \{g : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}\}$ を定めて, $g \in \mathcal{G}$ に関して

$$\widehat{\mathsf{Err}}_{\mathfrak{t}}(g) := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\bigl(y_j - g(\boldsymbol{x}_j)\bigr)^2$$

を最小にする関数 $g_{\mathfrak{t}} \in \mathcal{G}$ をみつけたい．関数族 $\mathcal{G}$ をすべての $\mathbb{R}^d$ 上の実数値関数全体がなす集合とすると

$$g(\boldsymbol{x}_j) = y_j \quad (j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$$

をみたす任意の関数 g は $\widehat{\mathsf{Err}}_{\mathfrak{t}}(g) = 0$ をみたす．しかしこの g の汎化誤差はよいことが期待できない．いわゆる**過学習**が起きていることになる．

予測の観点から問題を考える．(X, Y) は $(\boldsymbol{x}_j,\, y_j)$ を発生させて確率分布と同じ分布に従う確率ベクトルとする．任意の関数 $g : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ に対して, 2 乗誤差

$$\mathsf{E}\bigl[\{Y - g(X)\}^2\bigr]$$

を考える．このとき 2 乗誤差を最小にする g は

$$g^*(\boldsymbol{x}) = \mathsf{E}\bigl[Y \bigm| X = \boldsymbol{x}\bigr]$$

で与えられた．関数族 $\mathcal{G}$ は解釈が容易であるような簡単なもので, かつ最適の g^* を含むような豊かなものがが望ましい．

関数族 $\mathcal{G}$ をよりよく理解するために $\mathcal{G}$ を Hilbert 空間 (完備な内積空間) とみなす．たとえば$\mathcal{G}$ を $\mathbb{R}^d$ 上の線型関数すべてのなす集合とすれば, これは Hilbert 空間とみなすことができる．$\mathcal{G} = \{g_\beta(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{\beta};\, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d\}$ の元 g_β と $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d$ を同一視し, $\mathcal{G}$ 上の内積を

$$\langle g_{\beta_1},\, g_{\beta_2}\rangle = \boldsymbol{\beta}_1^\top\boldsymbol{\beta}_2,$$

で定義する．ただし $g_{\beta_1}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{\beta}_1,\, g_{\beta_2}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{\beta}_2,\, \boldsymbol{\beta}_1,\, \boldsymbol{\beta}_2 \in \mathbb{R}^d$ である．すなわち $\langle\cdot,\,\cdot\rangle$ は $\mathbb{R}^d$ 上の Euclid 内積である．するとこの内積 $\langle\cdot,\,\cdot\rangle$ をもつ $\mathcal{G}$ は Hilbert 空間になること[1]がわかる．

[1] これは実数の完備性より直ちに確認できる．

ex:6-1 **例 6.1.** () 多項式回帰訓練データの実現値を

$$\mathsf{t}_n = \{(u_1,\, y_1),\, (u_2,\, y_2),\, \ldots,\, (u_n,\, y_n)\}$$

とする．ただし $u_j,\, y_j \in \mathbb{R}\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$ である．$d \in \mathbb{N},\, d \geq 2$ とし，変換

$$\boldsymbol{\phi}(u) := \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ u^2 \\ \vdots \\ u^{d-1} \end{pmatrix},\, \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

を考える．すると $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d$ としたとき，関数

$$g_\beta :\, u \mapsto \boldsymbol{\phi}(u)^\top \boldsymbol{\beta}$$

全体のなす集合を $\mathcal{G}$ としたとき，対応

$$h_\beta \longleftrightarrow \boldsymbol{\beta}$$

と $\mathbb{R}^d$ 上の Euclid 内積により $\mathcal{G}$ は Hilbert 空間となる． □

回帰問題において線型空間では単純すぎるが，複雑すぎる関数の利用は避けたいところである．そのために，問題そのものを「代入が内積で表現される空間 (再生核 Hilbert 空間)」に変換しその変換先での線型関数を考える方法が**カーネル法**である．カーネル法では，半正定値行列を一般化した**カーネル関数**とよばれる 2 変数関数 k を考え，データ $\boldsymbol{x}_j$ を $k_{\boldsymbol{x}_j} = k(\,\cdot\,, \boldsymbol{x}_j)$ に変換することを**カーネルトリック**とよぶ．特に写像

$$\phi :\, \boldsymbol{x}_j \mapsto k_{\boldsymbol{x}_j}$$

は**特徴写像**とよばれる．データを $\mathbb{R}^d$ とは曲り具合の異なる高次元空間に埋め込むことに相当する．この高次元空間のことを**特徴空間**とよぶ．

6.2 正則化

sec:6-2

$d \in \mathbb{N},\, d \geq 2$ とする．訓練データの実現値を $\mathsf{t}_n = \{(\boldsymbol{x}_j,\, y_j);\, j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n\}$ とする．ただし $\boldsymbol{x}_j \in \mathbb{R}^d,\, y_j \in \mathbb{R}$ とする．$\mathbb{R}^d$ 上の実数値関数の族 $\mathcal{G}$ に関してある損失関数 $\mathsf{Loss} : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ を用いた訓練誤差

$$\widehat{\mathsf{Err}}_{\mathsf{t}}(g) := \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \mathsf{Loss}\bigl(g(\boldsymbol{x}_j),\, y_j\bigr) \quad (g \in \mathcal{G})$$

を最小にする $g_{\mathfrak{t}} \in \mathcal{G}$ をみつけたい. 関数族 $\mathcal{G}$ はある内積に関して Hilbert 空間になっているとする. $\mathcal{G}$ が豊かすぎると訓練誤差は零または零に近くなり, 過学習を起こす. 過学習をさけるためのひとつの方法はモデルの複雑さに罰則

$$J : \mathcal{G} \longrightarrow [0,\, \infty) \cup \{+\infty\}$$

を導入し, 罰則付きの訓練誤差の最小化問題を考えることである. すなわち

$$\min_{g \in \mathcal{G}} \bigl\{ \widehat{\mathsf{Err}}_{\mathfrak{t}}(g) + J(g) :\, g \in \mathcal{G} \bigr\}$$

である.

ex:6-2 **例 6.2.** (リッジ回帰) リッジ回帰は 2 上ノルムの罰則項をもった線型回帰である. $d, n \in \mathbb{N}$ とする. 訓練データの実現値を $\mathfrak{t}_n = \{(\boldsymbol{x}_j,\, y_j);\, j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n\}$ とする. ただし $\boldsymbol{x}_j \in \mathbb{R}^d$, $y_j \in \mathbb{R}$ である. 関数族

$$\mathcal{G} = \{ g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta} :\, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d \}$$

を考え, $\gamma > 0$ に対して

$$\min_{g \in \mathcal{G}} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \bigl(y_j - g(\boldsymbol{x}_j) \bigr)^2 + \gamma \|g\|^2 \right\} \tag{6.1}$$

eq:6-1

を考える. ただし $\|\cdot\|$ は $\mathcal{G}$ の内積から定義される $\mathcal{G}$ 上のノルムである. $g \in \mathcal{G}$ に対して $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d$ を対応させると

$$\|g\|^2 = \langle \boldsymbol{\beta},\, \boldsymbol{\beta} \rangle = \bigl| \boldsymbol{\beta} \bigr|_{2,\, d}^2$$

となる. ただし, $|\cdot|_{2,\, d}$ は Euclid $\mathbb{R}^d$ のノルムである. したがって, 問題は

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{n} \bigl| \boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \bigr|_{2,\, n}^2 + \gamma |\boldsymbol{\beta}|_{2,\, d}^2 \right\} = \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \bigl(y_j - \boldsymbol{x}_j^\top \boldsymbol{\beta} \bigr)^2 + \gamma |\boldsymbol{\beta}|_{2,\, d}^2 \right\} \tag{6.2}$$

eq:6-2

と書きなおすことができる. ただし

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top \\ \boldsymbol{x}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^\top \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

とした. 最小化問題 (6.1) の解は

$$\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta}$$

という形となり $\boldsymbol{\beta}^*$ は最小化問題 (6.1) の解である．$\gamma \to \infty$ のとき罰則項が支配的になり $g \equiv 0$ となる．

問題 (6.2) は凸問題 (対象の関数が凸関数) なので勾配を零とおく．

$$h(\boldsymbol{\beta}) := \frac{1}{n}\big|\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\big|_{2,\,n}^2 + \gamma|\boldsymbol{\beta}|_{2,\,d}^2$$

とおいたとき

$$\frac{\partial h}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{1}{n}\mathbf{X}^\top\big(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\big) + \gamma\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \tag{6.3}$$

eq:6-3

とおく．$\gamma = 0$ のとき上の方程式は正規方程式になる．$\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + \mathbf{I}_d$ が正則のとき

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_\gamma := \big(\mathbf{X}^\top\mathbf{X} + \gamma\mathbf{I}_d\big)^{-1}\mathbf{X}^\top\boldsymbol{y}$$

が方程式 (6.3) の解となる．$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_\gamma$ のことを**リッジ回帰推定量**という． □

問 6.1. (6.3) を示せ．

ある Hilbert 空間 $\mathcal{G}$ に対して罰則項を用いるとき $\mathcal{G}$ を 2 つの直交部分空間 $\mathcal{H}$ と $\mathcal{C}$ に分解するとよい．すなわち $\forall g \in \mathcal{G}$ に対して, ある $h \in \mathcal{H}$ と $c \in \mathcal{C}$ が一意的に存在して

$$g = h + c, \quad \langle h,\, c\rangle_{\mathcal{G}} = 0$$

となる．ただし $\langle\cdot,\,\cdot\rangle_{\mathcal{G}}$ は Hilbert 空間 $\mathcal{G}$ の内積である．Hilbert 空間 $\mathcal{G}$ の任意の元がこのような分解をもつとき, $\mathcal{G}$ は $\mathcal{H}$ と $\mathcal{C}$ の直和であるといい, $\mathcal{G} = \mathcal{H} \oplus \mathcal{C}$ と書く．

ex:6-3 **例 6.3.** (例 6.2 の続き)

$$\widetilde{\boldsymbol{x}}_j = \big(1,\, \boldsymbol{x}_j^\top\big)^\top \quad (j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$$

とする．第 1 成分に対応する回帰係数 (切片) には罰則を加えない．$\widetilde{\boldsymbol{x}} = \big(1,\, \boldsymbol{x}^\top\big)^\top$ とおいたとき

$$\mathcal{G} := \big\{g(\widetilde{\boldsymbol{x}}) = \beta_0 + \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{\beta};\, \beta_0 \in \mathbb{R},\, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d\big\}$$

とし

$$\widehat{\mathsf{Err}}(g) = \frac{1}{n}\big|\boldsymbol{y} - \widetilde{\mathbf{X}}\widetilde{\boldsymbol{\beta}}\big|_{2,\,n}^2 + \gamma|\boldsymbol{\beta}|_{2,\,d}^2$$

の最小化問題を考える．ただし $\gamma > 0$ で

$$\widetilde{\mathbf{X}} = \big(\mathbf{1},\, \mathbf{X}\big), \quad \widetilde{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \boldsymbol{\beta} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1} = \big(\underbrace{1,\, 1,\, \ldots,\, 1}_{n}\big)^\top$$

である．すると $\gamma \to \infty$ のとき $g(\widetilde{\boldsymbol{x}}) = \beta_0$ となる．$g \in \mathcal{G}$ は

$$\widetilde{\boldsymbol{x}} \mapsto \beta_0 + \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta}$$

である．さらに関数族 $\mathcal{C}$ を

$$c : \widetilde{\boldsymbol{x}} \mapsto \beta_0$$

とし, $\mathcal{H}$ を

$$h : \widetilde{\boldsymbol{x}} \mapsto \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\beta}$$

とする．このとき $\mathcal{G}$ の内積を $\bigl(1, \boldsymbol{\beta}^\top\bigr)^\top$ に対する $\mathbb{R}^{d+1}$ 上の Euclid 内積とすれば

$$\mathcal{G} = \mathcal{C} \oplus \mathcal{H}$$

となる．

よって

$$\min_{g \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{C}} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \bigl(y_j - g(\widetilde{\boldsymbol{x}})\bigr)^2 + \gamma \|g\|_{\mathcal{H}} \right\} \tag{6.4}$$

eq:6-4

となる．ただし $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ は $\mathcal{H}$ のノルムである．問題 (6.4) は

$$\min_{\beta_0, \boldsymbol{\beta}} \left\{ \frac{1}{n} \bigl|\boldsymbol{y} - \beta_0 \mathbf{1} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\bigr|_{2,n}^2 + \gamma |\boldsymbol{\beta}|_{2,d}^2 \right\} =: \min_{\beta_0, \boldsymbol{\beta}} h\bigl(\beta_0, \boldsymbol{\beta}\bigr) \tag{6.5}$$

eq:6-5

と書きなおすことができる．$\gamma \to \infty$ のとき

$$g(\widetilde{\boldsymbol{x}}) \longrightarrow \overline{y}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} y_j$$

となる．問題 (6.5) も凸なので

$$\frac{\partial h}{\partial \boldsymbol{\beta}}(\beta_0, \boldsymbol{\beta}) = \mathbf{X}^\top \bigl(\beta_0 \mathbf{1} + \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{y}\bigr) + n\gamma \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \tag{6.6}$$

eq:6-6

$$\frac{\partial h}{\partial \beta_0}(\beta_0, \boldsymbol{\beta}) = n\beta_0 - \mathbf{1}^\top \bigl(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\bigr) = 0 \tag{6.7}$$

eq:6-7

を解けばよい．(6.7) の解を (6.6) に代入すれば $\boldsymbol{\beta}$ をみつけるためには方程式

$$\bigl(\mathbf{X}^\top \mathbf{X} - n^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{1}\mathbf{1}^\top \mathbf{X} + n\gamma \boldsymbol{I}_d\bigr)\boldsymbol{\beta} = \bigl(\mathbf{X}^\top - n^{-1}\mathbf{X}^\top \mathbf{1}\mathbf{1}^\top\bigr)\boldsymbol{y} \tag{6.8}$$

eq:6-8a

を解けばよい．

議論を簡単にするために $n \geq d$ かつ $\operatorname{rank} \mathbf{X} = d$ $\bigl(\Longleftrightarrow \mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ は正則$\bigr)$ を仮定する．すると

$$\begin{aligned}(6.6) &\Longleftrightarrow \beta_0 \mathbf{X}^\top \mathbf{1} + \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{X}^\top \boldsymbol{y} + n\gamma\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \\ &\Longleftrightarrow \bigl(\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + n\gamma \mathbf{I}_d\bigr)\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^\top\bigl(\boldsymbol{y} - \beta_0 \mathbf{1}\bigr)\end{aligned}$$

なので $\boldsymbol{\beta}$ は $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ の一次結合で書ける．よって

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\alpha}, \quad \boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)^\top \in \mathbb{R}^n$$

とおく．これを (6.8) に代入すれば

$$\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top - n^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top\mathbf{X}\mathbf{X}^\top + n\gamma\mathbf{I}_n\big)\boldsymbol{\alpha} = \big(\mathbf{I}_n - n^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top\big)\boldsymbol{y}$$

を得る．$\mathbf{X}\mathbf{X}^\top - n^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top\mathbf{X}\mathbf{X}^\top + n\gamma\mathbf{I}_n$ は正則と仮定すると

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \big(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top - n^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top\mathbf{X}\mathbf{X}^\top + n\gamma\mathbf{I}_n\big)^{-1}\big(\mathbf{I}_n - n^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^\top\big)\boldsymbol{y} \tag{6.9}$$

eq:6-8

となる．ここで

$$\mathbf{X}\mathbf{X}^\top = \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1\rangle_{2,d} & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2\rangle_{2,d} & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_n\rangle_{2,d} \\ \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1\rangle_{2,d} & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2\rangle_{2,d} & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_n\rangle_{2,d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_1\rangle_{2,d} & \langle \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_2\rangle_{2,d} & \cdots & \langle \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_n\rangle_{2,d} \end{pmatrix}$$

となることに注意すると $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}$ は $\{\langle \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j\rangle_{2,d};\, (i, j = 1, 2, \ldots, n)\}$ のみを通して $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ に依存することがわかる．すなわち 各 $\boldsymbol{x}_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ の値がわからなくとも $\{\langle \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j\rangle_{2,d};\, (i, j = 1, 2, \ldots, n)\}$ の値がわかれば $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}$ の値は計算できる．さらに (6.9) を (6.7) に代入すれば

$$\widehat{\beta}_0 = \frac{1}{n}\mathbf{1}^\top\big(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\mathbf{X}^\top\widehat{\boldsymbol{\alpha}}\big)$$

となる．よって

$$g_{\mathrm{t}}\big(\widetilde{\boldsymbol{x}}\big) = \widehat{\beta}_0 + \boldsymbol{x}^\top\mathbf{X}^\top\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \widehat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{n}\widehat{\alpha}_j\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j\rangle_{2,d}, \quad \widehat{\boldsymbol{\alpha}} = \big(\widehat{\alpha}_1, \widehat{\alpha}_2, \ldots, \widehat{\alpha}_n\big)^\top$$

となる．$\widehat{\beta}_0$ と $\widehat{\alpha}_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ は内積 $\{\langle \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j\rangle_{2,d};\, i, j = 1, 2, \ldots, n\}$ の値がわかればよい．さらに $g_{\mathrm{t}}\big(\widetilde{\boldsymbol{x}}\big)$ の値を求めるためには, $\{\langle \boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}\rangle_{2,d};\, j = 1, 2, \ldots, n\}$ の値がわかればよい．内積だけの計算になっていることが肝である．

sec:6-3

6.3 カーネル関数

df:6-4

定義 6.4. $\mathbb{X}$ を空でない集合とし k を $\mathbb{X}$ 上の 2 変数関数とする．k が次の 2 条件をみたすとき, k は $\mathbb{X}$ 上の**カーネル関数**とよばれる．

(i) $\forall x, y \in \mathbb{X}$ に対し

$$k(x, y) = k(y, x). \qquad (\text{対称性})$$

(ii) $\forall n \in \mathbb{N}$, $\{x_j\}_{j=1}^n \subset \mathbb{X}$, $\{c_j\}_{j=1}^n \subset \mathbb{R}$ に対し

$$\sum_{j,\,\ell=1}^{n} c_j c_\ell k(x_j,\, x_\ell) \geq 0. \qquad \text{(半正定値性)}$$

定義 df:6-4 6.4(ii) は, $\forall n \in \mathbb{N}$ と $\{x_j\}_{j=1}^n \subset \mathbb{X}$ に対し

$$\begin{pmatrix} k(x_1,\, x_1) & k(x_1,\, x_2) & \cdots & k(x_1,\, x_n) \\ k(x_2,\, x_1) & k(x_2,\, x_2) & \cdots & k(x_2,\, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n,\, x_1) & k(x_n,\, x_2) & \cdots & k(x_n,\, x_n) \end{pmatrix} \text{ は半正定値}$$

となる.

重要なカーネル関数の例をあげておく.

ex:6-5 **例 6.5.** f を $\mathbb{X}$ 上の関数とする. このとき

$$k(x,\, y) = f(x)f(y) \qquad (x,\, y \in \mathbb{X})$$

はカーネル関数となる. 実際, $\forall n \in \mathbb{N}$, $\{x_j\}_{j=1}^n \subset \mathbb{X}$, $\{c_j\}_{j=1}^n \subset \mathbb{R}$ に対し

$$\sum_{j,\,\ell=1}^{n} c_j c_\ell k(x_j,\, x_\ell) = \sum_{j,\,\ell=1}^{n} c_j c_\ell f(x_j) f(x_\ell) = \left(\sum_{j=1}^{n} c_j f(x_j)\right)^2 \geq 0$$

より半正定値性はわかる. 対称性は定義より明らか. □

ex:6-6 **例 6.6.** k_1, k_2 を $\mathbb{X}$ 上のカーネル関数とする. このとき

$$(k_1 + k_2)(x,\, y) := k_1(x,\, y) + k_2(x,\, y) \qquad (x,\, y \in \mathbb{X})$$

はカーネル関数. □

pro:6-1 **問 6.2.** 例 ex:6-6 6.6 の k の対称性と半正定値性を確認せよ.

ex:6-7 **例 6.7.** $d \in \mathbb{N}$, $\mathbb{X}$ を空でない集合とし

$$\phi\colon \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

を $\mathbb{X}$ から $\mathbb{R}^d$ への写像とする. $\mathbb{R}^d$ 上の任意の内積 $\langle\cdot,\,\cdot\rangle$ を考える. このとき

$$k(x,\, y) = \langle \phi(x),\, \phi(y) \rangle \qquad (x,\, y \in \mathbb{X})$$

はカーネル関数である. 上式の右辺の ϕ のことを**特徴写像**, $\mathbb{R}^d$ を**特徴空間**という.

pro:6-1 **問 6.3.** 内積の性質を用いて例 ex:6-7 6.7 の k の対称性と半正定値性を確認せよ.

6.4 カーネル関数から内積空間の構成

sec:6-4

$\mathbb{X}$ を空でない集合とし k を $\mathbb{X}$ 上のカーネル関数とする. カーネル関数 k と $x \in \mathbb{X}$ に対し, $\mathbb{X}$ 上の関数 k_x を

$$k_x : \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad y \mapsto k(x, y)$$

で定める. $\{k_x\}_{x\in\mathbb{X}}$ で張られる部分ベクトル空間 $\mathcal{V}$ を

$$\mathcal{V} := \left\{ \sum_{j=1}^{n} c_j k_{x_j};\ \text{ある } n \in \mathbb{N} \text{ があって}, \{x_j\}_{j=1}^{n} \subset \mathbb{X}, \{c_j\}_{j=1}^{n} \subset \mathbb{R} \right\}$$

で定める. $f = \sum_{j=1}^{n} a_j x_j$, $f = \sum_{j=1}^{m} b_j y_j \in \mathcal{V}\,(a_j, b_j \in \mathbb{R}, x_j, y_j \in \mathbb{X}, m, n \in \mathbb{N})$ に対し, 写像 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{V}} : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \longrightarrow \mathbb{R}$ を

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{V}} := \Big\langle \sum_{j=1}^{n} a_j k_{x_j}, \sum_{j}^{m} b_j k_{y_j} \Big\rangle_{\mathcal{V}} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{m} a_j b_\ell k\big(y_\ell, x_j\big)$$

と定める. するとカーネル関数 k の半正定値性より $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{V}} \geq 0$ となる. さらに $f, g \in \mathcal{V}$ の表し方に依らず $\langle f, g \rangle_{\mathcal{V}}$ は一意的に定まる. 実際, $x \in \mathbb{X}$ に対し

$$\sum_{j=1}^{n} a_j k_{x_j}(x) = \sum_{j=1}^{m'} a'_j k_{x'_j}(x), \quad \sum_{j=1}^{n} b_j k_{y_j}(x), = \sum_{j=1}^{m'} b'_j k_{y'_j}(x)$$

とする. このとき $k(x, y) = k_y(x)$ と $k(x, y) = k(y, x)$ より

$$\begin{aligned}
\sum_{j,\ell} a_j b_\ell k(y_\ell, x_j) &= \sum_j a_j \sum_\ell b_\ell k(x_j, y_\ell) = \sum_j a_j \sum_\ell b_\ell k_{y_\ell}(x_j) \\
&= \sum_j a_j \sum_\ell b'_\ell k_{y'_\ell}(x_j) = \sum_j a_j \sum_\ell b'_\ell k\big(x_j, y'_\ell\big) \\
&= \sum_j a_j \sum_\ell b'_\ell k\big(y'_\ell, x_j\big) = \sum_\ell b'_\ell \sum_j a_j k\big(y'_\ell, x_j\big) \\
&= \sum_\ell b'_\ell \sum_j a_j k_{x_j}(y'_\ell) = \sum_\ell b'_\ell \sum_j a_j\prime k_{x'_j}(y'_\ell) \\
&= \sum_{j,\ell} b'_\ell a'_j k(y'_\ell, x'_j)
\end{aligned}$$

が成り立つ. よって $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{V}}$ は f, g の表現の仕方によらず f, g で一意的に定まる.

次に, $f, g, h \in \mathcal{V}$ と $\forall \alpha \in \mathbb{R}$ に対し,

(1) $\langle f, g + h \rangle_{\mathcal{V}} = \langle f, g \rangle_{\mathcal{V}} + \langle f, h \rangle_{\mathcal{V}}$,

(2) $\langle f, g \rangle_{\mathcal{V}} = \langle g, f \rangle_{\mathcal{V}}$,

(3) $\langle \alpha f,\, g\rangle_{\mathcal{V}} = \alpha\langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}}$

(4) $\mathcal{V}$ に対し

$$f(x) = \langle f,\, k_x\rangle_{\mathcal{V}} \qquad (x \in \mathcal{V})$$

が成り立つ.

(5) (Cauchy-Schwarz の不等式) $\forall f,\, g \in \mathcal{V}$ に対し

$$\bigl|\langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}}\bigr| \leq \langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}}\, \langle g,\, g\rangle_{\mathcal{V}}. \tag{6.10}$$ eq:6-9

等号成立は $f = cg\,(c \in \mathbb{R})$ のとき.

が成り立つ.
証明: (2), (3) は明らかである.
(1) の証明: $f = \sum_{j=1}^{n} a_j k_{x_j}$, $g = \sum_{j=1}^{m} b_j k_{y_j}$, $\gamma k_z\,(a_j,\, b_j,\, z \in \mathbb{R},\, x_j,\, y_j,\, z \in \mathbb{X})$ に対し, $b_{m+1} = \gamma$, $y_{m+1} = z$ とおく. すると

$$\begin{aligned}
\langle f,\, g+h\rangle_{\mathcal{V}} &= \sum_{j=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{m} a_j b_\ell k\bigl(y_\ell,\, x_j\bigr) + \sum_{j=1}^{n} a_j b_{m+1} k\bigl(y_{m+1},\, x_j\bigr) \\
&= \sum_{j=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{m} a_j b_\ell k\bigl(y_\ell,\, x_j\bigr) + \sum_{j=1}^{n} a_j \gamma k\bigl(z,\, x_j\bigr) \\
&= \langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}} + \langle f,\, \gamma k_z\rangle_{\mathcal{V}}
\end{aligned}$$

が成り立つ. ここで示した等式を繰り返し用いれば, (1) が得られる.
(4) の証明: $f = \sum_{j=1}^{m} a_j k_{x_j}$ とおく. このとき

$$\begin{aligned}
\langle f,\, k_x\rangle_{\mathcal{V}} &= \Bigl\langle \sum_{j=1}^{m} a_j k_{x_j},\, k_x\Bigr\rangle_{\mathcal{V}} = \sum_{j=1}^{m} a_j \langle k_{x_j},\, k_x\rangle_{\mathcal{V}} = \sum_{j=1}^{m} a_j k(x,\, x_j) \\
&= \sum_{j=1}^{m} a_j k(x_j,\, x) = \sum_{j=1}^{m} a_j k_{x_j}(x) = f(x).
\end{aligned}$$

(5) の証明: $\forall t \in \mathbb{R}$ に対し

$$\langle tf+g,\, tf+g\rangle_{\mathcal{V}} = t^2\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}} + 2t\langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}} + \langle g,\, g\rangle_{\mathcal{V}} \geq 0$$

である. $\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}} = 0$ のとき,

$$2t\langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}} + \langle g,\, g\rangle_{\mathcal{V}} \geq 0$$

となる. t は任意であったので, $\langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}} = 0$. よって, (6.10) は成立.
$\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}} \neq 0$ のとき,

$$\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}}\left\{t + \frac{\langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}}}{\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}}}\right\}^2 + \frac{\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}}\,\langle g,\, g\rangle_{\mathcal{V}} - \langle f,\, g\rangle_{\mathcal{V}}^2}{\langle f,\, f\rangle_{\mathcal{V}}} \geq 0$$

より

$$\frac{\langle f, f\rangle_{\mathcal{V}} \langle g, g\rangle_{\mathcal{V}} - \langle f, g\rangle_{\mathcal{V}}^2}{\langle f, f\rangle_{\mathcal{V}}} \geq 0 \iff \left|\langle f, g\rangle_{\mathcal{V}}\right|^2 \leq \langle f, f\rangle_{\mathcal{V}} \langle g, g\rangle_{\mathcal{V}}$$

がわかる. □

以上の議論により, k によって構成された, $\mathcal{V}$ は $\langle\cdot, \cdot\rangle_{\mathcal{V}}$ を内積としてもつ内積空間となることがわかった. あとは, $\mathcal{V}$ を完備化することになる. 完備化された空間を $(\mathcal{H}, \langle\cdot, \cdot\rangle_{\mathcal{H}})$ と書くことにする.

定理 6.8. (Moore-Aronszajn の定理) $\mathbb{X}$ 上のカーネル関数 k に対し, $\mathbb{X}$ の再生核 Hilbert 空間 $(\mathcal{H}, \langle\cdot, \cdot\rangle_{\mathcal{H}})$ で以下の 3 条件をみたすものが一意的に存在する.

(1) $\forall x \in \mathbb{X}$ に対し, $k(\cdot, x) \in \mathcal{H}_k$.

(2) $\mathrm{span}\{k(\cdot, x) \in x \in \mathbb{X}\}$ は $\mathcal{H}_k$ の稠密な部分集合. すなわち, $\forall\epsilon > 0$ と $\forall h \in \mathcal{H}$ に対し, ある $v \in \mathcal{V}$ が存在して,

$$\|f - v\|_{\mathcal{H}} < \epsilon$$

となる. ただし, $\|f\|_{\mathcal{H}} = \sqrt{\langle f, f\rangle_{\mathcal{H}}}$.

(3) k は $\mathcal{H}_k$ の再生核. すなわち,

$$\langle f, k(\cdot, x)\rangle_{\mathcal{H}} = f(x) \qquad (\forall x \in \mathbb{X}, \forall f \in \mathcal{H}).$$

Proof. 福水 (2010, pp.18-19). □

命題 6.9. k を空ではない位相空間 $\mathbb{X}$ 上の半正定値カーネル. $\mathcal{H}$ を対応する再生核 Hilbert 空間とする. 関数 $x \mapsto k(x, x)$ は連続で, 任意の $y \in \mathbb{X}$ に対し, $x \mapsto k(x, y)$ が $x = y$ において連続であれば, $\mathcal{H}$ に属するすべての関数は $\mathbb{X}$ 上で連続である. とくに $\mathbb{X} \times \mathbb{X}$ 上で連続な半正定値カーネルにより定まる再生核 Hilbert 空間は連続関数からなる.

Proof. 福水 (2010, p.19). □

定理 6.10. (リプリゼンタ定理) k を $\mathbb{X}$ 上のカーネル関数とし, $\mathcal{H}$ を k に対応する再生核 Hilbert 空間とする. $\mathfrak{X} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\} \subset \mathbb{X}$ をデータとする. Loss を n 変数の関数で, pen は $\mathbb{R}$ 上の非減少関数, $b \in \mathbb{R}$ とする. この設定で

$$\mathsf{Loss}\big(f(x_1) + b, f(x_2) + b, \ldots, f(x_n) + b\big) + \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big)$$

を $\mathcal{H}$ の中で最小にするものは

$$f = \sum_{j=1}^{n} \xi_j k_{x_j} \qquad (\xi_j \in \mathbb{R},\ j = 1,\ 2, \ldots,\ n)$$

と仮定してよい.

Proof. $\mathbf{P}$ を $\operatorname{span}\{k_{x_1},\ k_{x_2},\ \ldots,\ k_{x_n}\} =: \mathcal{V}$ への直交射影とする. $\mathbf{P}$ は, $\langle \mathbf{P}f,\ g\rangle_{\mathcal{H}} = \langle f,\ \mathbf{P}f\rangle_{\mathcal{H}}\,(\forall f,\ g \in \mathcal{H})$ かつ $\mathbf{P}f = f\,(\forall f \in \mathcal{V})$ である. $f \in \mathcal{H}$ に対し

$$f(x_j) = \langle f,\ k_{x_j}\rangle_{\mathcal{H}} = \langle f,\ \mathbf{P}k_{x_j}\rangle_{\mathcal{H}} = \langle \mathbf{P}f,\ k_{x_j}\rangle_{\mathcal{H}} = (\mathbf{P}f)(x_j)$$

となる. したがって,

$$\begin{aligned}
&\mathsf{Loss}\big(f(x_1) + b,\ f(x_2) + b,\ \ldots,\ f(x_n) + b\big) + \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big) \\
&\quad = \mathsf{Loss}\big((\mathbf{P}f)(x_1) + b,\ (\mathbf{P}f)(x_2) + b,\ \ldots,\ (\mathbf{P}f)(x_n) + b\big) + \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big)
\end{aligned}$$

を得る. $\mathcal{V}^{\perp} := \{f \in \mathcal{H};\ \langle f,\ g\rangle = 0\,(\forall g \in \mathcal{V})$ とする. このとき, $\forall \in \mathcal{H}$ に対し,

$$f = \mathbf{P}f + f^{\perp}\,(f^{\perp} \in \mathcal{V}^{\perp})$$

と一意的に分解できるので,

$$\|\mathbf{P}f\|_{\mathcal{H}}^2 \le \|f\|_{\mathcal{H}}^2 \Longrightarrow \mathsf{pen}\big(\|\mathbf{P}f\|_{\mathcal{H}}^2\big) \le \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big).$$

よって,

$$\begin{aligned}
&\mathsf{Loss}\big(f(x_1) + b,\ f(x_2) + b,\ \ldots,\ f(x_n) + b\big) + \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big) + \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big) \\
&\quad \ge \mathsf{Loss}\big((\mathbf{P}f)(x_1) + b,\ (\mathbf{P}f)(x_2) + b,\ \ldots,\ (\mathbf{P}f)(x_n) + b\big) \\
&\qquad + \mathsf{pen}\big(\|f\|_{\mathcal{H}}^2\big) + \mathsf{pen}\big(\|\mathbf{P}f\|_{\mathcal{H}}^2\big)
\end{aligned}$$

が成り立つので,

$$f = \mathbf{P}f = \sum_{j=1}^{n} \xi_j k_{x_j} \quad (\xi_j \in \mathbb{R},\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ n)$$

としてよい. □

6.5 例

6.5.1 連立方程式

連立方程式

$$\begin{cases} x_1 + x_3 = 0 \\ \qquad\; x_2 = 1 \end{cases} \tag{6.11}$$ eq:6-10

を考える. 行列とベクトルで表現すると

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \iff \mathbf{R}^\top \boldsymbol{x} = \boldsymbol{\eta},$$

$$\mathbf{R} = \bigl(\boldsymbol{r}_1,\, \boldsymbol{r}_2\bigr),\ \boldsymbol{r}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{r}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

は$\mathbf{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\eta}$とし
ばいい.

である.

すると

$$\boldsymbol{x}_* = a \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} =: a \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \boldsymbol{x}_0 \quad (a \in \mathbb{R})$$

は方程式 eq:6-10 6.11 の解となる.

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \operatorname{span}\bigl(\mathbf{R}\bigr) = \bigl\{a\boldsymbol{r}_1 + b\boldsymbol{r}_2;\ a,\, b \in \mathbb{R}\bigr\},$$

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \operatorname{span}\bigl(\mathbf{R}\bigr)^\perp := \Bigl\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3;\ \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle = 0 \,\bigl(\forall \boldsymbol{y} \in \operatorname{span}\bigl(\mathbf{R}\bigr)\bigr)\Bigr\}$$

であることに注意せよ. ベクトル $\boldsymbol{x}_0 = (0,\, 1,\, 0)^\top$ は

$$\|\boldsymbol{x}\|^2 := \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{x} \rangle = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$$

を最小にする解である. すなわち, $(0,\, 1,\, 0)^\top$ はノルムが最小となる解 (唯一存在) で, 任意の解 $\boldsymbol{x}_*$ に対して

$$\boldsymbol{x}_0^\top \boldsymbol{x}_0 \le \boldsymbol{x}_*^\top \boldsymbol{x}_*$$

をみたしている.

以上の考察より一般的に考える. $d, n \in \mathbb{N}$, $n \geq d$ とし, $\mathbf{R}$ を $n \times d$ 実行列, $\boldsymbol{\eta}$ を $d \times 1$ の縦ベクトルで, 方程式

$$\mathbf{R}^\top \boldsymbol{x} = \boldsymbol{\eta} \tag{6.12}$$

eq:6-11

を解くことを考える.

$$\boldsymbol{\eta} \in \mathrm{span}\big(\mathbf{R}^\top\big) \in \mathbb{R}^d$$

ならば, 解 $\boldsymbol{x}_*$ は存在する. ただし, $\mathrm{span}\big(\mathbf{R}^\top\big)$ は $\mathbf{R}^\top$ の列ベクトルで張られた $\mathbb{R}^d$ の部分空間である. 1 つの解 $\boldsymbol{x}_*$ が与えられたとき, 他の解を $\boldsymbol{x}$ と書けば

$$\mathbf{R}^\top \boldsymbol{x}_* = \mathbf{R}^\top \boldsymbol{x} \iff \mathbf{R}^\top\big(\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}\big) = \mathbf{0} \iff \boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x} \in \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big)^\perp$$

となる. $\boldsymbol{x}_1 := \boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x} \in \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big)^\perp$ とおけば,

$$\mathbb{R}^n = \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big) \otimes \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big)^\perp$$

なので, 解 $\boldsymbol{x}_*$ は

$$\boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{x}_1 \quad \Big(\boldsymbol{x}_0 \in \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big),\ \boldsymbol{x}_1 \in \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big)^\perp\Big)$$

と一意的に書ける. さらに,

$$\boldsymbol{x}_0^\top \boldsymbol{x}_0 \leq \boldsymbol{x}_0^\top \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{x}_1^\top \boldsymbol{x}_1$$

なので, $\boldsymbol{x}_0$ は最ノルム小解である. よって, 最小ノルム解は

$$\boldsymbol{x}_0 = \mathbf{R}\boldsymbol{\xi} \quad \big(\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d\big)$$

と書ける. $\boldsymbol{x}_0 = \mathbf{R}\boldsymbol{\xi}$ を方程式 (6.12) に代入すると

$$\mathbf{R}^\top \mathbf{R}\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\eta}$$

となる. $\boldsymbol{\xi}$ とは異なるベクトル $\widetilde{\boldsymbol{\xi}} \in \mathbb{R}^d$ が

$$\mathbf{R}^\top \mathbf{R}\widetilde{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{\eta}$$

をみたすとすると

$$\mathbf{R}\boldsymbol{\xi} = \mathbf{R}\widetilde{\boldsymbol{\xi}}$$

となる. なぜならば, $\mathbf{R}^\top \boldsymbol{x} = \boldsymbol{\eta}$ をみたし, $\boldsymbol{x} \in \mathrm{span}\big(\mathbf{R}\big)$ となるものは唯一だからである.

例にもどれば

$$\mathbf{R}^\top \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

より

$$\mathbf{R}^\top \mathbf{R}\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\eta} \Longleftrightarrow \begin{cases} 2\xi_1 = 0 \\ \ \xi_2 = 1 \end{cases}$$

より, $(\xi_1, \xi_2) = (0, 1)$ となる．よって,

$$\boldsymbol{x}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

となる．

以上をまとめると,

$$\boldsymbol{r}_k \in \mathbb{R}^d \, (k = 1, 2, \ldots, d), \quad \boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \ldots, \eta_n)^\top \in \mathbb{R}^n$$

とする．方程式

$$\langle \boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{x} \rangle = \eta_k \qquad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

をみたす, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ でノルム

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{x}}$$

を最小とするものをみつける問題の解は

$$\boldsymbol{x}_s = \sum_{k=1}^{n} \xi_k \boldsymbol{r}_k$$

で $(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n)$ は

$$\sum_{k=1}^{n} \langle \boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k \rangle \xi_i = \eta_i \qquad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

をみたすものである．

は関数解析の
らまとめなお
．参考文献は,
E義『逆問
12) の　6 章.
光『工学系の
f』(2010) の 7
itoh, S. and
no, Y (2016)
の 3 章.

6.5.2　補間スプライン

点 (t_j, y_j), $j = 0, \ldots, n$, $y_0 = 0$, $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_n = 1$ が与えられたとする．関数族

$$W_0^1 := \left\{ f \in L^2[0, 1];, f(0) = 0, \int_0^1 \{\dot{f}(t)\}^2 \, dt < \infty \right\}, \quad \dot{f}(t) = \frac{df}{dt}$$

の中で,

$$f(t_j) = y_j \qquad (j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$$

をみたしたものの中で

$$\int_0^1 \{\dot{f}(t)\}^2\, dt$$

を最小とするものをみつけたい.

W_0^1 の内積として, $f,\, g \in W_0^1$ に対し

$$\langle f,\, g\rangle := \int_0^1 \dot{f}(t)\dot{g}(t)\, dt, \quad \|f\| = \sqrt{\langle f,\, f\rangle}$$

とおく. $t \in [0,\, 1]$ に対し

$$k_j(t) = \min\{t,\, t_j\} \qquad (j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$$

とおく. このとき, $k_j(t) \in W_0^2$ であり,

$$\langle f,\, k_j\rangle = \int_0^1 \dot{f}(s)\dot{k}_j(s)\, ds = \int_0^{t_j} \dot{f}(s)\, ds = f(t_j) - f(0) = f(t_j).$$

したがって, $y_j = f(t_j)$ をみたす関数は

$$f(t_j) = \langle k_j,\, f\rangle = y_j \qquad (j = 1,\, 2, \ldots,\, n) \tag{6.13}$$

eq:6-12

条件 (eq:6-12 6.13) をみたす最小ノルムの関数は, リプリゼンタ定理から

$$\widehat{f}(s) = \sum_{j=1}^n \xi_j k_j(s), \qquad s \in [0,\, 1],\, \xi 1,\, \xi_2,\, \ldots,\, \xi_n \in \mathbb{R} \tag{6.14}$$

eq:6-13

の形でかける. (eq:6-13 6.14) を (eq:6-12 6.13) に代入すれば

$$\langle k_j,\, ,\sum_{\ell=1}^n \xi_\ell k_\ell\rangle = \sum_{\ell=1}^n \langle k_j,\, k_\ell\rangle \xi_\ell = y_j \qquad (j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$$

となる.

$$\boldsymbol{K} := \begin{pmatrix} \langle k_1,\, k_1\rangle & \langle k_1,\, k_2\rangle & \cdots & \langle k_1,\, k_n\rangle \\ \langle k_2,\, k_1\rangle & \langle k_2,\, k_2\rangle & \cdots & \langle k_2,\, k_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle k_n,\, k_1\rangle & \langle k_n,\, k_2\rangle & \cdots & \langle k_n,\, k_n\rangle \end{pmatrix},\, \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},\, \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}$$

とおけば,

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{y}$$

となる．したがって, $0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n = 1$ なので, $\boldsymbol{K}$ は正定値になる．実際

$$\mathrm{Det}\left(\boldsymbol{K}\right) = t_1 \prod_{j=2}^{n} (t_j - t_2)$$

と書けること[2]からわかる．さらに, $\boldsymbol{K}_i$ を 1 行目から j 行目に対する小行列とすると, すべての $i = 1, 2, \ldots, n$ に対し $\mathrm{Det}\,\boldsymbol{K}_i \succsim \mathbf{0}$ なので, $\boldsymbol{K} \succsim \mathbf{0}$ がわかる．

たとえば, $n = 5$ とし,

$$f(0) = 0,\ f(0.1) = 0.1,\ f(0.25)1,\ f(0.5) = 2,\ f(0.75) = 1.5,\ f(1) = 1.75$$

とすれば,

$$\begin{pmatrix} 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 \\ 0.1 & 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \\ 0.1 & 0.25 & 0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 0.1 & 0.25 & 0.5 & 0.75 & 0.75 \\ 0.1 & 0.25 & 0.5 & 0.75 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ x_2 \\ \xi_3 \\ \xi_4 \\ \xi_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 \\ 1 \\ 2 \\ 1.5 \\ 1.75 \end{pmatrix}$$

の解は

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \\ \xi_4 \\ \xi_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ -2 \\ 6 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

より

$$\widehat{f}(t) = -5k_1(t) + 2k_2(t) + 6k_3(t) - 3k_4(t) + k_5(t) = \begin{cases} t & (0 \leq t \leq 0.1) \\ 6t - 0.5 & (0.1 \leq t \leq 0.25) \\ 4t & (0.25 \leq t \leq 0.5) \\ -2t + 3 & (0.5 \leq \leq 0.75) \\ t + 0.75 & (0.75 \leq t \leq 1) \end{cases}$$

となる．

[2] $g(t_2, t_3, \ldots, t_n) = \mathrm{Det}\left(\boldsymbol{K}\right)$ とおく．$t_j = t_1\,(j = 2, 3, \ldots, n)$ とおけば, 1 行目と j 行目が等しくなるので, 行列式の性質より $g(t_2, t_3, \ldots, t_n) = 0$. よって, g は $(t_j - t_1)\,(j = 2, \ldots, n)$ という因子をもつことからわかる．

第7章　2 値判別分析と回帰

Christensen の資料を借用. 福水 (2010) も参照のこと.

7.1　サポートベクターマシン (SVM)

7.1.1　SVM の考え方

この節は中川裕志 (2016, pp.79-91) を参考にした.

$j = 1, 2, \ldots, n \, (n \in \mathbb{N})$ とし $\boldsymbol{x}_j \in \mathbb{R}^d$, $y_j \in \{-1, 1\}$ を教師データとする. y_j の値によりデータ j を分類する. $\boldsymbol{x}_j$ は説明変数で, y_j は応答変数となる. ここで $y_j = 1$ と $y_j = -1$ に対応する説明変数の 2 つの集合

$$S_+ := \{j \in \{1, 2, \ldots, n\};\, y_j = 1\} \text{ と } S_- := \{j \in \{1, 2, \ldots, n\};\, y_j = -1\}$$

は $\mathbb{R}^d$ の超平面で分離可能とする. すなわち, あるベクトル $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^d$ と実数 $w_0 \in \mathbb{R}$ を上手く取り

$$y(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{x} \rangle + w_0, \quad \boldsymbol{w} = (w_1, w_2, \ldots, w_d)^\top \tag{7.1}$$

eq:svm-1

とおいたとき

$$y(\boldsymbol{x}_j) > 0 \Longrightarrow j \in S_+, \quad y(\boldsymbol{x}_j) < 0 \Longrightarrow j \in S_-$$

であるとする. したがって超平面 (7.1) は分類器となる. このような超平面は複数あるとき, 超平面 (7.1) に最も近いデータ $\boldsymbol{x}_j$ との距離を最小にするような超平面を選択することを考える. 選ばれた超平面との距離が最小であるデータを**サポートベクター**という.

データ $\boldsymbol{x}_j \, (j = 1, 2, \ldots, n)$ と超平面 (7.1) との距離を求めよう. $\boldsymbol{x}_j$ から (7.1) 下した垂線と超平面との交点を $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ とおく. 定義より $y(\widetilde{\boldsymbol{x}}) = 0$ であることに注意せよ. 超平面 (7.1) と直交する単位ベクトルは

$$\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|_{2,d}}$$

である. このことよりある実数 r_j があって

$$\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_0 = r_j \frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|_{2,d}}$$

と書ける．すると

$$y(\boldsymbol{x}_j) = \langle \boldsymbol{w}, , \boldsymbol{x}_j \rangle + w_0 = \left\langle \boldsymbol{w},\, \widetilde{\boldsymbol{x}} + r_j \frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|_{2,\,d}} \right\rangle + w_0 = \langle \boldsymbol{w},\, \widetilde{\boldsymbol{x}} \rangle + w_0 + r_j |\boldsymbol{w}|_{2,\,d}$$
$$= y(\widetilde{\boldsymbol{x}}) + r_j |\boldsymbol{w}|_{2,\,d} = r_j |\boldsymbol{w}|_{2,\,d}$$

となることから

$$r_j = \frac{y(\boldsymbol{x}_j)}{|\boldsymbol{w}|_{2,\,d}}$$

がわかる．よって

$$|r_j| = \frac{y_j y(\boldsymbol{x}_j)}{|\boldsymbol{w}|_{2,\,d}}$$

を得る．

いま

$$\min_{j \in \{1,\,2,\,\ldots,\,n\}} |y(\boldsymbol{x}_j)| = \frac{1}{c}$$

とおく．データは分離可能なので c は有界である．ここで

$$z(\boldsymbol{x}) = \langle c\boldsymbol{w},\, \boldsymbol{x} \rangle + c w_0$$

とおくと $y(\boldsymbol{x})$ と $z(\boldsymbol{x})$ は同じ直線を表し

$$\min_{j \in \{1,\,2,\,\ldots,\,n\}} r_j = \min_{j \in \{1,\,2,\,\ldots,\,n\}} \frac{y_j y(\boldsymbol{x}_j)}{|\boldsymbol{w}|_{2,\,d}} = \min_{j \in \{1,\,2,\,\ldots,\,n\}} \frac{y_j z(\boldsymbol{x}_j)}{|c\boldsymbol{w}|_{2,\,d}}$$
$$= \frac{1}{c} \frac{1}{|\boldsymbol{w}|_{2,\,d}}$$

となる．したがって $|r_j|$ の最小化問題は

$$\text{minimize}_{\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^d,\, w_0 \in \mathbb{R}} \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{w},\, \boldsymbol{w} \rangle \tag{7.2}$$
$$\text{subject to}\, 1 - y_j \big(\langle \boldsymbol{w},\, \boldsymbol{x}_j \rangle + w_0 \big) \leq 0 \, (j = 1,\, 2,\, \ldots,\, n)$$

eq:svm-2

となる．最適解をみつけるために Langrange 関数と双対関数を

$$L(\boldsymbol{w},\, w_0,\, \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{2} \langle \boldsymbol{w},\, \boldsymbol{w} \rangle + \sum_{j=1}^{n} \mu_j \big\{ 1 - y_j \big(\langle \boldsymbol{w},\, \boldsymbol{x}_j \rangle + w_0 \big) \big\} \tag{7.3}$$

eq:svm-3

$$L^*(\boldsymbol{\mu}) = \max_{\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^d,\, w_0 \in \mathbb{R}} L(\boldsymbol{w},\, w_0,\, \boldsymbol{\mu}) \tag{7.4}$$

とおく．ただし $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1,\, \mu_2,\, \ldots,\, \mu_n)^\top$ である．KKT 条件 (??) から thm:con-54

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{w},\, w_0,\, \boldsymbol{\mu})}{\partial w_j} = 0 \quad (j = 0,\, 1,\, \ldots,\, 0)$$

から

$$\boldsymbol{w} = \sum_{j=1}^{n} \mu_j y_j \boldsymbol{x}_j, \qquad \sum_{j=1}^{n} \mu_j y_j = 0 \tag{7.5}$$

eq:svm-5

を得る．最適化問題 (7.2) の双対問題は

$$\text{maximize}_{\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{R}^n} L^*(\boldsymbol{\mu}) \quad \text{subject to}\, \boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0} \tag{7.6}$$

eq:svm-6

となる．ここで (7.5) を (7.3) に代入すると

$$\begin{aligned}
L^*(\boldsymbol{\mu}) &= \frac{1}{2}\Big\langle \sum_{j=1}^{n} \mu_j y_j \boldsymbol{x}_j,\, \sum_{\ell=1}^{n} \mu_\ell y_\ell \boldsymbol{x}_\ell \Big\rangle + \sum_{j=1}^{n} \mu_j \Big(1 - y_j \Big\langle \sum_{\ell=1}^{n} \mu_\ell y_\ell \boldsymbol{x}_\ell,\, \boldsymbol{x}_j \Big\rangle - y_j w_0 \Big) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} y_j \mu_j y_\ell \mu_\ell \langle \boldsymbol{x}_j,\, \boldsymbol{x}_\ell \rangle + \sum_{j=1}^{n} \mu_j - \sum_{j=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} y_j \mu_j y_\ell \mu_\ell \langle \boldsymbol{x}_j,\, \boldsymbol{x}_\ell \rangle \\
&\quad - w_0 \sum_{j=1}^{n} y_j \mu_j \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} y_j \mu_j y_\ell \mu_\ell \langle \boldsymbol{x}_j,\, \boldsymbol{x}_\ell \rangle + \sum_{j=1}^{n} \mu_j
\end{aligned}$$

となる． 最後の等号は (7.5) を用いた． したがって双対問題 (7.5 は 2 次最適問題となるので，解くことができる． さらに定理 D.54 より強双対性が成立するので $\boldsymbol{\mu}^* = (\mu_1^*, \mu_2^*, \ldots, \mu_n^*)^\top$ を双対問題 (7.6) の解とし，$\boldsymbol{w}^* = (w_1^*, w_2^*, \ldots, w_d^*)^\top$, w_0^* を最適化問題 (7.2) の解としたとき

$$L^*(\boldsymbol{\mu}^*) = \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{w}^*,\, \boldsymbol{w}^* \rangle$$

が成立している．以上のことより

$$\boldsymbol{x}^* = \sum_{j=1}^{n} \mu_j^* y_j \boldsymbol{x}_j$$

を得る．さらに条件 (D.70) から

$$\mu_j^* \neq 0 \Longleftrightarrow y_j\big(\langle \boldsymbol{x}_j,\, \boldsymbol{w}^* \rangle + w_0^*\big) = 1$$

が成立している． ここで $J = \{j \in \{1, 2, \ldots, n\};\, \mu_j^* \neq 0\}$ とおく． 上の式の両辺に y_j を掛けると $j \in J$ に対して

$$\langle \boldsymbol{x}_j,\, \boldsymbol{w}^* \rangle + w_0^* = y_j$$

となるので，

$$w_0^* = \frac{1}{\#(J)} \sum_{j \in J} y_j \big\{ \langle \boldsymbol{w}^*,\, \boldsymbol{x}_j \rangle - y_j \big\}$$

を得る．ただし $\#(J)$ は集合 J の元の個数を表す．

第A章　確率・確率変数・期待値の復習

この章では, この講義で必要な確率・確率変数・確率分布・期待値の定義を復習する. 証明については, Moodle にある別の資料を参照のこと.

A.1　確率

確率論はランダムな現象を扱う数学理論である. 確率論で扱う行為を**試行**という. 試行のありえる結果すべてを集めた集合を**標本空間**といい, Ω と記すことにする. Ω の部分集合[1]を**事象**という. 事象には標本空間 Ω と空事象 $\varnothing$(何も起こらないという事象) も含める. 事象をすべて集めた集合族を $\mathcal{A}$ と記す. $\mathcal{A}$ は以下で述べる σ **加法性** (完全加法性) をみたすことにする.

df:0-1 **定義 A.1.** Ω を空でない集合とし, $\mathcal{A}$ を Ω の部分集合族とする. $\mathcal{A}$ が次の 3 条件をみたすとき, σ **加法族**と呼ばれる.

(1) $\Omega \in \mathcal{A}$.

(2) $A \in \mathcal{A} \Longrightarrow A^c \in \mathcal{A}$.

(3) $A_n \in \mathcal{A}\,(n = 1, 2, \ldots) \Longrightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{A}$.

ただし $A^c = \{\omega \in \Omega;\ \omega \notin A\}$ である. Ω と $\mathcal{A}$ の組 $(\Omega, \mathcal{A})$ を**可測空間**と呼ぶ

re:0-3 **注意 A.2.** $\mathcal{C}$ を Ω の部分集合族とする. $\mathcal{C}$ は σ 加法性をみたしてなくともよい. このとき, 集合族 $\sigma[\mathcal{C}]$ を

$$\sigma[\mathcal{C}] := \bigcap \{\mathcal{A};\ \mathcal{A} \supset \mathcal{C},\ \mathcal{A}\ \text{は}\ \sigma\ \text{加法族}\}$$

で定める. すると $\sigma[\mathcal{C}]$ は σ 加法族となる. さらに $\mathcal{G}$ を $\mathcal{A}$ を含む σ 加法族としたとき

$$\sigma[\mathcal{C}] \subseteq \mathcal{G}$$

[1] Ω が可算集合ならば, 事象はすべての部分集合としてよいが, Ω が連続濃度のときには, すべての部分集合を対象にすることはしない.

となる．すなわち $\sigma[\mathcal{C}]$ は $\mathcal{C}$ を含む最小 (包含関係の意味) の σ 加法族となる． □

df:0-4 **定義 A.3.** $\Omega = \mathbb{R}$ とし

$$\mathcal{O} = \{O \subset \mathbb{R};\ O \text{ は } \mathbb{R} \text{ の開集合}\}$$

とする．$\sigma[\mathcal{O}]$ を $\mathbb{R}$ の **Borel 集合族**と呼び，$\mathcal{B}(\mathbb{R})$ と記す．また

$$\mathcal{C} = \{(-\infty,\, x) \subset \mathbb{R};\ x \in \mathbb{R}\}$$

とする．このとき $\mathcal{C}$ は $\mathcal{O}$ の真部分集合であるが $\sigma[\mathcal{C}] = \sigma[\mathcal{O}]$ となる[2]．

注意 A.4. Ω が高々可算集合のときは，$\mathcal{F} = 2^{\Omega}$ と取る．ただし 2^{Ω} は Ω のすべての部分集合からなる集合族で冪(べき)集合という． □

df:0-6 **定義 A.5.** $(\Omega,\, \mathcal{A})$ を可測空間とする．$\mathcal{A}$ 上の関数

$$\mathsf{Pr} : \mathcal{A} \ni A \mapsto \mathsf{Pr}(A) \in [0,\, 1]$$

が次の 2 条件をみたすとき，$(\Omega,\, \mathcal{A})$ 上の**確率測度**[3]と呼ばれる．

(1) $\mathsf{Pr}(\Omega) = 1$.

(2) 互いに排反[4]な事象列 $A_n \in \mathcal{A}\,(n = 1,\, 2,\, \ldots)$ に対して

$$\mathsf{Pr}\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathsf{Pr}(A_n) := \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} \mathsf{Pr}(A_n).$$

これらの 3 つの組 $(\Omega,\, \mathcal{A},\, \mathsf{Pr})$ を**確率空間**という．

df:0-9 **定義 A.6.** $(\Omega,\, \mathcal{A},\, \mathsf{Pr})$ を確率空間とし，$A,\, B \in \mathcal{A}$ とする．

(1) (独立性):

$$A \text{ と } B \text{ は}\textbf{独立} \iff \mathsf{Pr}(A \cap B) = \mathsf{Pr}(A)\mathsf{Pr}(B).$$

(2) (条件付き確率)] $\mathsf{Pr}(B) > 0$ のとき，B を与えたときの A の**条件付き確率**を

$$\mathsf{Pr}(A|\, B) := \frac{\mathsf{Pr}(A \cap B)}{\mathsf{Pr}(B)}$$

で定める．

[2] $\sigma[\mathcal{C}] \subset \sigma[\mathcal{O}]$ は明らかであるが，逆の包含関係も示すことができる．
[3] 簡単に Ω 上の確率測度ともいう．
[4] $m \neq n$ ならば，$A_m \cap A_n = \varnothing$ が成立していること．

re:0-10 **注意 A.7.** (1) $A, B \in \mathcal{A}$ とし, $\mathsf{Pr}(B) > 0$ とする. A と B が独立のとき

$$\mathsf{Pr}(A|\,B) = \mathsf{Pr}(A)$$

が成立する.
(2) $\mathsf{Pr}(B) > 0$ のとき

$$\mathsf{Pr}(A \cap B) = \mathsf{Pr}(B)\mathsf{Pr}(A|\,B)$$

となる. これを**乗法の公式**という.
(3) $\mathsf{Pr}(B) > 0$ のとき, 関数 $\mathsf{Pr}(\,\cdot\,|B) : \mathcal{A} \longrightarrow [0, 1]$ は定義 df:0-6 A.5(1) – (3) をみたす. すなわち $(\Omega, \mathcal{A})$ 上の確率測度である. □

A.2 確率変数

前節では, 確率と事象を記述する数学的なモデルを導入した. しかし, 現実の現象を扱い統計学の対象は, 事象には直接結びつかないかもしれない数量的な情報である. 以下で定義する確率変数は, 事象と数量の間の橋渡しをする.

df:1-14a **定義 A.8.** $(\Omega, \mathcal{A})$ と $(\mathbb{X}, \mathcal{B})$ を可測空間とする. 関数 $X : \Omega \longrightarrow \mathbb{X}$ は $(\Omega, \mathcal{A})$ から $(\mathbb{X}, \mathcal{B})$ への**可測写像**であるとは

$$X^{-1}(B) := \big\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in B\big\} \in \mathcal{A} \qquad \big(\forall B \in \mathcal{B}\big)$$

をみたすときをいう.

re:1-14b **注意 A.9.** (i). $d \geq 2\,(d \in \mathbb{N})$ とする. $\big(\mathbb{X}, \mathcal{B}\big) = \big(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)\big)$ のとき, X は**確率ベクトル**と呼べれる.
(ii). $d = 1$ のとき, X は**確率変数**と呼べれる. □

re:1-14h **注意 A.10.** X_1, X_2 は確率変数のとき, $X_1 + X_2$, X_1X_2 も確率変数であることがわかる. さらに, $X_2 \neq 0$ のとき, X_1/X_2 も確率変数であることもわかる. □

df:1-16 **定義 A.11.** (1) 確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathsf{Pr})$ 上の確率変数 X に対して

$$\mathsf{F}_X(x) := \mathsf{Pr}(X \leq x) := \mathsf{Pr}(\{\omega \in \Omega;\, X(\omega) \leq x\}) \qquad (x \in \mathbb{R})$$

を X **の累積分布関数** (cumulative distribution function(c.d.f.)) という.
また

$$\mathsf{P}_X(B) := \mathsf{Pr}(X \in B) := \mathsf{Pr}(\{\omega \in \Omega;\, X(\omega) \in B\}) \qquad (B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}))$$

を X の**分布**という．$\mathsf{P}_X((-\infty,\,x]) = \mathsf{F}_X(x)$ である．
(2) X, Y を $(\Omega,\,\mathcal{A},\,\mathsf{Pr})$ の確率変数とし，それぞれの c.d.f. を $\mathsf{F}_X,\,\mathsf{F}_Y$ とする．このとき

$$\mathsf{F}_X(x) = \mathsf{F}_Y(x) \qquad (\forall x \in \mathbb{R})$$

が成立するとき，X と Y の分布は同じであるという．これを $X \overset{d}{=} Y$ と書く．
(3) X が c.d.f. F を持つとき，$X \sim \mathsf{F}$ と書く．

re:0-18 **注意 A.12.** X を確率空間 $(\Omega,\,\mathcal{A},\,\mathsf{Pr})$ 上の確率変数とし，F を X の c.d.f. とする．このとき F は次をみたす．

(1) F は非減少関数: $x < y \Longrightarrow \mathsf{F}(x) \le \mathsf{F}(y)$.

(2) $\lim_{x\to\infty}\mathsf{F}(x) = 1$: $\lim_{x\to-\infty}\mathsf{F}(x) = 0$.

(3) F は右連続関数: $\lim_{y\to x+0}\mathsf{F}(y) = \mathsf{F}(x)$.

□

df:0-21 **定義 A.13.** X を確率空間 $(\Omega,\,\mathcal{A},\,\mathsf{Pr})$ 上の確率変数とし，その c.d.f. と分布をそれぞれ F と P と書く．
(1) X が高々可算個の集合 $\{x_1,\,x_2,\,\ldots\}$ 上にしか値を取らないとき，X を離散型であるという．この場合には

$$\mathsf{p}(x) := \mathsf{Pr}(X = x) = \mathsf{F}(x) - \mathsf{F}(x-) \qquad (x \in \{x_1,\,x_2,\,\ldots\})$$

で X の分布が特徴付けられる[5]．p を X の**確率関数** (probability mass function(p.m.f.)) と呼ぶ．
(2) $\mathsf{Pr}(X = x) = 0\,(\forall x \in \mathbb{R})$ のとき，X を連続型であるという．さらにある非負値関数 p で

$$\mathsf{F}(x) = \int_{-\infty}^{x} \mathsf{p}(t)\,dt \qquad (\forall x \in \mathbb{R})$$

をみたすものが存在するとき，p を X の**確率密度関数** (probability density function(p.d.f.)) という．特に F がほとんどいたるところ[6]で微分可能ならば，ほとんどいたるところで

$$\dot{\mathsf{F}}(x) = \frac{d\mathsf{F}}{dx}(x) = \mathsf{p}(x)$$

となる．

[5] $\mathsf{p}(x) = 0\,(x \notin \{x_1,\,x_2,\,\ldots\})$ となるので，p は $\mathbb{R}$ 上の関数であり，$0 \le \mathsf{p}(x) \le 1$ となる．

[6] この授業では，$\mathbb{R}$ から可算個の点を除いた集合上で微分可能と理解して差し支えない．

df:q-1 **定義 A.14.** c.d.f. F に対して, **分位点関数**(quantile function) $\mathsf{F}^{-}:(0,1)\longrightarrow\mathbb{R}$ を

$$\mathsf{F}^{-}(y):=\inf\{x\in\mathbb{R}:\ \mathsf{F}(x)\geq y\}$$

で定義する．また, $y\in(0,1)$ に対して, $\mathsf{F}^{-1}(y)$ を F **の** y **分位点**とよぶ. 1/2 分位点を**メディアン** (median) と呼ぶ.

re:q-9 **注意 A.15.** F を c.d.f. とする．このとき, $U\sim\mathsf{U}(0,1)$ に対して

$$X:=\mathsf{F}^{-}(U)\ \sim\ \mathsf{F}$$

となる. □

A.3 主な 1 次元分布

sec:r-1-4

A.3.1 離散型確率変数

Bernoulli 分布

$0\leq\theta\leq1$ とする．確率変数 X は**母数** θ **の** Bernoulli **分布**に従うとは, X の p.m.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,\theta)$ が

$$\mathsf{p}(x|\,\theta)=p(x)=\begin{cases}\theta^{x}(1-\theta)^{1-x} & (x=0,\,1)\\ 0 & (\text{その他の場合})\end{cases}$$

のときをいう．このことを $X\sim\mathsf{Ber}(\theta)$ と記す.

2 項分布

$n\in\mathbb{N}$, $0\leq\theta\leq1$ とする．確率変数 X は**母数** (n,θ) **の 2 項分布**に従うとは, X の p.m.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,n,\theta)$ が

$$\mathsf{p}(x|\,n,\theta)=\mathsf{p}(x)=\begin{cases}\begin{pmatrix}n\\x\end{pmatrix}\theta^{x}(1-\theta)^{n-x} & (x=0,\,1,\,\ldots,\,n)\\ 0 & (\text{その他の場合})\end{cases}$$

のときをいう．ただし

$$\begin{pmatrix}n\\x\end{pmatrix}=\frac{n!}{x!\,(n-x)!},\qquad 0!=1.$$

このことを $X\sim\mathsf{Bino}(n,\theta)$ と記す.

幾何分布

$0 < \theta < 1$ とする．確率変数 X は (X は**母数 θ の幾何分布**に従うとは, X の p.m.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,\theta)$ が

$$\mathsf{p}(x|\,\theta) = \mathsf{p}(x) = \begin{cases} \theta(1-\theta)^{x-1} & (x = 1,\, 2,\, \ldots) \\ 0 & (\text{その他の場合}) \end{cases}$$

のときをいう．このことを $X \sim \mathsf{Geom}(\theta)$ と記す.

Poisson 分布

$\theta > 0$ とする．確率変数 X は**母数 θ の Poisson 分布**に従うとは, X の p.m.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,\theta)$ が

$$\mathsf{p}(x|\,\theta) = \mathsf{p}(x) = \begin{cases} e^{-\theta}\dfrac{\theta^x}{x!} & (x = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots) \\ 0 & (\text{その他の場合}) \end{cases}$$

のときをいう．このことを $X \sim \mathsf{Poi}(\theta)$ と記す.

A.3.2 連続型確率変数

正規分布

$\mu \in \mathbb{R}$, $0 < \sigma < \infty$ とする．確率変数 X は**平均 μ, 分散 σ^2 の正規分布**に従うとは, X の p.d.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,\mu,\,\sigma^2)$ が

$$\mathsf{p}(x|\,\mu,\,\sigma^2) = \mathsf{p}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad (-\infty < x < \infty)$$

のときをいう．ただし $\exp(x) = e^x$ である．このことを $X \sim \mathsf{N}(\mu,\,\sigma^2)$ と記す．$\mu = 0$, $\sigma = 1$ のときの分布を**標準正規分布**という．

ガンマ分布

$\alpha > 0$, $\beta > 0$ とする．確率変数 X は**母数 $(\alpha,\,\beta)$ のガンマ分布**に従うとは, X の p.d.f. $\mathsf{p}(\cdot\,|\,\alpha,\,\beta)$ が

$$\mathsf{p}(x|\,\alpha,\,\beta) = \mathsf{p}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\beta^\alpha\Gamma(\alpha)}x^{\alpha-1}e^{-x/\beta} & (x > 0) \\ 0 & (\text{その他の場合}) \end{cases}$$

のときをいう. ただし

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty x^{\alpha-1}e^{-x}\,dx \qquad (\alpha > 0)$$

である. $\lambda > 0$ とする. このことを $X \sim \mathsf{Ga}(\alpha,\, \beta)$ と記す. $\mathsf{Ga}(1,\, 1/\lambda)$ を**母数 λ の指数分布**といい, $\mathsf{Exp}(\lambda)$ と書く. $p \in \mathbb{N}$ とする. $\mathsf{Ga}(p/2,\, 2)$ を**自由度 p の χ^2 分布**といい, χ^2_p と書く.

A.4 2 次元の分布

sec:r-1-5

A.4.1 同時確率関数と密度関数

df:0-28 **定義 A.16.** 確率空間 $(\Omega,\, \mathcal{A},\, \mathsf{Pr})$ 上の確率変数 X, Y は連続型とする. $\mathbb{R}^2$ 上の非負値実数値関数 p が確率ベクトル $(X,\, Y)$ の**同時確率密度関数** (同時 p.d.f.) であるとは, 次の条件をみたすときをいう.

(1) $\mathsf{p}(x,\, y) \geq 0\,(\forall(x,\, y) \in \mathbb{R}^2)$.

(2) $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{p}(x,\, y)\,dxdy = 1$.

(3) $\forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^2)$ に対して

$$\mathsf{Pr}((X,\, Y) \in A) = \int\!\!\int_A \mathsf{p}(x,\, y)\,dxdy.$$

re:1-29 **注意 A.17.** $(X,\, Y)$ の同時累積分布関数 (同時 c.d.f.) F を

$$\begin{aligned}\mathsf{F}(x,\, y) &:= \mathsf{Pr}(X \leq x,\, Y \leq y) \\ &:= \mathsf{Pr}(\{\omega \in \Omega;\, X(\omega) \leq x,\, Y(\omega) \leq y\}) \qquad (\forall(x,\, y) \in \mathbb{R}^2)\end{aligned} \tag{A.1}$$

eq:ind-1a

で定義する. $(X,\, Y)$ の同時分布 P を

$$\mathsf{P}(A) = \mathsf{Pr}\big((X,\, Y) \in A\big) \quad (\forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^2)) \tag{A.2}$$

eq:ind

で定義する. どの確率変数の c.d.f. と分布であるかを明示したいときには, $\mathsf{F}_{(X,Y)}$ または $\mathsf{P}_{(X,Y)}$ と記す. 細かなことであるが, (A.1) の F によって $(\mathbb{R}^2,\, \mathcal{B}(\mathbb{R}^2))$ 上の確率測度 P を一意的に定めていることができることが知られている. この事実の証明に関しては測度論の知識が必要となる. □

A.4.2 周辺分布

df:1-31 **定義 A.18.** (X, Y) を確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathsf{Pr})$ 上で定義された確率ベクトルとする．(1) (X, Y) が離散型で同時 p.m.f. p を持つとする．X の**周辺確率関数** (周辺 p.m.f.) を

$$\mathsf{p}_X(x) = \mathsf{Pr}(X = x) = \sum_{y \in S_Y} \mathsf{Pr}(X = y, Y = y) = \sum_{y \in S_Y} \mathsf{p}(x, y) \qquad (\forall x \in S_X)$$

で定義する．ただし

$$S_X := \{x \in \mathbb{R};\ \text{ある } y \in \mathbb{R} \text{ に対して},\ \mathsf{p}(x, y) > 0\}$$
$$S_Y := \{y \in \mathbb{R};\ \text{ある } x \in \mathbb{R} \text{ に対して},\ \mathsf{p}(x, y) > 0\}$$

である．
(2) (X, Y) は連続型とし，同時 p.d.f. p を持つとする．このとき X の**周辺確率密度関数** (周辺 p.d.f.) を

$$\mathsf{p}_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{p}(x, y)\, dy \qquad (\forall x \in \mathbb{R})$$

で定義し，Y の**周辺確率密度関数** (周辺 p.d.f.) を

$$\mathsf{p}_Y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{p}(x, y)\, dx \qquad (\forall y \in \mathbb{R})$$

で定義する．

re:0-32 **注意 A.19.** 連続型確率ベクトル (X, Y) に対して

$$\begin{aligned}\mathsf{Pr}(X \le x) &= \int\!\!\int_{(s,t) \in \mathbb{R}^2;\, s \le x} \mathsf{p}(s, t)\, dsdt = \int_{-\infty}^{x} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \mathsf{p}(s, t)\, ds \right\} dt \\ &= \int_{-\infty}^{x} \mathsf{p}_X(s)\, ds\end{aligned}$$

となるので，X の周辺 p.d.f. と X の p.d.f. は同じである． □

re:0-33 **注意 A.20.** F を確率ベクトル (X, Y) の同時 c.d.f. とし，F_X を X の周辺 c.d.f. とする．このとき $x \in \mathbb{R}$ に対して

$$\mathsf{F}_X(x) = \lim_{y \to \infty} \mathsf{F}(x, y);\ \mathsf{F}_Y(y) = \lim_{x \to \infty} \mathsf{F}(x, y)$$

が成立する． □

A.4.3 独立性な分布と条件付き分布

df:1-34 **定義 A.21.** 確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathsf{Pr})$ 上の 2 つの確率変数 X と Y は**独立**であるとは, $\forall A, B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して

$$\mathsf{Pr}(X \in A, Y \in B) = \mathsf{Pr}(X \in A)\mathsf{Pr}(Y \in B)$$

が成り立つときをいう. 独立でないとき X と Y は**従属**であるという.

re:0-35 **注意 A.22.** p を確率ベクトル (X, Y) の同時 p.d.f. とし, p_X と p_Y を X と Y それぞれの周辺 p.d.f. とする. このとき

$$X \text{ と } Y \text{ は独立} \iff \mathsf{p}(x, y) = \mathsf{p}_X(x)\mathsf{p}_Y(y) \quad (\forall x, y \in \mathbb{R})$$

が成り立つ.

df:0-39 **定義 A.23.** (1) 離散型確率ベクトル (X, Y) は同時 p.m.f. $\mathsf{p}(x, y)$ を持つとする. $\mathsf{p}_Y(y) > 0$ なる y に対して, $Y = y$ を与えたときの X の**条件付き確率関数** (条件付き p.m.f.) を

$$\mathsf{p}_{X|Y}(x|y) = \mathsf{Pr}(X = x|Y = y) = \frac{\mathsf{Pr}(X = x, Y = y)}{\mathsf{Pr}(Y = y)} = \frac{\mathsf{p}(x, y)}{\mathsf{p}_Y(y)} \quad (x \in \mathbb{R})$$

で定義する.
(2) 連続型確率ベクトル (X, Y) は同時 p.d.f. $\mathsf{p}(x, y)$ を持つとする. $\mathsf{p}_Y(y) > 0$ なる y に対して, $Y = y$ を与えたときの X の**条件付き確率密度関数** (条件付き p.d.f.) を

$$\mathsf{p}_{X|Y}(x|y) = \frac{\mathsf{p}(x, y)}{\mathsf{p}_Y(y)} \quad (x \in \mathbb{R})$$

で定義する.

re:1-41 **注意 A.24.** (1) (X, Y) が連続型確率ベクトルのとき, $\mathsf{p}_Y(y) > 0$ なる $y \in \mathbb{R}$ と $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して, 条件付き確率 $\mathsf{Pr}(X \in A|Y = y)$ を

$$\mathsf{Pr}(X \in A|Y = y) := \int_A \mathsf{p}_{X|Y}(x|y)\,dx \qquad \big(\forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})\big) \tag{A.3}$$ eq:1-41a

と形式的に定義する.
(2) (eq:1-41a A.3) が成り立つとき,

$$X|Y = y \sim \mathsf{p}_{X|Y}(x|y)$$

と書くことにする. □

sec:r-1-6

A.5 多次元分布と i.i.d. 標本

$X_1, X_2, \ldots, X_n$ を確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathsf{Pr})$ 上の確率変数とし

$$\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$$

と書く. $\boldsymbol{X}$ を確率ベクトルという.

df:0-42a **定義 A.25.** $X_1, X_2, \ldots, X_n$ が独立であるとは, すべての Borel 集合 $A_1, A_2, \ldots, A_n \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して

$$\mathsf{Pr}(X_1 \in A_1, X_2 \in A_2, \ldots, X_n \in A_n) = \prod_{j=1}^{n} \mathsf{Pr}(X_j \in A_j) \tag{A.4}$$ eq:0-1

が成立するときである.

$\boldsymbol{X}$ の同時 p.d.f. を $\mathsf{p}(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ と書き, 各 $X_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ の周辺 p.d.f. を p_{X_j} と書くことにする.

re:0-43 **注意 A.26.** (A.4) eq:0-1 を示すためには

$$\mathsf{p}(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \prod_{j=1}^{n} \mathsf{p}_{X_j}(x_j) \quad (\forall x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathbb{R})$$

を示せばよい. □

df:0-44 **定義 A.27.** $X_1, X_2, \ldots, X_n$ は独立で, 各 $X_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ は同じ c.d.f. F を持つとき, $X_1, X_2, \ldots, X_n$ は**独立同一分布に従う** (i.i.d. =identically and independently distributed) といい

$$X_1, X_2, \ldots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{F}$$

と書く[7]. $X_1, X_2, \ldots, X_n$ は累積分布関数 F から標本の大きさが n のランダム標本ともいう.

A.5.1 多変量正規分布

$$\boldsymbol{Z} := \begin{pmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_d \end{pmatrix}, \quad Z_1, Z_2, \ldots, Z_d \sim \mathsf{N}(0, 1)$$

[7] p.d.f. p を使い

$$X_1, X_2, \ldots, X_n \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathsf{p}$$

と書く. $\sim$ の右側には, 確率測度/確率分布/p.d.f./p.m.f./$\mathsf{N}(0, 1)$ など分布を特定するものを書いてよいことにする.

とする[8]. $\boldsymbol{Z}$ の同時 p.d.f. は

$$\begin{aligned}\mathsf{p}_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{z}) = \mathsf{p}_{\boldsymbol{Z}}(z_1,\, z_2,\, \ldots,\, z_d) &= \prod_{j=1}^{d} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2} z_j^2\right\} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d} z_j^2\right\} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\boldsymbol{z}^\top \boldsymbol{z}\right\} \quad (\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^d)\end{aligned}$$

ただし $\boldsymbol{z} = (z_1,\, z_2,\, \ldots,\, z_d)^\top$ である. これを $\boldsymbol{Z} \sim \mathsf{N}_d(\mathbf{0},\, \mathbf{I}_d)$ と記す. ただし $\mathbf{I}_d$ は d 次単位行列である. さらに定義より

$$\int \cdots \int \mathsf{p}_{\boldsymbol{Z}}(z_1,\, z_2,\, \ldots,\, z_d)\, dz_1 dz_2 \cdots dz_d = 1$$

となっていることもわかる.

次に

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d1} & \sigma_{d2} & \cdots & \sigma_{dd} \end{pmatrix}, \qquad \begin{array}{l} \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \\ (i,\, j = 1,\, 2, \ldots,\, d) \end{array}$$

とする. ただし $\boldsymbol{\Sigma}$ は正定値対称行列とする. このとき, ある $d \times d$ の正則行列 $\mathbf{A}$ が存在して

(1) $\mathbf{A}$ は対称行列　　かつ　　(2) $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{A}^2$

と取れる. これを $\boldsymbol{\Sigma}$ の平方根といい, $\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}$ と書くことにする. これを用いて

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{Z}$$

と定めたとき, $\boldsymbol{X}$ の分布を $\mathsf{N}_d(\boldsymbol{\mu},\, \boldsymbol{\Sigma})$ と記す. このとき $\boldsymbol{X}$ の同時 p.d.f. は

$$\mathsf{p}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}|\, \boldsymbol{\mu},\, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}\mathrm{Det}\,(\boldsymbol{\Sigma})^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right\} \quad (\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d) \tag{A.5}$$

eq:0-2

で与えられる. この分布を**平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$, 分散共分散行列 Σ の d 変量正規分布**という.

re:0-46 **注意 A.28.** (A.5) の導出は以下のように行うことができる. 一般に $\boldsymbol{Z} = (Z_1,\, Z_2,\, \ldots,\, Z_d)^\top$ を d 次元確率ベクトルとし, その同時 p.d.f. を $p_{\boldsymbol{Z}}$ と書くことにする. さらに　$\mathbb{X} := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d;\, \mathsf{p}_{\boldsymbol{Z}}(\boldsymbol{x}) > 0)\}$, 関数

$$\boldsymbol{h}(\,\cdot\,) = (h_1(\,\cdot\,),\, h_2(\,\cdot\,),\, \ldots,\, h_d(\,\cdot\,))^\top : \mathbb{X} \longrightarrow \boldsymbol{h}(\mathbb{X})$$

[8] この節ではベクトルは縦とする. 下の式では縦ベクトルと横ベクトルを混ぜて表現している. これは記号の乱用であるが, $\mathsf{p}((z_1,\, z_2,\, \ldots,\, z_d)^\top)$ などと書くのは煩わしい.

は 1 対 1 とし

$$X_j = h_j(Z_1, Z_2, \ldots, Z_d) \quad (j = 1, 2, \ldots, d), \boldsymbol{X} \ = (X_1, X_2, \ldots, X_d)^\top$$

とおく. $\boldsymbol{h}$ は 1 対 1 なので, $\boldsymbol{h}$ の逆写像を

$$\boldsymbol{h}^{-1} = (h_1^{-1}, h_2^{-1}, \ldots, h_d^{-1})^\top : \boldsymbol{h}(\mathbb{X}) \longrightarrow \mathbb{X}$$

が存在して, $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{h}^{-1}(\boldsymbol{X})$ となる. $\boldsymbol{X}$ の同時 p.d.f. を求めるために, $\boldsymbol{h}^{-1}(\boldsymbol{x})$ の Jacobian $\mathbf{J}_{\boldsymbol{h}^{-1}}(\boldsymbol{x})$ を

$$\mathbf{J}_{\boldsymbol{h}^{-1}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{Det} \begin{pmatrix} \frac{\partial h_1^{-1}(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial h_1^{-1}(\boldsymbol{x})}{\partial x_d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{h_d^{-1}(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial h_d^{-1}(\boldsymbol{x})}{\partial x_d} \end{pmatrix}$$

で定める. このとき

$$\mathsf{p}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) = \left|\mathbf{J}_{\boldsymbol{h}^{-1}}(\boldsymbol{x})\right| \mathsf{p}_{\boldsymbol{Z}}(h^{-1}(\boldsymbol{x})) \tag{A.6}$$ eq:0-3

となるが知られている.

$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{z}) = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{z} \Longleftrightarrow \boldsymbol{h}^{-1}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})$ より

$$\mathbf{J}_{\boldsymbol{h}^{-1}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{Det}\,(\boldsymbol{\Sigma})^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Det}\,(\boldsymbol{\Sigma})}}$$

を (A.6) に代入すれば, (A.5) はわかる. 以上の議論から

$$\int\int \cdots \int \mathsf{p}_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})\, dx_1 dx_2 \cdots dx_d = 1$$

となっていることもわかる. □

A.6 確率変数の期待値

df:0-2-1 **定義 A.29.** $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ を可測[9]とする. $g(X)$ の期待値 $\mathsf{E}[g(X)]$ を次のように定義する.

(1) $g \geq 0$ のとき

$$\mathsf{E}[g(X)] = \begin{cases} \displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} g(x_n)\mathsf{p}(x_n) & (\text{離散型の場合}) \\ \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} g(x)\mathsf{p}(x)\, dx & (\text{連続型の場合}) \end{cases}$$

と定義する. 右辺は ∞ を許せば, 必ず存在する.

[9] g が可測関数であるとは, $\forall B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して, $f^{-1}(B) = \{x \in \mathbb{R}; f(x) \in B\} \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ をみたすときをいう.

(2) 一般の g に対して

$$g^+(x) = \max\{g(x), 0\}, \quad g^-(x) = \max\{-g(x), 0\}$$

と定義すれば, $g^+ \geq 0$, $g^- \geq 0$ となる．$\mathsf{E}[g^+(X)]$ または $\mathsf{E}[g^-(X)]$ のいずれかが有限ならば,

$$\mathsf{E}[g(X)] := \mathsf{E}[g^+(X)] - \mathsf{E}[g^-(X)]$$

と定義する．$\mathsf{E}[g^+(X)] = \mathsf{E}[g^-(X)] = \infty$ のときは, $g(X)$ の期待値は定義されない．$\mathsf{E}[g^+(X)] < \infty$ かつ $\mathsf{E}[g^-(X)] < \infty$ のとき, $\mathsf{E}[g(X)]$ は有限となる.

re:0-2-2 **注意 A.30.** X を確率変数とする．可測関数 $g, h : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ に対して, $\mathsf{E}[|g(X)|] < \infty$, $\mathsf{E}[|h(X)|] < \infty$ を仮定する.

(1) $a, b \in \mathbb{R}$ に対して

$$\mathsf{E}[ag(X) + bh(X)] = a\,\mathsf{E}[g(X)] + b\,\mathsf{E}[h(X)]$$

が成り立つ.

(2) $g(x) \leq h(x)\,(\forall x \in \mathbb{R})$ ならば

$$\mathsf{E}[g(X)] \leq \mathsf{E}[h(X)]$$

が成り立つ.

□

df:0-2-4 **定義 A.31.** (1) $k = 1, 2, \ldots$ に対して, $\mathsf{E}[|X|^k] < \infty$ のとき, $\mathsf{E}[X^k]$ を X の k **次モーメント** (または**積率**) という.

(2) $\mathsf{E}[|X|] < \infty$ のとき $\mathsf{E}[X]$ を X **の平均値**[10]という.

(3) $\mathsf{E}[X^2] < \infty$ のとき X **の分散**を

$$\mathsf{Var}[X] := \mathsf{E}[\{X - \mathsf{E}[X]\}^2]$$

で定義する.

(4) $A \subset \mathbb{R}$ に対して

$$\mathbb{1}_A(x) = \begin{cases} 1 & (x \in A) \\ 0 & (x \notin A) \end{cases}$$

を A の**指示関数**[11]という．すると $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ のとき

$$\mathsf{E}[\mathbb{1}_A(X)] = \mathsf{Pr}(X \in A)$$

となる.

[10]簡単に「平均」ともいう.
[11]指示関数は $\mathbb{R}$ の任意の部分集合に定義できる.

sec:0-2-2

A.7 確率ベクトルの期待値

X, Y を確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathsf{Pr})$ 上で定義された確率変数とする．(X, Y) を確率ベクトルという．

(X, Y) が離散型のときその同時 p.m.f. を $\mathsf{p}(x, y)$ とし, 連続型のときその同時 p.d.f. を $\mathsf{p}(x, y)$ とする．

df:0-2-6

定義 A.32. 可測関数 $g : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ に対して $g(X, Y)$ の期待値を次のように定義する．

(1) $g \geq 0$ のとき

$$\mathsf{E}[g(X, Y)] = \begin{cases} \displaystyle\sum_{x,y} g(x, y)\mathsf{p}(x, y) & (\text{離散型}) \\ \displaystyle\iint_{\mathbb{R}^2} g(x, y)\mathsf{p}(x, y)\, dxdy & (\text{連続型}). \end{cases}$$

(2) 一般の g に対して

$$g^+(x, y) := \max\{g(x, y), 0\}, \quad g^-(x, y) := \max\{-g(x, y), 0\}$$

と定義すれば $g^+, g^- \geq 0$ となる．$\mathsf{E}[g^+(X, Y)]$ または $\mathsf{E}[g^-(X, Y)]$ のいずれかが有限ならば

$$\mathsf{E}[g(X, Y)] := \mathsf{E}[g^+(X, Y)] - \mathsf{E}[g^-(X, Y)]$$

で定義する．$\mathsf{E}[g^+(X, Y)] = \mathsf{E}[g^-(X, Y)] = \infty$ のときは, $g(X, Y)$ の期待値は定義されない．$\mathsf{E}[g^+(X, Y)] < \infty$ かつ $\mathsf{E}[g^-(X, Y)] < \infty$ のとき, $\mathsf{E}[g(X, Y)]$ は有限の値を取る．

re:0-2-7

注意 A.33. 3 つ以上の確率変数 $X_1, X_2, \ldots, X_n$ に対しても期待値を定義 df:0-6 A.5 と同様に定義する． □

re:0-2-8

注意 A.34. $X_1, X_2, \ldots, X_n$ を確率変数とし, 各 $X_j\ (j = 1, 2, \ldots, n)$ の期待値は有限とする．$a_1, a_2, \ldots, a_n$ を定数としたとき

$$\mathsf{E}\left[\sum_{j=1}^{n} a_j X_j\right] = \sum_{j=1}^{n} a_j \mathsf{E}[X_j]$$

が成り立つ． □

sec:0-2-3

A.8 分散と共分散

df:0-2-10

定義 A.35. X を確率変数とし, $\mathsf{E}[X^2] < \infty$ とする．X **の分散**を

$$\mathsf{Var}[X] := \mathsf{E}[(X - \mu)^2]$$

で定義する．ただし $\mu = \mathsf{E}[X]$ と書いた．さらに $\sqrt{\mathsf{Var}[X]}$ を X **の標準偏差**という．

re:0-2-11 **注意 A.36.** 分散 $\mathsf{Var}[X]$ は X の分布の平均 μ まわりの散らばりを測る量である．分散がおおきいほど分布は広がっていることになる． □

re:0-2-12 **注意 A.37.** 以下の確率変数は有限の 2 次の積率を持つとする．このとき, 次が成立する．

(1) $\mathsf{Var}[X] = \mathsf{E}[X^2] - \{\mathsf{E}[X]\}^2$ が成り立つ．

(2) 定数 $a, b \in \mathbb{R}\,(a \neq 0)$ に対して

$$\mathsf{Var}[aX+b] = a^2\mathsf{Var}[X]$$

が成り立つ．

(3) X と Y は独立で $\mathsf{E}[|XY|] < \infty$ とする．このとき

$$\mathsf{E}[XY] = \mathsf{E}[X]\mathsf{E}[Y]$$

が成り立つ．

(4) $X_1, X_2, \ldots, X_n$ は独立とし, $\mathsf{E}[X_j^2] < \infty\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ とする．$a_1, a_2, \ldots, a_n$ は定数としたとき

$$\mathsf{Var}[a_1X_1+a_2X_2+\cdots+a_nX_n] = a_1^2\mathsf{Var}[X_1]+a_2^2\mathsf{Var}[X_2]+\cdots+a_n^2\mathsf{Var}[X_n]$$

が成り立つ．

□

re:0-2-14 **注意 A.38.** $n \geq 2$ とし, $X_1, X_2, \ldots, X_n$ は i.i.d. 確率変数列とし

$$\mathsf{E}[X_1] = \mu, \quad \mathsf{Var}[X_1] = \sigma^2, \quad 0 < \sigma < \infty$$

とする．$X_1, X_2, \ldots, X_n$ に基づく**標本平均**を

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j$$

で定義し, **標本** (不偏) **分散**を

$$S_n^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}\left(X_j - \overline{X}_n\right)^2$$

で定義する．このとき

$$(1)\mathsf{E}\left[\overline{X}_n\right] = \mu, \quad (2)\mathsf{Var}\left[\overline{X}_n\right] = \frac{\sigma^2}{n}, \quad (3)\mathsf{E}\left[S_n^2\right] = \sigma^2$$

が成り立つ． □

df:0-2-15 **定義 A.39.** X と Y は確率変数とし

$$\mathsf{E}[X] = \mu_X, \quad \mathsf{Var}[X] = \sigma_X^2, \quad \mathsf{E}[Y] = \mu_Y, \quad \mathsf{Var}[Y] = \sigma_Y^2$$

とする．ただし $\mu_X,\, \mu_Y \in \mathbb{R},\, 0 < \sigma_X,\, \sigma_Y < \infty$ とする．このとき X **と** Y **の共分散**を

$$\mathsf{Cov}[X,\, Y] = \mathsf{E}\big[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)\big]$$

で定義し，X **と** Y **の** (Pearson) **の相関係数**を

$$\rho := \rho[X,\, Y] := \frac{\mathsf{Cov}[X,\, Y]}{\sigma_X\, \sigma_Y}$$

で定義する．

df:0-2-18a **定義 A.40.** $X_1,\, X_2,\, \ldots,\, X_d$ を有限な 2 次の積率を持つ確率変数とし

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_d \end{pmatrix}$$

と書く．このとき確率ベクトル $\boldsymbol{X}$ の期待値を

$$\mathsf{E}[\boldsymbol{X}] := \begin{pmatrix} \mathsf{E}[X_1] \\ \mathsf{E}[X_2] \\ \vdots \\ \mathsf{E}[X_d] \end{pmatrix}$$

で定義する．$\boldsymbol{X}$ の共分散を

$$\mathsf{Var}[\boldsymbol{X}] := \mathsf{E}\big[(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu})^\top\big]$$

で定義する[12]．ただし $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1,\, \mu_2,\, \ldots,\, \mu_d)^\top := \mathsf{E}[\boldsymbol{X}]$ である．これは

$$\mathsf{Var}[\boldsymbol{X}] = \begin{pmatrix} \mathsf{Var}[X_1] & \mathsf{Cov}[X_1,\, X_2] & \cdots & \mathsf{Cov}[X_1,\, X_d] \\ \mathsf{Cov}[X_2,\, X_1] & \mathsf{Var}[X_2] & \cdots & \mathsf{Cov}[X_2,\, X_d] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathsf{Cov}[X_d,\, X_1] & \mathsf{Cov}[X_d,\, X_2] & \cdots & \mathsf{Var}[X_d] \end{pmatrix}$$

である．

[12]確率ベクトルと同様に確率変数を成分とする行列を確率行列という．確率行列の期待値はそれぞれの成分の期待値を取ったものを配置した行列と定義している．

re:0-2-19 **注意 A.41.** $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_d)^\top$ は確率ベクトルで各成分は有限な 2 次の積率を持つとし

$$\mathsf{E}[\boldsymbol{X}] = \boldsymbol{\mu}, \quad \mathsf{Var}[\boldsymbol{X}] = \boldsymbol{\Sigma}$$

とする．ただし $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$, $\boldsymbol{\Sigma}$ は $d \times d$ の半正定値行列[13]である．
(1) 任意の定数ベクトル $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^d$ に対して

$$\mathsf{E}[\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{X}] = \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{\mu}, \quad \mathsf{Var}[\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{X}] = \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{a}$$

が成り立つ．
(2) $\in \mathbb{N}$ とする．任意の定数の $k \times d$ 次正方行列 $\mathbf{A}$ に対して

$$\mathsf{E}[\mathbf{A}\boldsymbol{X}] = \boldsymbol{A}\mathsf{E}]\boldsymbol{X}], \quad \mathsf{Var}[\mathbf{A}\boldsymbol{X}] = \mathbf{A}\mathsf{Var}[\boldsymbol{X}]\mathbf{A}^\top$$

が成り立つ． □

A.9 条件付き期待値

sec:0-2-4

df:0-2-22 **定義 A.42.** (1) X と Y を確率変数とし, 条件付き p.d.f.(条件付き p.m.f.) を $\mathsf{p}_{X|Y}(p_{X|Y})$ とする．$Y = y$ を与えたときの X の条件付き期待値を

$$\mathsf{E}[X|\,Y = y] = \begin{cases} \displaystyle\sum_x x\mathsf{p}_{X|Y}(x|\,y) & (\text{離散型の場合}) \\ \displaystyle\int x\mathsf{p}_{X|Y}(x|\,y)\,dx & (\text{連続型の場合}) \end{cases}$$

で定義する．ただし考えている $Y = y$ で条件付き p.d.f. または p.m.f. は定義され $\mathsf{E}[|X|] < \infty$ とする．
(2) (Borel 可測) 関数 $g : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ に対して, $g(X, Y)$ の条件付き期待値を

$$\mathsf{E}[g(X, Y)|\,Y = y] = \begin{cases} \displaystyle\sum_x g(x, y)\mathsf{p}_{X|Y}(x|\,y) & (\text{離団型の場合}) \\ \displaystyle\int g(x, y)\mathsf{p}_{X|Y}(x|\,y)\,dx & (\text{連続型の場合}) \end{cases}$$

で定義する．ただし, $\mathsf{E}[|g(X, Y)|] < \infty$ のとき, 考えている $Y = y$ での条件付き p.d.f. または p.m.f. は定義されるとする．

[13] $d \times d$ の対称行列 $\mathbf{A}$ が半正定値であるとは, $\forall \boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^d$ に対して $\boldsymbol{a}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{a} \geq 0$ が成立するときをいう．また $d \times d$ の対称行列 $\mathbf{A}$ が正定値であるとは, $\forall \boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^d$ $(\boldsymbol{a} \neq \mathbf{0})$ に対して $\boldsymbol{a}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{a} > 0$ が成立するときをいう．

re:0-2-24 **注意 A.43.** (1) $\mathsf{E}[X]$ は定数であるが, $\mathsf{E}[X|\,Y=y]$ は一般に y の関数である.

$$h(y) := \mathsf{E}[X|\,Y=y]$$

とおいたときに $h(y)$ に Y を代入したものは確率変数になる. これを

$$\mathsf{E}[X|\,Y] := h(Y)$$

と定義する. したがって $\omega \in \Omega$ に対して, $y = Y(\omega)$ と書けば

$$\mathsf{E}[X|\,Y] : \Omega \ni \omega \mapsto \mathsf{E}[X|\,Y(\omega)] = \mathsf{E}[X|\,Y=y] \in \mathbb{R}$$

は可測となる.
(2) 任意の $B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して, 条件付き確率 $\mathsf{Pr}(X \in B|\,Y)$ を

$$\mathsf{Pr}(X \in B|\,Y) = \mathsf{E}[\mathbb{1}_B(X)|\,Y]$$

で定める. □

re:0-2-26 **注意 A.44.** (1) 有限な期待値を持つ確率変数 X, Y と確率変数 Z に対して

$$\mathsf{E}[X+Y|\,Z] = \mathsf{E}[X|\,Z] + \mathsf{E}[Y|\,Z]$$

が成り立つ.
(2) 有限な期待値を持つ確率変数 X, Y に対して

$$\mathsf{E}[\mathsf{E}[Y|\,X]] = \mathsf{E}[Y], \quad \mathsf{E}[\mathsf{E}[X|\,Y]] = \mathsf{E}[X]$$

が成り立つ.
(3) 一般の (Borel 可測) 関数 $g : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ を考える. $\mathsf{E}[|g(X,Y)|] < \infty$ のとき

$$\mathsf{E}[\mathsf{E}[g(X,Y)|\,Y]] = \mathsf{E}[g(X,Y)]$$

が成り立つ.
(4) $\mathsf{E}[XY|\,Y] = Y\mathsf{E}[X|\,Y]$ が成り立つ. □

注意 A.45. 条件付き p.d.f. から出発して, 条件付き期待値を定義した. 逆に, 条件付き期待値の定義から出発して, 条件付き p.d.f. を導入する流儀[14]もある. $\mathsf{E}\big[|g(X,Y)|\big] < \infty$ なる関数 $g : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ に対して, 条件付き期待値 $\mathsf{E}\big[g(X,Y)|\,Y\big]$ を以下のように定義してもよい. $h : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$

[14] 測度論的確率論の流儀である. 実は, こちらの定式化のが, 直観的に理解するのは難しいが, 数学的には一貫した定義になる.

を任意の区分的に有界連続な関数とする．このとき，ある $\widetilde{g} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ があって

$$\mathbb{E}\big[h(Y)\widetilde{g}(Y)\big] = \mathbb{E}\big[h(Y)g(X, Y)\big]$$

が成り立つとき，条件付き期待値 $\mathsf{E}\big[g(X, Y)|\,Y\big]$ を $\widetilde{g}(Y) = \mathsf{E}[g(X, Y)|\,Y]$ で定めるとしてもよい． □

df:0-2-28 **定義 A.46.** X は有限の 2 次の積率を持つとする．$Y = y$ を与えたときの X の条件付き p.d.f. $\mathsf{p}_{X|Y}$(p.m.f. $\mathsf{p}_{X|Y}$) が定義できる y を考える．このとき，$Y = y$ を与えたときの条件付き分散を

$$\mathsf{Var}[X|\,Y = y] = \begin{cases} \displaystyle\sum_x \{x - \mu(y)\}^2 \mathsf{p}_{X|Y}(x|\,y) & (\text{離散型の場合}) \\ \displaystyle\int \{x - \mu(y)\}^2 \mathsf{p}_{X|Y}(x|\,y)dx & (\text{連続型の場合}) \end{cases}$$

で定義する．ただし $\mu(y) = \mathsf{E}[X|\,Y = y]$ である．これは

$$\mathsf{Var}[X|\,Y] = \mathsf{E}[X^2|\,Y] - \{\mathsf{E}[X|\,Y]\}^2$$

とも書ける．

re:0-2-29 **注意 A.47.** X, Y を確率変数とし $\mathsf{E}[X^2] < \infty$ とする．このとき

$$\mathsf{Var}[X] = \mathsf{E}[\mathsf{Var}[X|\,Y]] + \mathsf{Var}[\mathsf{E}[X|\,Y]]$$

が成立する．ただし $h(y) = \mathsf{Var}[X|\,Y = y]$ としたとき $\mathsf{Var}[X|\,Y] := h(Y)$ と定義した． □

A.10　積率母関数

sec:0-2-5

df:0-2-30 **定義 A.48.** X を確率変数とし，ある $t_0 > 0$ が存在して，$\mathsf{E}[e^{tX}] < \infty\ (\forall|t| < t_0)$ とする．このとき，X **の積率母関数** (Moment Generating Function (MGF)) を

$$\mathsf{m}_X(t) := \mathsf{E}[e^{tX}] \quad (-t_0 < t < t_0)$$

と定義する．

re:0-2-33 **注意 A.49.** (1) a, $b \in \mathbb{R}\,(a \neq 0)$ とする．$Y = aX + b$ としたとき

$$\mathsf{m}_Y(t) = e^{tb}\mathsf{m}_X(at)$$

が成り立つ．

(2) $X_1, X_2, \ldots, X_d$ は独立とし $Y = \sum_{j=1}^d Y_j$ とする．このとき

$$\mathsf{m}_Y(t) = \prod_{j=1}^d \mathsf{m}_{X_j}(t)$$

が成り立つ． □

re:0-2-34 **注意 A.50.** X と Y を確率変数とする．ある数 $t_0 > 0$ が存在して

$$\mathsf{m}_X(t) = \mathsf{m}_Y(t) \quad (|t| < t_0)$$

ならば

$$X \overset{d}{=} Y$$

となる． ただし X と Y の c.d.f. を F_X と F_Y としたとき

$$X \overset{d}{=} Y \iff \mathsf{F}_X(x) = \mathsf{F}_Y(x) \qquad (\forall x \in \mathbb{R})$$

である． □

A.11 確率に対する不等式

re:0-3-1 **注意 A.51.** (Markov の不等式) 確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \mathsf{Pr})$ 上の X を非負値確率変数とし, $\mathsf{E}[X] < \infty$ とする．このとき, $\forall t > 0$ に対して

$$\mathsf{Pr}\big(X \geq t\big) \leq \frac{\mathsf{E}[X]}{t}$$

が成り立つ．

re:0-3-3 **注意 A.52.** (Chebyshev の不等式) X を確率変数とし $\mu = \mathsf{E}[X]$, $\sigma^2 = \mathsf{Var}[X] < \infty\,(0 < \sigma < \infty)$ とする．このとき $\forall t > 0$ に対して

$$\mathsf{Pr}\big(|X - \mu| \geq t\big) \leq \frac{\sigma^2}{t^2}$$

が成り立つ． □

A.12 期待値に対する不等式

re:0-3-9 **注意 A.53.** (Cauchy-Schwarz の不等式) 確率変数 X と Y は 2 次の有限な期待値を持つとき

$$\mathsf{E}\big[|XY|\big] \leq \sqrt{\mathsf{E}[X^2]\,\mathsf{E}[Y^2]}$$

が成り立つ． □

df:0-3-10

定義 A.54. 関数 $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ が凸であるとは各 $x, y \in \mathbb{R}$ と $0 \le \forall t \le 1$ に対して

$$g(tx + (1-t)y) \le tg(x) + (1-t)g(y)$$

が成立するときをいう．さらに $-g$ が凸のとき g は concave であるという．

re:0-3-11

注意 A.55. (Jensen の不等式) X を有限な期待値を持つ確率変数とする．
(1) 関数 $g : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸で $g(X)$ の期待値は有限のとき

$$\mathsf{E}[g(X)] \ge g(\mathsf{E}[X])$$

が成り立つ．
(2) g が concave のとき

$$\mathsf{E}[g(X)] \le g(\mathsf{E}[X])$$

が成り立つ． □

A.12.1 測度論的な積分の定義

ubsec:int-df

定義 A.56. $\big(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R})\big)$ 上の測度とは, $\mu : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \longrightarrow [0, \infty) \cup \{+\infty\}$ を以下の条件 (i), (ii) をみたすものである．
(i) $\mu(\varnothing) = 0$.
(ii) $A_j \in \mathcal{B}(\mathbb{R})\,(j = 1, 2, \ldots)$ は互いに排反で

$$B := \bigcup_{j=1}^{\infty} A_j \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$

とする．このとき

$$\mu(B) = \sum_{j=1}^{\infty} \mu(A_j)$$

をみたす．

注意 A.57. 任意の $a < b\,(a, b \in \mathbb{R}))$ に対して, 測度 m で

$$\mathsf{m}\big((a, b]\big) = b - a$$

をみたすものを $\mathbb{R}$ 上の Lebeague **測度**という．さらに, $d \ge 2\,(d \in \mathbb{N}$ としたとき, $\mathbb{R}^d$ 上の Lebeague 測度 m_d も同じように定義できることが知られている．

df:int-1 **定義 A.58.** $(\mathbb{X}, \mathcal{A})$, $(\mathbb{Y}, \mathcal{B})$ を可測空間とし, $f : \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{Y}$ を関数とする. 任意の $B \in \mathcal{B}$ に対して

$$f^{-1}(B) := \{x \in \mathbb{X};\, f(x) \in B\} \in \mathcal{A}$$

のとき, f は $\mathcal{A}\diagdown\mathcal{B}$ **可測**であるといわれる. さらに, $\mathcal{A}\diagdown\mathcal{B}$ 可測関数全体の集合を $\mathcal{M}\big((\mathbb{X}, \mathcal{A}), (\mathbb{Y}, \mathcal{B})\big)$ と記す. 誤解のない場合には, 簡単に $\mathcal{M}(\mathbb{X}, \mathbb{Y})$ とも書く. 特に, $\mathcal{M}\big((\mathbb{X}, \mathcal{A}), (\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R})\big)$ の元を Borel 可測関数という.

re:int-2 **注意 A.59.** 以下の事実が知られている.
(i) 連続関数は Borel 可測関数である.
(ii) f, g が Borel 可測関数のとき, 和 $f+g$, 積 fg は Borel 可測である. ただし, $f(x)+g(x) = \infty+(-\infty)$ または $(-\infty)+\infty$, $f(x)g(x) = 0\cdot(\pm\infty)$ または $f(x)g(x) = (\pm\infty)\cdot 0$ の場合を除く.
(iii) $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ が Borel 可測関数列のとき

$$\sup_{n\in\mathbb{N}} f_n, \quad \inf_{n\in\mathbb{N}} f_n, \quad \limsup_{n\to\infty} f_n, \quad \liminf_{n\to\infty} f_n$$

も Borel 可測である. さらに $\lim_{n\to\infty} f_n$ が存在[15]すれば, $\lim_{n\to\infty} f_n$ も Borel 可測である. □

$E \in \mathcal{A}$ と $f \in \mathcal{M}\big(\mathbb{X}, \mathbb{R}\cup\{\pm\infty\}\big)$ に対して, 積分 $\displaystyle\int_E f\,d\mu$ を以下のステップ ① ～ ③ で定める.
① f は単関数とする. すなわち, $n \in \mathbb{N}$ とし, 互いに排反な $\{A_i\}_{i=1}^{n} \subset \mathcal{A}$ で $\mu(A_i) < \infty\,(i = 1, 2, \ldots, n)$ と実数 $a_i \in \mathbb{R}\,(i = 1, 2, \ldots, n)$ があって

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i \mathbb{1}_{A_i}(x)$$

と書ける. このとき, 積分 $\displaystyle\int_E f\,d\mu$ を

$$\int_E f\,d\mu = \sum_{i=1}^{n} a_i \mu(A_i)$$

で定める.

[15] $\lim_{n\to\infty} f_n$ が存在するとは

$$\mu\big(x \in \mathbb{X};\, \liminf_{n\to\infty} f_n(x) < \limsup_{n\to\infty} f_n(x)\big) = 0$$

のときをいう.

② 可測関数 $f : \mathbb{X} \longrightarrow [0, \infty) \cup \{\infty\}$ の E 上積分を定める. そのために, $n \in \mathbb{N}$, $i = 1, 2, \dots, n2^n$ に対し, $A_i^{(n)} \in \mathcal{A}$ を

$$
\begin{aligned}
A_i^{(n)} &= \left\{x \in E;\ \frac{i-1}{2^n} \le f(x) < \frac{i}{2^n}\right\} (i = 1, 2, \dots, n2^n - 1), \\
A_{n2^n}^{(n)} &= \{x \in E;\ f(x) \ge n\}
\end{aligned}
$$

で定める. 積分 $\displaystyle\int_E f\,d\mu$ を

$$
\int_E f\,d\mu = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n2^n} \frac{i-1}{2^n} \mu\bigl(A_i^{(n)}\bigr)
$$

で定める.

③ 最後に, $f \in \mathcal{M}\bigl(\mathbb{X}, \mathbb{R} \cup \{\pm\}\bigr)$ の積分 $\displaystyle\int_E f\,d\mu$ を定める. そのために

$$
f^+ = \max\{0, f\}, \quad f^- = \max\{0, -f\}
$$

と書く. $\displaystyle\int_E f^+\,d\mu < \infty$ または $\displaystyle\int_E f^-\,d\mu < \infty$ のいずれかが成り立つとき, f の E 上の積分は確定するといい, 積分 $\displaystyle\int_E f\,d\mu$ を

$$
\int_E f\,d\mu = \int_E f^+\,d\mu - \int_E f^-\,d\mu
$$

で定める. 特に, $\displaystyle\int_E |f|\,d\mu < \infty$ のとき, f は E 上で可積分という.

re:int-3 **注意 A.60.** $f, g \in \mathcal{M}\bigl(\mathbb{X}, \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}\bigr)$ と $E \in \mathcal{A}$ に対して, ① ～ ③ の手続きで積分を定義すると以下のような性質が成り立つ.

(i) $E \in \mathcal{A}$ とする. $\mu(E) = 0$ のとき, f は E 上可積分で $\displaystyle\int_E f\,d\mu = 0$ となる.

(ii) $E \in \mathcal{A}$ とし, f は A 上積分確定とする. このとき, $f\mathbb{1}_E$ は $\mathbb{X}$ 積分確定で $\displaystyle\int_E f\,d\mu = \int_{\mathbb{X}} f\mathbb{1}_E\,d\mu$ となる.

(iii) f はともに E 上積分確定とし, $a \in \mathbb{R}$ とする. このとき

$$
\int_E af\,d\mu = a\int_E f\,d\mu
$$

となる.

(iv) f は E 上積分確定とする. このとき

$$
\left|\int_E f\,d\mu\right| \le \int_E |f|\,d\mu
$$

となる．

(v) f, g は E 上で積分確定で，A 上で　$f \leq g\,(\mu - \text{a.e.})$ とする．すなわち，$\mu\big(\{x \in E;\ f(x) > g(x)\}\big) = 0$ である．このとき

$$\int_E f\,d\mu \leq \int_E g\,d\mu$$

となる．

(vi) $\displaystyle\int_A f^+\,d\mu + \int_A g^+\,d\mu < \infty$ または $\displaystyle\int_A f^-\,d\mu + \int_A g^-\,d\mu < \infty$ とする．このとき，$f+g$ も A 上積分確定で

$$\int_A (f+g)\,d\mu = \int_A f\,d\mu + \int_A g\,d\mu \tag{A.7}$$ eq:int-1

となる．さらに，f, g が A 上可積分のとき，$f+g$ も A 上可積分で (A.7) eq:int-1 が成立する． □

第B章　補遺: 特異値分解の補足説明

chap:sig
def-e1
定義 B.1. $n, p \in \mathbb{N}, n \geq p$ とし, $V \subset \mathbb{R}^n$ をベクトル空間とする. $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p \in V$ とする.
(1) $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p$ はベクトル空間 V の基底であるとは, 任意の $\boldsymbol{v} \in V$ に対して, 唯一の $a_1, a_2, \ldots, a_p \in \mathbb{R}$ があって

$$\boldsymbol{v} = a_1\boldsymbol{v}_1 + a_2\boldsymbol{v}_2 + \cdots + a_p\boldsymbol{v}_p$$

とかけるときをいう. この p をベクトル空間 V の**次元**といい, $\dim(V)$ と書く.
(2) $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p$ は**線型独立** (1 次独立) であるとは,

$$a_1\boldsymbol{v}_1+a_2\boldsymbol{v}_2+\cdots+a_p\boldsymbol{v}_p = \mathbf{0}\,(a_1, a_2, \ldots, a_p \in \mathbb{R}) \Longrightarrow a_1 = a_2 = \cdots = a_p = 0$$

が成り立つときをいう. ただし, $\mathbf{0}_n = (0, 0, \ldots, 0)^\top \in \mathbb{R}^n$ である.

def:e-0
定義 B.2. (1) $n, p \in \mathbb{N}, n \geq p$ とする. ベクトル $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^n$ で張られた $\mathbb{R}^n$ の部分空間 $\mathrm{span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p\}$ を

$$\mathrm{span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p\} = \big\{a_1\boldsymbol{x}_1 + a_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + a_p\boldsymbol{x}_p;\, a_1, a_2, \ldots, a_p \in \mathbb{R}\big\}$$

と定義する.
(2) $m, n \in \mathbb{N}$ とし, $\mathbf{A} \in \mathsf{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ とする. $\mathbf{A}$ と $\mathbf{A}^\top$ の像と核をそれぞれ

$$\begin{aligned}
\mathrm{range}\big(\mathbf{A}\big) &= \big\{\mathbf{A}\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n\big\} \subset \mathbb{R}^m,\\
\ker\big(\mathbf{A}\big) &= \big\{\boldsymbol{x};\, \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^m\big\} \subset \mathbb{R}^n,\\
\mathrm{range}\big(\mathbf{A}^\top\big) &= \big\{\mathbf{A}^\top\boldsymbol{y};\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m\big\} \subset \mathbb{R}^n,\\
\ker\big(\mathbf{A}^\top\big) &= \big\{\boldsymbol{y};\, \mathbf{A}^\top\boldsymbol{y} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n\big\} \subset \mathbb{R}^m
\end{aligned}$$

で定める.

df:e-e2
定義 B.3. $n \in \mathbb{N}$ とする. 行列式は関数 $\mathrm{Det} : \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}$ で以下のように定義する.

(1) 1×1 の行列 (a) の行列式を

$$\mathrm{Det}(a) = a$$

で定める.
(2) $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$ とき, 行列

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R})$$

の行列式を以下のように定める. $i, j = 1, 2, \ldots, n$ に対し $\mathbf{A}_{ij}$ を $\mathbf{A}$ から i 行と j 列をとった $(n-1) \times (n-1)$ 行列とする. $n \times n$ 行列 $\mathbf{A}$ の行列式を

$$\mathrm{Det}(\mathbf{A}) = \sum_{k=1}^{n} (-1)^{k+1} a_{1k} \mathrm{Det}(\mathbf{A}_{1k})$$

で定める.

pro:e-e3

命題 B.4. $n \times n$ の行列 $\mathbf{A} = (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n) \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対して, 行列式は以下の性質をみたす.

(1) $k = 1, 2, \ldots, n$ と $d \in \mathbb{R}$ に対し

$$\mathrm{Det}(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \lambda \boldsymbol{a}_k, \ldots, \boldsymbol{a}_n) = \lambda \mathrm{Det}(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \ldots, \boldsymbol{a}_n)$$

である.

(2) $j \neq k$ に対し

$$\mathrm{Det}(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k + \lambda \boldsymbol{a}_j, \ldots, \boldsymbol{a}_n) = \lambda \mathrm{Det}(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \ldots, \boldsymbol{a}_n)$$

である.

(3) $\mathrm{Det}(\boldsymbol{I}_n) = 1$ である.

(4) $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対し

$$\mathrm{Det}(\mathbf{AB}) = \mathrm{Det}(\mathbf{A})\mathrm{Det}(\mathbf{B})$$

である.

df:e-e4

定義 B.5. $\mathbf{A} \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対し, ある $\mathbf{B} \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R})$ が存在し

$$\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}_n$$

が成り立つとき, $\mathbf{A}$ は可逆であるといい, $\mathbf{B}$ を $\mathbf{A}$ の**逆行列**という. これを $\mathbf{A}^{-1}$ と記す.

eq:e-e6 **命題 B.6.** $\mathbf{A} \in \mathsf{Mat}(n;\,\mathbb{R})$ とする．このとき

$$\mathbf{A}\ \text{は可逆} \iff \mathrm{Det}(\mathbf{A}) \neq 0$$

である．

thm:e-1 **定理 B.7.** (特異値分解) $m,\,n \in \mathbb{N}$ とする．任意の $\mathbf{A} \in \mathsf{Mat}(m,\,n;\,\mathbb{R})$ は分解

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top$$

を持つ．ただし $\mathbf{U} \in \mathsf{Mat}(m;\,\mathbb{R})$, $\mathbf{V} \in \mathsf{Mat}(n;\,\mathbb{R})$ は直交行列で，$\mathbf{D} \in \mathsf{Mat}(m,\,n;\,\mathbb{R})$ は対角行列で，その対角成分は $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_{\min(m,\,n)} \geq 0$ である．$d_j\,(j = 1,\,2,\,\ldots,\,\min(m,\,n))$ を行列 $\mathbf{A}$ の**特異値**といい，$\{(d_j,\,\boldsymbol{u}_j,\,\boldsymbol{v}_j);\,j = 1,\,2,\,\ldots,\,\min(n,\,n)\}$ を**特異値系**[1]という．

re:e-2 **注意 B.8.** $n \geq m$ のとき

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_m & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

である．$m \geq n$ のとき，

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

である． □

定理 B.7 の証明 (thm:e-1) $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ に対し，

$$|\boldsymbol{y}|_{2,\,m} = \sqrt{\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{y}}$$

とする．ただし，次元の異なる Euclid 空間のノルムも同じ記号を流用する．行列 $\mathbf{A}$ のノルム

$$\|\mathbf{A}\| := \sup_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{\left|\mathbf{A}\boldsymbol{x}\right|_{2,\,m}}{|\boldsymbol{x}|_{2,\,n}}$$

[1] $j = 1,\,2,\,\ldots,\,\min(m,\,n)$ に対して

$$\mathbf{A}\boldsymbol{v}_j = d_j \boldsymbol{u}_j$$

となっている．

で定義すると

$$d_1 := \|\mathbf{A}\| := \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\,|\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} \big|\mathbf{A}\boldsymbol{x}\big|_{2,\,m}$$

となる．$d_1 \neq 0$ と仮定する．そうでなければ, 定理の証明は自明となる．
あるベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n\,(|\boldsymbol{x}|_{2,\,n} = 1)$ が存在して

$$\big|\mathbf{A}\boldsymbol{x}\big|_{2,\,m} = d_1$$

をみたすとする．

$$\boldsymbol{y} = \frac{1}{d_1}\mathbf{A}\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$$

とおけば

$$|\boldsymbol{y}|_{2,\,m}^2 = \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{y} = \frac{1}{d_1^2}\boldsymbol{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \frac{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|_{2,\,m}^2}{d_1^2} = 1$$

より $|\boldsymbol{y}|_{2,\,m} = 1$ となる．$\boldsymbol{v}_2,\,\boldsymbol{v}_3,\,\ldots,\,\boldsymbol{v}_n \in \mathbb{R}^n$ と $\boldsymbol{u}_2,\,\boldsymbol{u}_3,\,\ldots,\,\boldsymbol{u}_m \in \mathbb{R}^m$ をうまく選んで, $\{\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{v}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{v}_n\}$ と $\{\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{u}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{u}_m\}$ はそれぞれ $\mathbb{R}^n$ と $\mathbb{R}^m$ の正規直交基底となるようにする．

$$\mathbf{U}_1 = (\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{u}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{u}_m) \in \mathsf{Mat}(m;\,\mathbb{R}), \quad \mathbf{V}_1 = (\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{v}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{v}_n) \in \mathsf{Mat}(n;\,\mathbb{R}),$$
$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{U}_1^\top\mathbf{A}\mathbf{V}_1$$

とおけば,

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_1 = \mathbf{U}_1^\top\mathbf{A}\mathbf{V}_1 &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \\ \boldsymbol{u}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \end{bmatrix} \mathbf{A}[\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{v}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{v}_n] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \\ \boldsymbol{u}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \end{bmatrix} [\mathbf{A}\boldsymbol{x},\,\mathbf{A}\boldsymbol{v}_2,\,\ldots,\,\mathbf{A}\boldsymbol{v}_n] \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \\ \boldsymbol{u}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \end{bmatrix} [d_1\boldsymbol{y},\,\mathbf{A}\boldsymbol{v}_2,\,\ldots,\,\mathbf{A}\boldsymbol{v}_n] = \begin{bmatrix} d_1\boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{y} & \boldsymbol{y}^\top\mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 & \ldots & \boldsymbol{y}^\top\mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \\ 0 & \boldsymbol{u}_2^\top\mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 & \ldots & \boldsymbol{u}_2\mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \boldsymbol{u}_m\mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 & & \ldots\boldsymbol{u}_m\mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \end{bmatrix} \\
&=: \begin{bmatrix} d_1 & \boldsymbol{w}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

と書き直せる. ただし

$$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{y}^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_3 \\ \vdots \\ \boldsymbol{y}^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n-1},$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_2^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{u}_2^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_3 & \dots & \boldsymbol{u}_2^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \\ \boldsymbol{u}_3^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{u}_3^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}3 & \dots & \boldsymbol{u}_3^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{u}_m^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_3 & \dots & \boldsymbol{u}_m^\top \mathbf{A}\boldsymbol{v}_n \end{bmatrix} \in \mathsf{Mat}(m-1,\, n-1;\, \mathbb{R})$$

である. 上記の形に注意して計算すると

$$\mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 & \boldsymbol{w}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1^2 + \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{w} \\ \mathbf{B}\boldsymbol{w} \end{bmatrix}$$

となる. したがって

$$\left| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} \right|_{2,\,m}^2 = \left| \begin{bmatrix} d_1^2 + \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{w} \\ \mathbf{B}\boldsymbol{w} \end{bmatrix} \right|_{2,\,m}^2 = \{d_1^2 + \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{w}\}^2 + \boldsymbol{w}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}\boldsymbol{w} \geq \{d_1^2 + |\boldsymbol{w}|_{2,\,m-1}^2\}^2$$

から

$$\left| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} \right|_{2,\,m} \geq d_1^2 + |\boldsymbol{w}|_{2,\,m-1}^2, \quad \left| \frac{1}{\sqrt{d_1^2 + |\boldsymbol{w}|_2}} \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} \right|_{2,\,m} = 1$$

がわかる. よって

$$\|\mathbf{A}_1\| = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} \left| \mathbf{A}_1 \boldsymbol{x} \right|_{2,\,n} \geq \frac{1}{\sqrt{d_1^2 + |\boldsymbol{w}|_{2,\,m-1}^2}} \left| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} \right|_2 \geq \sqrt{d_1^2 + |\boldsymbol{w}|_{2,\,m-1}^2} \tag{B.1}$$

eq:sig-1

がわかる. 直交変換に関して $\|\cdot\|$ は不変[2]なので,

$$d_1 = \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_1\|.$$

[2] $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ $(|\boldsymbol{x}|_{2,\,n} = 1)$ に対して $|\mathbf{V}_1 \boldsymbol{x}|_{2,\,n} = 1$ に注意すれば

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{V}_1\| &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} |\mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{V}_1 \boldsymbol{x}|_{2,\,n} = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} |\mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \boldsymbol{x}|_{2,\,m} \\ &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} \sqrt{\boldsymbol{x}^\top \mathbf{A}_1^\top \mathbf{U}_1^\top \mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \boldsymbol{x}} = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} \sqrt{\boldsymbol{x}^\top \mathbf{A}_1^\top \mathbf{A}_1 \boldsymbol{x}} \\ &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_{2,\,n}=1} |\mathbf{A}_1 \boldsymbol{x}|_{2,\,m} = \|\mathbf{A}_1\| \end{aligned}$$

からわかる.

である. これと eq:sig-1 $(B.1)$ と合わせると

$$d_1 = \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_1\| \geq \sqrt{d_1^2 + |\boldsymbol{w}|_{2,\,m-1}^2} \geq d_1$$

となるので

$$|\boldsymbol{w}|_{2,\,m-1} = 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{w} = \mathbf{0}_{m-1}$$

となることがわかる. よって

$$\mathbf{U}_1^\top \mathbf{A} \mathbf{V}_1 = \mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} d_1 & \mathbf{0}_{m-1}^\top \\ \mathbf{0}_{m-1} & \mathbf{B} \end{bmatrix}$$

と書けることがわかった.

次に, $d_2 = \|\mathbf{B}\|$ とおけば

$$\begin{aligned} d_2 &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{n-1};\,|\boldsymbol{x}|_{2,\,n-1}=1} |\mathbf{B}\boldsymbol{x}|_2 = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{n-1};\,|\boldsymbol{x}|_{2,\,n-1}=1} \left| \begin{bmatrix} d_1 & \mathbf{0}_{m-2}^\top \\ \mathbf{0}_{m-2} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} \right|_{2,\,n} \\ &\leq \sup_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^{n};\,|\boldsymbol{z}|_{2,\,n}=1} |\mathbf{A}_1\boldsymbol{z}|_{2,\,m} = \|\mathbf{A}_1\| = \|\mathbf{A}\| = d_1 \end{aligned}$$

を得る. $d_2 = 0$ のとき, $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ より証明はおわり. $d_2 > 0$ と仮定して議論を進める. 前と同じようにすれば,

$$d_2 = \|\mathbf{B}\|$$

とおき,

$$|\mathbf{B}\boldsymbol{x}|_{2,\,m-1} = 1,\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n-1}\ \text{s.t.}\ |\boldsymbol{x}|_{2,\,n} = 1,\ \boldsymbol{y} = \frac{1}{d_2}\mathbf{B}\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m-1}$$

と取り, さきほどの議論を繰り返すと $\widetilde{\mathbf{U}}_2 \in \mathsf{Mat}(m-1;\,\mathbb{R})$, $\widetilde{\mathbf{V}}_2 \in \mathsf{Mat}(n-1;\,\mathbb{R})$ で

$$\widetilde{\mathbf{U}}_2^\top \mathbf{B} \widetilde{\mathbf{V}}_2 = \begin{bmatrix} d_2 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{C} \end{bmatrix},\ \boldsymbol{C} \in \mathsf{Mat}(m-2,\,n-2;\,\mathbb{R})$$

とできて

$$\mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \widetilde{\mathbf{U}}_2 \end{bmatrix},\ \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \widetilde{\mathbf{V}}_2 \end{bmatrix}$$

とおけば, $\mathbf{U}_2$, $\mathbf{V}_2$ は直交行列で

$$\mathbf{U}_2^\top \mathbf{U}_1^\top \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & \boldsymbol{C} \end{bmatrix}$$

となる. さらに $\mathbf{U}_1\mathbf{U}_2 \in \mathsf{Mat}(m;\,\mathbb{R})$ と $\mathbf{V}_1\mathbf{V}_2 \in \mathsf{Mat}(n;\,\mathbb{R})$ も直交行列であることに注意する.

以上の操作を繰り返せば, 定理は証明される. □

thm:e-2 **定理 B.9.** $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top$ と特異値分解されたとする．ただし, $p \le \min(m,\, n)$ に対し

$$d_1 \ge d_2 \ge \cdots \ge d_p > d_{p+1} = d_{p+2} = \cdots = d_{\min(m,\,n)} = 0$$

とする．

$$\mathbf{U} = (\boldsymbol{u}_1,\, \boldsymbol{u}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{u}_m),\ \mathbf{V} = (\boldsymbol{v}_1,\, \boldsymbol{v}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n)$$

としたとき,

$$\begin{aligned}\ker(\mathbf{A}) &= \operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_{p+1},\, \boldsymbol{v}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n\} = \operatorname{range}(\mathbf{A})^\perp,\\ \ker(\mathbf{A}^\top) &= \operatorname{span}\bigl\{\boldsymbol{u}_{p+1},\, \boldsymbol{u}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{u}_m\bigr\} = \operatorname{range}\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)^\perp.\end{aligned}$$

ただし, 部分空間 S に対して, $S^\perp$ は S の直交補空間を表す．

Proof. $\mathbf{U}$ の直交性より

$$\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \mathbf{0}\,(\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n) \iff \mathbf{D}\mathbf{V}^\top\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} d_1\boldsymbol{v}_1^\top\boldsymbol{x} \\ d_2\boldsymbol{v}_2^\top\boldsymbol{x} \\ \vdots \\ d_p\boldsymbol{v}_p^\top\boldsymbol{x} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}.$$

よって $\ker(\mathbf{A})$ の任意の元 $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{v}_1,\, \boldsymbol{v},\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_p$ と直交するので,

$$\ker(\mathbf{A}) = \operatorname{span}\{\boldsymbol{v}_{p+1},\, \boldsymbol{v}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n\}.$$

さらに $\mathbf{A}^\top = \mathbf{V}\mathbf{D}^\top\mathbf{U}^\top$ より

$$\ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr) = \operatorname{span}\{\boldsymbol{u}_{p+1},\, \boldsymbol{u}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{u}_m\} = \operatorname{range}\bigl(\mathbf{A}\bigr)^\perp.$$

一方, $\forall\widetilde{\boldsymbol{x}} \in \operatorname{range}\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)$ とすれば, ある $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ があって, $\widetilde{\boldsymbol{x}} = \mathbf{A}^\top\boldsymbol{y}$ とかける．このことより,

$$\boldsymbol{x} \in \ker\bigl(\mathbf{A}\bigr) \iff \boldsymbol{x}^\top\widetilde{\boldsymbol{x}} = \bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\bigr)^\top\boldsymbol{y} = 0$$

より, $\boldsymbol{x}$ は $\operatorname{range}\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)$ と直交する．同様に, $\forall\widetilde{\boldsymbol{y}} \in \operatorname{range}\bigl(\mathbf{A}\bigr)$ をとる．ある $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ があって, $\widetilde{\boldsymbol{y}} = \mathbf{A}\boldsymbol{x}$ とかける．このことより

$$\boldsymbol{y} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr) \iff \boldsymbol{y}^\top\widetilde{\boldsymbol{y}} = \bigl(\mathbf{A}^\top\boldsymbol{y}\bigr)^\top\boldsymbol{x} = 0$$

より, $\boldsymbol{y}$ は $\operatorname{range}\bigl(\mathbf{A}\bigr)$ と直交することもわかる． □

re:e-4 **注意 B.10.**

$$\mathbf{U}_1 = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_p], \mathbf{U}_2 = [\boldsymbol{u}_{p+1}, \boldsymbol{u}_{p+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_m],$$
$$\mathbf{V}_1 = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p], \mathbf{V}_2 = [\boldsymbol{v}_{p+1}, \boldsymbol{v}_{p+2}, \ldots, \boldsymbol{v}_n]$$

とおく．すなわち

$$\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2], \quad \mathbf{V} = [\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2]$$

である．このとき, $\mathbb{R}^n$ から $\ker(\mathbf{A})$ への直交射影を $\mathbf{P}$, $\mathbb{R}^m$ から $\ker(\mathbf{A}^\top)$ への直交射影を $\mathbf{Q}$ とおくと

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}_2\mathbf{V}_2^\top, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{U}_2\mathbf{U}_2^\top$$

となる． □

B.1 補遺: Moore-Penrose の一般化逆行列

sec:moore

$\mathbf{A} \in \mathsf{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ で $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ とする．定理 ~~B.7~~ thm:e-1 から $1 \leq p \leq \min(m, n)$ があって

$$\begin{aligned}
&\mathbf{A} = \widetilde{\mathbf{U}}\widetilde{\mathbf{D}}\widetilde{\mathbf{V}}^\top,\\
&\widetilde{\mathbf{U}} \in \mathsf{Mat}(m; \mathbb{R}), \widetilde{\mathbf{V}} \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R}) \text{ は直交行列},\\
&\widetilde{\mathbf{D}} \in \mathsf{Mat}(m, n; \mathbb{R}) \text{ は対角行列 (非対角成分は 0) で}\\
&\text{その正の対角成分は } d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_p > 0
\end{aligned}$$

と書ける．ここで $\widetilde{\mathbf{U}}, \widetilde{\mathbf{D}}, \widetilde{\mathbf{V}}$ を分解し

$$\begin{aligned}
&\widetilde{\mathbf{U}} = [\mathbf{U}, \mathbf{U}^\perp], \mathbf{U} \in \mathsf{Mat}(m, p; \mathbb{R}),\\
&\widetilde{\mathbf{V}} = [\mathbf{V}, \mathbf{V}^\perp], \mathbf{V} \in \mathsf{Mat}(n, p; \mathbb{R}),\\
&\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p \end{bmatrix} \in \mathsf{Mat}(p; \mathbb{R})
\end{aligned}$$

とする．すると

$$\widetilde{\mathbf{U}}^\top\widetilde{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}^\top\mathbf{U} & \mathbf{U}^\top\mathbf{U}^\perp \\ (\mathbf{U}^\perp)^\top\mathbf{U} & (\mathbf{U}^\perp)^\top\mathbf{U}^\perp \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_m,$$
$$\widetilde{\mathbf{V}}^\top\widetilde{\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}^\top\mathbf{V} & \mathbf{V}^\top\mathbf{V}^\perp \\ (\mathbf{V}^\perp)^\top\mathbf{V} & (\mathbf{V}^\perp)^\top\mathbf{V}^\perp \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_n$$

から

$$\mathbf{U}^\top\mathbf{U} = \boldsymbol{I}_p,\ \mathbf{U}^\top\mathbf{U}^\perp = \mathbf{0},\ \mathbf{V}^\top\mathbf{V} = \boldsymbol{I}_p,\ \mathbf{V}^\top\mathbf{V}^\perp = \mathbf{0}$$

となる．よって

$$\mathbf{A} = \widetilde{\mathbf{U}}\widetilde{\mathbf{D}}\widetilde{\mathbf{V}}^\top = \mathbf{UDV}^\top \tag{B.2}$$

eq:mp-2

となる．ただし

$$\mathbf{U}^\top\mathbf{U} = \mathbf{V}^\top\mathbf{V} = \boldsymbol{I}_p,\ \mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p \end{bmatrix}$$

となる．

(B.2) を踏まえて，$\mathbf{A}^\dagger \in \mathsf{Mat}(n,\, m;\, \mathbb{R})$ を

$$\mathbf{A}^\dagger := \mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\top,\ \mathbf{D}^{-1} = \begin{bmatrix} d_1^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p^{-1} \end{bmatrix} \tag{B.3}$$

eq:mp-3

と定める．$\mathbf{A}^\dagger$ を $\mathbf{A}$ の Moore-Penrose **の一般逆行列**と呼ぶことにする．

すると $\mathbf{A}^\dagger$ は下記の関係式をみたす $n \times m$ の行列となる．

$$\mathbf{AA}^\dagger\mathbf{A} = \mathbf{A}, \tag{B.4}$$

eq:mp-4

$$\mathbf{A}^\dagger\mathbf{AA}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger, \tag{B.5}$$

eq:mp-5

$$\mathbf{AA}^\dagger = \left(\mathbf{AA}^\dagger\right)^\top, \tag{B.6}$$

eq:mp-6

$$\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} = \left(\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\right)^\top \tag{B.7}$$

eq:mp-7

が成立する．上記 (B.4) – (B.7) は (B.2) と (B.3) よりわかる．実際

$$\begin{aligned} \mathbf{AA}^\dagger\mathbf{A} &= \mathbf{UDV}^\top\mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\top\mathbf{UDV}^\top = \mathbf{UDV}^\top = \mathbf{A}, \\ \mathbf{A}^\dagger\mathbf{AA}^\dagger &= \mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\top\mathbf{UDV}^\top\mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\top = \mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\top = \mathbf{A}^\dagger, \\ \mathbf{AA}^\dagger &= \mathbf{UDV}^\dagger\mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{UU}^\top = \left(\mathbf{UU}^\top\right)^\top = \left(\mathbf{AA}^\dagger\right)^\top, \\ \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} &= \mathbf{VD}^{-1}\mathbf{U}^\top\mathbf{UDV}^\top = \mathbf{VV}^\top = \left(\mathbf{VV}^\top\right)^\top = \left(\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\right)^\top \end{aligned}$$

からわかる．さらに

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = \mathbf{AA}^\dagger &: \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathrm{rank}(\mathbf{A}) \subset \mathbb{R}^m, \\ \mathbf{Q} = \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} &: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathrm{rank}\left(\mathbf{A}^\top\right) \subset \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

は射影行列になっている．すなわち $\mathbf{P} \in \mathsf{Mat}(m; \mathbb{R})$ と $\mathbf{Q} \in \mathsf{Mat}(n; \mathbb{R})$

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P},\ \mathbf{P}^\top = \mathbf{P},\ \mathbf{Q}^2 = \mathbf{Q},\ \mathbf{Q}^\top = \mathbf{Q}$$

をみたしている．

　最後に $\mathbf{A}^\dagger$ の一意性を示す．$\mathbf{B}^\dagger$ も $\mathbf{A}$ の Moore-Penrose の一般逆行列とする．すると $\mathbf{A}^\dagger$ を $\mathbf{B}$ と替えた

$$\mathbf{ABA} = \mathbf{A}, \tag{B.8}$$ `eq:mp-8`

$$\mathbf{BAB} = \mathbf{B}, \tag{B.9}$$ `eq:mp-9`

$$\mathbf{AB} = \left(\mathbf{AB}\right)^\top, \tag{B.10}$$ `eq:mp-10`

$$\mathbf{BA} = \left(\mathbf{BA}\right)^\top \tag{B.11}$$ `eq:mp-11`

も成立する．すると

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^\dagger &= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-4}}{B.4})) \\
&= \mathbf{A}^\dagger\left(\mathbf{ABA}\right)\mathbf{A}^\dagger && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-8}}{B.8})) \\
&= \mathbf{A}^\dagger\left(\mathbf{AB}\right)^\top\left(\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger\right)^\top && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-6}}{B.6}) \text{ と } (\overset{\texttt{eq:mp-10}}{B.10})) \\
&= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{B}^\top\left(\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\right)^\top \\
&= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{B}^\top\mathbf{A}^\top && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-4}}{B.4})) \\
&= \mathbf{A}^\dagger\left(\mathbf{AB}\right)^\top \\
&= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{AB} && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-10}}{B.10})) \\
&= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{ABAB} && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-8}}{B.8})) \\
&= \left(\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\right)^\top\left(\mathbf{BA}\right)^\top\mathbf{B} && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-7}}{B.7} \text{ と } (\overset{\texttt{eq:mp-11}}{B.11})) \\
&= \left(\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\right)^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B} \\
&= \mathbf{A}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B} && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-4}}{B.4})) \\
&= \left(\mathbf{BA}\right)^\top\mathbf{B} \\
&= \mathbf{BAB} && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-11}}{B.11})) \\
&= \mathbf{B} && (\because (\overset{\texttt{eq:mp-8}}{B.8}))
\end{aligned}$$

からわかる．よって一意性を証明できた．

注意 B.11. 多くの本では，$\mathbf{A} \in \mathsf{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ に対して $(\overset{\texttt{eq:mp-4}}{B.4}) - (\overset{\texttt{eq:mp-7}}{B.7})$ をみたす $n \times m$ の行列 $\mathbf{A}^\dagger$ を $\mathbf{A}$ の Moore-Penrose の一般逆行列と定義している． □

第C章　Hilbert空間

C.1　Hilbert空間の定義

df:d-1 **定義 C.1.** $\mathcal{H}$ をベクトル空間とする．関数 $\langle\cdot\,,\,\cdot\rangle : \mathcal{H}\times\mathcal{H}\longrightarrow\mathbb{R}$ が任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}\in\mathcal{H}$ と $a\in\mathbb{R}$ に対し次の条件 (1) ∼ (3) をみたすとき，$\langle\cdot\,,\,\cdot\rangle$ は**内積**であるという．

(1) $\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{x}\rangle\geq 0$．更に，$\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{x}\rangle = 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$．ただし，$\boldsymbol{0}$ は $\mathcal{H}$ の零ベクトル．

(2) $\langle\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{z}\rangle = \langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{z}\rangle + \langle\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{z}\rangle$.

(3) $\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\rangle = \langle\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{x}\rangle$.

ベクトル空間 $\mathcal{H}$ と内積 $\langle\cdot\,,\,\cdot\rangle$ の組 $\big(\mathcal{H}, \langle\cdot\,,\,\cdot\rangle\big)$ を**内積空間**という．

定義 C.2. $\big(\mathcal{H}, \langle\cdot\,,\,\cdot\rangle\big)$ を内積空間とする．任意の $\boldsymbol{x}\in\mathcal{H}$ に対し

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{x}\rangle}$$

とし，$\|\cdot\|$ を $\boldsymbol{x}$ の**ノルム**という．

thm:d-2 **定理 C.3.** $\big(\mathcal{H}, \langle\cdot\,,\,\cdot\rangle\big)$ を内積空間とする．$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\in\mathcal{H}$ と $a\in\mathbb{R}$ に対し，次が成立する．

(4) $\|\boldsymbol{x}\|\geq 0$.

(5) $\|\boldsymbol{x}\| = 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$.

(6) $\|a\boldsymbol{x}\| = |a|\,\|\boldsymbol{x}\|$.

(7) (三角不等式): $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leq\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$.

(8) (Cauchy-Schwarz の不等式): $\big|\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\rangle\big|^2\leq\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{y},\,\boldsymbol{y}\rangle$.

(9) (中線定理): $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2+\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 = 2\|\boldsymbol{x}\|^2+2\|\boldsymbol{y}\|^2$..

df:d-4 **定義 C.4.** 内積空間 $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ がノルム $\|\cdot\|$ に関して完備であるとき, $\mathcal{H}$ を **Hilbert 空間**という. すなわち,

$$\|\boldsymbol{x}_m - \boldsymbol{x}_n\| \longrightarrow 0 \quad (m, n \to \infty)$$

をみたす $\mathcal{H}$ 内の列 $\{\boldsymbol{x}_n\}_{n=1}^{\infty}$ を **Cauchy 列**といい, $\mathcal{H}$ の任意の Cauchy 列に対し

$$\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}\| \longrightarrow 0 \quad (n \to \infty)$$

をみたす $\boldsymbol{x} \in \mathcal{H}$ が存在する.

df:d-5 **定義 C.5.** ベクトル空間の部分集合 C が $\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in C$ と $0 < \forall t < 1$ に対し

$$(1-t)\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{y} \in C$$

をみたすとき, C は**凸集合**であるという.

定理 C.6. $C \neq \varnothing$ は Hilbert 空間 $(\mathcal{H}, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ の閉凸集合[1]で, $x \in \mathcal{H}$ であるとき, $\boldsymbol{x}_0 \in C$ で

$$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\| = \inf_{\boldsymbol{y}\in C} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|$$

をみたすものが唯一存在する. $\boldsymbol{x}_0$ を $\boldsymbol{x}$ からの C への**射影**という. C への射影を P_C と書くことにする. すなわち,

$$P_C : \mathcal{H} \longrightarrow C, \quad \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}_0$$

である. 射影の定義から $\forall \boldsymbol{c} \in C$ に対し $P_C(\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{c}$ となっていることに注意せよ.

Proof. $a = \inf_{\boldsymbol{y}\in C} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|$ とおき, C の点列 $\{\boldsymbol{y}_n\}_{n=1}^{\infty}$ で $\{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_n\|\}_{n=1}^{\infty}$ が a に収束するものをとる. このとき中線定理より

$$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m + \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_n\|^2 + \|(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m) - (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m)\|^2 = 2\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m\|^2 + 2\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_n\|^2 \tag{C.1}$$

なので,

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{y}_m - \boldsymbol{y}_n\|^2 &= 2\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m\|^2 + 2\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_n\|^2 - 4\left\|\boldsymbol{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{y}_m + \boldsymbol{y}_n)\right\|^2 \\ &\leq 2\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m\|^2 + 2\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_n\|^2 - 4a^2 \\ &\longrightarrow 0 \quad (n, m \to \infty)\end{aligned}$$

[1] C は定義 C.5 の条件をみたし, さらに, C は閉集合であるので, $\boldsymbol{x}_n \in C\,(n \in \mathbb{N})$ に対し, $\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}\| \longrightarrow 0\,(n \to \infty)$ ならば $\boldsymbol{x} \in C$ が成り立つ.

となり[2], $\{\boldsymbol{y}_n\}_{n=1}^{\infty}$ は Cauchy 列である. $\mathcal{H}$ は完備で C は閉集合なので, $\{\boldsymbol{y}\}_{n=1}^{\infty}$ は C 内で収束し, その極限を $\boldsymbol{x}_0$ とおくと $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|=a$ が成り立つ. $\boldsymbol{x}_0'\in C$ も同じ条件をみたすものとすると, 再び中線定理より

$$\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_0'\|^2=2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\|^2+2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0'\|^2-4\left\|\boldsymbol{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{x}_0')\right\|^2$$

となり, $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{x}_0'$ となる. □

以下では, $\mathcal{H}$ は, その内積が $\langle\cdot,\cdot\rangle$ の Hilbert 空間とする.

df:d-7

定義 C.7. $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{H}$ が $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=0$ をみたすとき, $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ は**直交する**といい, $\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{y}$ と書くことにする. $S\subset\mathcal{H}$ に対し

$$S^{\perp}:=\{\boldsymbol{x}\in\mathcal{H}:\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=0\,(\boldsymbol{y}\in\mathcal{H})\}$$

とおき, S の**直交補空間**という.

定義の直接的な結果を列挙しておく.

- $\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{y}$ のとき,

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2.\qquad\text{(Pythagoras の定理)}$$

- S, S_1, S_2 を $\mathcal{H}$ の部分集合とする. このとき, $(S^{\perp})^{\perp}\supset S$. $S_1\subset S_2\Longrightarrow S_2^{\perp}\subset S_1^{\perp}$.
- 内積は連続であり,

$$S^{\perp}=\bigcap_{\boldsymbol{y}\in S}\{\boldsymbol{x}\in\mathcal{H};\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=0\}$$

なので, $S^{\perp}$ は $\mathcal{H}$ の閉集合.

pro:d-8

命題 C.8. $\mathscr{K}$ を Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の閉部分空間[3]であるとき,

(1) $\mathcal{H}=\mathscr{K}\oplus\mathscr{K}^{\perp}$.

(2) $(\mathscr{K}^{\perp})^{\perp}=\mathscr{K}$.

Proof. 泉 (2021, p.19) を参照のこと. □

ここで直交射影について書く.

[2] C は凸なので, $(1/2)(\boldsymbol{y}_m+\boldsymbol{y}_n)\in C$ であるので,

$$4\left\|\boldsymbol{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y}_m+\boldsymbol{y}_n)\right\|^2\geq 4a^2$$

となることに注意せよ.

[3] $\forall\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathscr{K}$ と $\forall\alpha,\beta\in\mathbb{R}$ に対し $\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{y}\in\mathscr{K}$.

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上で定義された写像 $\varphi\colon \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{R}$ が

$$\varphi\big(\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{y}\big)=\alpha\varphi(\boldsymbol{x})+\beta\varphi(\boldsymbol{y}) \quad (\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\in\mathcal{H},\,\alpha,\,\beta\in\mathbb{R})$$

をみたすとき, φ は $\mathcal{H}$ 上の**線型汎関数**という. $\mathcal{H}$ 上の線型汎関数全体の集合を $\mathcal{H}^*$ と書くことにする. $\varphi\in\mathcal{H}^*$ のノルム[4]を

$$\|\varphi\|=\sup_{\boldsymbol{x}\in\mathcal{H};\,\|\boldsymbol{x}\|\le 1}\big|\varphi(\boldsymbol{x})\big|$$

と定める. この量が有限のとき, φ は**有界**という.

pro:d-9

命題 C.9. $\varphi\in\mathcal{H}^*$ とする. このとき, 次の 2 条件は同値.

(1) φ は有界.

(2) φ は連続. すなわち, $\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{x}_n\in\mathcal{H}\,(n\in\mathbb{N})$ に対し, $\boldsymbol{x}_n\longrightarrow\boldsymbol{x}\,(n\to\infty)$ [5]ならば, $\varphi(\boldsymbol{x}_n)\longrightarrow\varphi(\boldsymbol{x})\,(n\to\infty)$ が成り立つ.

Proof. 瀬戸 (2021, p.56) を参照. □

$\boldsymbol{y}\in\mathcal{H}$ に対し $\varphi_{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{x})=\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\rangle$ と定めると, $\varphi_{\boldsymbol{y}}$ は $\mathcal{H}$ の線型汎関数であり, Cauchy-Schwarz の不等式より, $\varphi_{\boldsymbol{y}}$ は有界であるので, $\varphi_{\boldsymbol{y}}\in\mathcal{H}^*$ となる. Hilbert 空間では, その逆も成り立ち, $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}^*$ の元の間に対応関係がつく.

thm:d-10

定理 C.10. (Riesz の表現定理) $\mathcal{H}$ を Hilbert 空間とすると, $\forall\varphi\in\mathcal{H}^*$ に対して, $\boldsymbol{x}_\varphi\in\mathcal{H}$ で, $\forall\boldsymbol{x}\in\mathcal{H}$ に対し

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\langle\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{x}_\varphi\rangle$$

をみたすものが唯一存在する. さらに

$$\|\varphi\|=\|\boldsymbol{x}_\varphi\|$$

が成立する.

Proof. 泉 (2021, p.20) または瀬戸 (2021, p.57) を参照. □

df:d-11

定義 C.11. $\mathscr{X}\,(\neq\varnothing)$ を集合とし, 以下の 2 条件をみたす Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ を考える.

(1) $\mathcal{H}$ は $\mathscr{X}$ 上の関数からなる Hilbert 空間である.

[4] $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}^*$ 上のノルム (みかけの定義では異なるもの) を同じ記号を用いて表記する理由はあとでわかる.

[5] $\|\boldsymbol{x}_n-\boldsymbol{x}\|\longrightarrow 0\,(n\to\infty)$ が成立していること.

(2) $\forall x \in \mathscr{X}$ と $f,\, f_n \in \mathcal{H}\,(n \in \mathbb{N})$ に対し

$$\|f_n - f\| \longrightarrow 0\,(n \to \infty) \Longrightarrow f_n(x) \longrightarrow f(x)\,(n \to \infty)$$

である.

このような Hilbert 空間を**再生核 Hilbert 空間**という.

ここで, $x \in \mathscr{X}$ に対し

$$\varphi_x(f) = f(x) \quad (f \in \mathcal{H})$$

とさだめると, φ_x は線型汎関数になる. このことに注意すれば, Riesz の表現定理より, (2) は次の $(2)'$ と同値になる.

$(2)'$ $\forall x \in \mathscr{X}$ と $f \in \mathcal{H}$ に対し

$$f(x) = \langle f,\, k_x \rangle$$

となる $k_x \in \mathcal{H}$ が唯一存在する. すなわち, 代入が内積で表現される. この k_x を**再生核**という. さらに, $\mathscr{X} \times \mathscr{X}$ 上の関数 k を

$$k_x(y) = k(x,\, y) \qquad (x,\, y \in \mathscr{X})$$

と書いたとき, k を $\mathcal{H}$ の**核関数**といい, この再生核 Hilbert 空間を $\mathcal{H}_k$ と書くことにする.

(2) と $(2)'$ は同値であることは以下のように考えればよい. (2) は汎関数 φ_x が連続であることを言っている. したがって, 汎関数 φ_x について

$$\varphi_x \text{ は連続} \Longleftrightarrow \varphi_x \text{ は有界}$$

である. 斉藤 (2002) の定理 2.2.1(page 30) により

$$\begin{gathered}\varphi_x \text{ は有界} \Longleftrightarrow \mathscr{X} \text{ 上の関数からなる Hiblert 空間 } \mathcal{X} \text{ において} \\ \text{核関数 } k(x,\, y)\,(x,\, y \in \mathscr{X}) \text{ が存在}\end{gathered}$$

がわかる.

第D章　凸最適化問題

D.1　凸関数とその性質

この節では, 凸関数の定義をまず述べる. 凸関数のこの定義は幾何的なものであり, 凸関数がどのようなものであるかを直観的に理解するが用意である. しかし, 解析的な議論をするためには, この定義では不十分[1]である. 凸関数であるための必要十分条件が重要になってくる. まず, ① 閉区間上の凸関数はその内部で絶対連続であることを示す. さらに, 凸関数であるための必要十分条件を 2 つ述べる. ひとつは, ② 凸関数の平均変動は単調増加であることであり, もうひとつは, ③下から支える直線の存在することである. これらは, 凸関数を特徴付けていることに注意する.

df:con-1 **定義 D.1.** $a, b \in \mathbb{R}, a < b$ とする. 関数 $f : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ が $x, y \in [a, b], 0 \leq \lambda \leq 1$ に対して

$$f\bigl(\lambda x + (1-\lambda)y\bigr) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$$

をみたすとき, 関数 f は**凸関数**であるという. とくに $x \neq y, 0 < \lambda < 1$ のとき

$$f\bigl(\lambda x + (1-\lambda)y\bigr) < \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$$

が成立する場合は, 関数 f は**狭義凸関数**であるという.

re:con-2 **注意 D.2.** $-f$ が凸関数 (狭義凸関数) のとき, 関数 f は**凹関数** (**狭義凹関数**) であるという. □

thm:con-3 **定理 D.3.** 区間 $[a, b]$ 上の凸関数は開区間 (a, b) 上の各点で連続である.

Proof. まず, $\forall x \in [a, b]$ は

$$x = \lambda a + (1-\lambda)b \quad (0 \leq \lambda \leq 1)$$

と表せるから, 凸関数の定義より

$$f(x) \leq \lambda f(a) + (1-\lambda)f(b) \leq \max\{f(a), f(b)\} =: K$$

[1]たとえば, この定義の直接的に利用では Jensen の不等式の証明できない.

となることに注意する．よって, 凸関数 f は上に有界である．$\forall x_0 \in (a,\, b)$ とし, $f(x)$ は $x = x_0$ で連続であることを示すために関数 g を

$$g(t) := f(x_0 + t) - f(x_0) \qquad (a - x_0 < t < b - x_0)$$

と定める．このとき $g(t)$ は $(a - x_0,\, b - x_0) \ni \{0\}$ 上で凸関数であり, $g(0) = 0$ である．いま $\forall \epsilon > 0$ に対して正数 ϵ' を

$$0 < \epsilon' < \min\left\{ \frac{\epsilon}{K + |f(x_0)|},\, 1 \right\} \tag{D.1}$$ `eq:con-1a`

をみたすように選ぶ．さらに正数 ρ と δ を

$$0 < \rho < \min\{x_0 - a,\, b - x_0\}, \quad 0 < \delta < \rho\epsilon' \tag{D.2}$$ `eq:con-1b`

をみたすように定める．$0 < \epsilon' \leq 1$ だから

$$|t| < \delta \Longrightarrow |t| < \rho$$

となる．したがって $|t| < \delta$ に対して, $g(t)$ は定義されている．しかも

$$|t| < \delta \Longrightarrow \left|\frac{t}{\epsilon'}\right| < \rho \Longrightarrow x_0 + \frac{t}{\epsilon'} \in (a,\, b)$$

となること[2] がわかる．よって, (D.3) から

$$\begin{aligned} g\left(\frac{t}{\epsilon'}\right) &= f\left(x_0 + \frac{t}{\epsilon'}\right) - f(x_0) \leq \left|f\left(x_0 + \frac{t}{\epsilon'}\right)\right| + |f(x_0)| \\ &\leq K + |f(x_0)| =: K_1 \end{aligned}$$

を得る．ところで

$$t = (1 - \epsilon') \times 0 + \epsilon' \left(\frac{t}{\epsilon'}\right)$$

と表されることと (D.1) から

$$g(t) \leq (1 - \epsilon')g(0) + \epsilon' g\left(\frac{t}{\epsilon'}\right) = \epsilon' g\left(\frac{t}{\epsilon'}\right) \leq \epsilon' K_1 < \epsilon \tag{D.3}$$ `eq:con-1`

となることに注意をする．他方

$$0 = \frac{\epsilon'}{1 + \epsilon'}\left(-\frac{t}{\epsilon'}\right) + \frac{1}{1 + \epsilon'} \cdot t$$

[2] $\left|\dfrac{t}{\epsilon'}\right| < \rho$ と (D.2) から $-x_0 + a < -\rho < \dfrac{t}{\epsilon'} < \rho < b - x_0$ となるので $a < \dfrac{t}{\epsilon'} + x_0 < b$ がわかる．

と表されるので

$$
\begin{aligned}
0 \le g(0) &\le \frac{\epsilon'}{1+\epsilon'} g\left(-\frac{t}{\epsilon'}\right) + \frac{1}{1+\epsilon'} g(t) \le \frac{\epsilon' K_1}{1+\epsilon'} + \frac{1}{1+\epsilon'} g(t) \\
&< \frac{\epsilon}{1+\epsilon'} + \frac{1}{1+\epsilon'} g(t)
\end{aligned}
$$

となり

$$
-\epsilon < g(t) \tag{D.4}
$$

eq:con-2

を得る．よって (D.3) と (D.4) より [eq:con-1 eq:con-2]

$$
|t| < \delta \Longrightarrow |g(t)| < \epsilon
$$

である．$t = x - x_0$ と $g(t)$ の定義より

$$
|x - x_0| < \delta \Longrightarrow |f(x) - f(x_0)| < \epsilon
$$

となり, $f(x)$ は点 x_0 で連続となる． □

thm:con-4

定理 D.4. 関数 $\varphi : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ が単調増加ならば

$$
f(x) := C + \int_a^x \varphi(t)\, dt \qquad (a \le x \le b)
$$

は凸関数である．ただし C は定数である．

Proof. まず，$x, y \in [a, b], x < y, 0 \le \lambda \le 1$ のとき

$$
x \le \lambda x + (1-\lambda) y \le y
$$

であることに注意する． ここで，関数 φ の単調性に注意すれば

$$
\int_{\lambda x + (1-\lambda)y}^{y} \varphi(t)\, dt \ge \{y - \lambda x - (1-\lambda)y\} \varphi\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big), \tag{D.5}
$$

eq:con-1c

$$
\int_{x}^{\lambda x + (1-\lambda)y} \varphi(t)\, dt \le \{\lambda x + (1-\lambda)y - x\} \varphi\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) \tag{D.6}
$$

eq:con-1d

がわかる． f の凸性を示すために, 以下の式が非負であることがわかればよい．

$$
\begin{aligned}
&\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) - f\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) \\
&\quad = (1-\lambda)\big\{f(y) - f\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big)\big\} - \lambda\big\{f\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) - f(x)\big\} \\
&\quad = (1-\lambda) \int_{\lambda x + (1-\lambda)y}^{y} \varphi(t)\, dt - \lambda \int_{x}^{\lambda x + (1-\lambda)y} \varphi(t)\, dt \\
&\quad \ge (1-\lambda)\{y - \lambda x - (1-\lambda)y\} \varphi\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) \qquad (\because \text{(D.5)}) \quad \text{eq:con-1c} \\
&\qquad - \lambda\{\lambda x + (1-\lambda)y - x\} \varphi\big(\lambda x + (1-\lambda)y\big) \qquad (\because \text{(D.6)}) \quad \text{eq:con-1d} \\
&\quad = 0
\end{aligned}
$$

となる. 以上の議論から

$$\lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \geq f\bigl(\lambda x + (1-\lambda)y\bigr)$$

が示せた. □

thm:con-5

定理 D.5. 関数　f が区間 $[a, b]$ 上の凸のとき, 開区間 (a, b) の各点 x で右微分係数 $\dot{f}_+(x)$ が存在し, 関数

$$\dot{f}_+ : (a, b) \ni x \mapsto \dot{f}_+(x) \in \mathbb{R}$$

は単調増加である.

同様に左微分係数 $\dot{f}_-(x)$ が存在し, 関数

$$\dot{f}_- : (a, b) \ni \mapsto \dot{f}_-(x) \in \mathbb{R}$$

も単調増加である. さらに各点 $x \in (a, b)$ において

$$\dot{f}_-(x) \leq \dot{f}_+(x)$$

が成立する.

Proof. 任意の $x \in (a, b)$ に対して実数 η と ξ を

$$0 < \eta < \min\{x-a, b-x\}, \quad 0 < \xi < \eta$$

をみたすように選ぶ. このとき

$$0 < \frac{\xi}{\eta} < 1, \quad x + \xi = \frac{\xi}{\eta}(x+\eta) + \left(1 - \frac{\xi}{\eta}\right)x$$

と書けることに注意する. 関数 f は凸であることから

$$f(x+\xi) \leq \frac{\xi}{\eta}f(x+\eta) + \left(1-\frac{\xi}{\eta}\right)f(x) = \frac{\xi}{\eta}\bigl\{f(x+\eta) - f(x)\bigr\} + f(x)$$

となる. つまり $0 < \xi < \eta$ のとき

$$\frac{f(x+\xi) - f(x)}{\xi} \leq \frac{f(x+\eta) - f(x)}{\eta}$$

となり, $\xi \searrow 0$ とすれば

$$\dot{f}_+(x) \leq \frac{f(x+\eta) - f(x)}{\eta} \tag{D.7}$$

eq:con-3

がわかる.　同様に

$$x - \xi = \frac{\xi}{\eta}(x-\eta) + \left(1 - \frac{\xi}{\eta}\right)x$$

と表せるから

$$f(x-\xi) \le \frac{\xi}{\eta} f(x-\eta) + \left(1 - \frac{\xi}{\eta}\right) f(x) = \frac{\xi}{\eta}\big\{f(x-\eta) - f(x)\big\} + f(x)$$

である．したがって $0 < \xi < \eta$ のとき

$$\frac{f(x) - f(x-\eta)}{\eta} \le \frac{f(x) - f(x-\xi)}{\xi}$$

となり, $\xi \searrow 0$ とすれば

$$\dot{f}_-(x) \ge \frac{f(x) - f(x-\eta)}{\eta} \tag{D.8}$$

eq:con-4

を得る．さらに

$$f(x) = f\left(\frac{(x+\xi) + (x-\xi)}{2}\right) \le \frac{f(x+\xi) + f(x-\xi)}{2}$$

となり

$$f(x) - f(x-\xi) \le f(x+\xi) - f(x)$$

である．だから

$$\frac{f(x) - f(x-\xi)}{\xi} \le \frac{f(x+\xi) - f(x)}{\xi}$$

ががわかる．ここで, $\xi \searrow 0$ とすると

$$\dot{f}_-(x) \le \dot{f}_+(x) \tag{D.9}$$

eq:con-5

がわかる．したがって，(D.7) – (D.9) を考慮すれば

$$\frac{f(x) - f(x-\eta)}{\eta} \le \dot{f}_-(x) \le \dot{f}_+(x) \le \frac{f(x+\eta) - f(x)}{\eta} \tag{D.10}$$

eq:con-6

がわかる．よって $\dot{f}_-(x)$ と $\dot{f}_+(x)$ は有界であることがわかる．

次に, 単調性を示す. そのために $a < x_1 < x_2 < b$ とする. (D.10) の

$$f_-(x) \le f_+(x) \le \frac{f(x+\eta) - f(x)}{\eta}$$

において，$x = x_1$, $x + \eta = x_2$ とおくと

$$f_-(x_1) \le f_+(x_1) \le \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

を得る. 同様に (D.10) の

$$\frac{f(x) - f(x-\eta)}{\eta} \le f_-(x) \le f_+(x)$$

において，$x = x_2,\ x - \eta = x_1$ とおくと

$$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \leq f_-(x_2) \leq f_+(x_2)$$

を得る．これらの式を合わせると

$$\dot{f}_-(x_1) \leq \dot{f}_+(x_1) \leq \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \leq \dot{f}_-(x_2) \leq \dot{f}_+(x_2) \tag{D.11}$$

eq:con-7

となる．よって

$$\dot{f}_-(x_1) \leq \dot{f}_-(x_2), \quad \dot{f}_+(x_1) \leq \dot{f}_+(x_2)$$

が得られる． □

thm:con-6

定理 D.6. 区間 $(a,\, b)$ 上で定義された凸関数 f は, 単調増加で右連続関数 g と点 $c \in (a,\, b)$ によって

$$f(x) = f(c) + \int_c^x g(t)\, dt \qquad (a < x < b)$$

と表せる．

Proof. $a < c < x < b$ とし, 閉区間 $[c,\, x]$ の分割を

$$c = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = x$$

とする．このとき (D.11) より, $k = 1,\, 2,\, \ldots,\, n$ に対し

$$\dot{f}_-(x_{k-1}) \leq \dot{f}_+(x_{k-1}) \leq \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} \leq \dot{f}_-(x_k) \leq \dot{f}_+(x_k)$$

と書ける． これらに $x_k - x_{k-1}$ を掛ければ

$$\begin{aligned}\dot{f}_-(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) \leq \dot{f}_+(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) &\leq f(x_k) - f(x_{k-1}) \\ &\leq \dot{f}_-(x_k)(x_k - x_{k-1}) \leq \dot{f}_+(x_k)(x_k - x_{k-1})\end{aligned}$$

が成立し, 上の不等式の辺々について, 1 から n まで k について和をとると

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^n \dot{f}_-(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) \leq \sum_{k=1}^n \dot{f}_+(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) &\leq f(x) - f(c) \\ &\leq \sum_{k=1}^n \dot{f}_-(x_k)(x_k - x_{k-1}) \leq \sum_{k=1}^n \dot{f}_+(x_k)(x_k - x_{k-1})\end{aligned}$$

が成立する．$\dot{f}_-$ と $\dot{f}_+$ は単調増加だから Riemann 積分可能である．よって $\max_{1\le k\le n}\{x_k - x_{k-1}\} \to 0\,(n\to\infty)$ とすれば

$$
\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{n} \dot{f}_-(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) &\longrightarrow \int_c^x \dot{f}_-(t)\,dt \\
\sum_{k=1}^{n} \dot{f}_+(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) &\longrightarrow \int_c^x \dot{f}_+(t)\,dt \\
\sum_{k=1}^{n} \dot{f}_-(x_{k})(x_k - x_{k-1}) &\longrightarrow \int_c^x \dot{f}_-(t)\,dt \\
\sum_{k=1}^{n} \dot{f}_+(x_{k})(x_k - x_{k-1}) &\longrightarrow \int_c^x \dot{f}_+(t)\,dt
\end{aligned}
$$

となり

$$
f(x) - f(c) = \int_c^x \dot{f}_-(t)\,dt = \int_c^x \dot{f}_+(t)\,dt
$$

がわかる． 他方 $a < x < b$ のときも閉区間 $[x, c]$ について同様の論理を展開して

$$
f(c) - f(x) = \int_x^c \dot{f}_-(t)\,dt = \int_x^c \dot{f}_+(t)\,dt
$$

を示すことができる．したがって

$$
g(x) = \dot{f}_+(x+0)
$$

とおけば, g は右連続で単調増加で

$$
f(x) = f(c) + \int_c^x g(t)\,dt
$$

となる． □

thm:con-7 **定理 D.7.** 関数 f が区間 (a, b) 上の凸であるための必要十分条件は, $\forall x_0 \in (a, b)$ について関数

$$
(a, b) \setminus \{x_0\} \ni x \mapsto \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \in \mathbb{R} \tag{D.12}
$$

eq:con-7a

が単調増加となることである．

Proof. <u>必要性</u>: 関数 f が開区間 (a, b) 上で凸ならば, 定理 ~~D.6 によ~~り (thm:con-6), 右連続な単調増加関数 g が存在して

$$
f(x) - f(x_0) = \int_{x_0}^x g(t)\,dt
$$

と表せる．よって $x \neq x_0$ のとき

$$\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} = \frac{1}{x-x_0}\int_{x_0}^{x} g(t)\,dt$$

は $(a, b) \setminus \{x_0\}$ 上で単調増加である．

<u>十分性</u>: (D.12) が成立したと仮定する． $\forall x, y \in (a, b)$, $x < y$, $0 < \lambda < 1$ に対し

$$x_0 = \lambda x + (1-\lambda)y$$

とおく．(D.12) より $x < x_0 < y$ のとき

$$\frac{f(x_0)-f(x)}{x_0-x} \leq \frac{f(y)-f(x_0)}{y-x_0}.$$

この式に $x_0 = \lambda x + (1-\lambda)y$ を代入すると

$$\frac{f\big(\lambda x+(1-\lambda)y\big)-f(x)}{(1-\lambda)(y-x)} \leq \frac{f(y)-f\big(\lambda x+(1-\lambda)y\big)}{\lambda(y-x)}$$

を得る． 上の不等式の辺々に $\lambda(1-\lambda)(y-x)$ を掛けと

$$\lambda\Big\{f\big(\lambda x+(1-\lambda)y\big)-f(x)\Big\} \leq (1-\lambda)\Big\{f(y)-f\big(\lambda x+(1-\lambda)y\big)\Big\}$$

を得る． これを整理すれば

$$f\big(\lambda x+(1-\lambda)y\big) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y)$$

がわかる． よって, $\lambda = 0, 1$ のときは自明だから, 関数 f は (a, b) 上で凸であることがわかる． □

df:con-8 **定義 D.8.** 関数 f を (a, b) 上の凸とする．点 $x_0 \in (a, b)$ において適当に実数 m を定めると $\forall x \in (a, b)$ に対して

$$S(x) := m(x-x_0) + f(x_0) \leq f(x) \tag{D.13}$$ eq:con-7b

が成立するとき, 直線 $y = S(x)$ を**点 x_0 において f を下から支える直線**という．

thm:con-9 **定理 D.9.** 関数 f が区間 (a, b) 上の凸であるための必要十分条件は, (a, b) の各点 x_0 において f を下から支える直線 $y = S(x)$ が存在することである．

Proof. <u>必要性</u>: 関数 f は開区間 (a, b) 上の凸で $x_0 \in (a, b)$ なので, 定理 D.6 より, ある右連続な単調増加関数 g が存在して

$$f(x) = f(x_0) + \int_{x_0}^{x} g(t)\,dt$$

と書ける．このとき

$$f(x) \geq f(x_0) + g(x_0) \int_{x_0}^{x} dt = f(x_0) + g(x_0)(x - x_0)$$

となることがわかる． したがって, 直線

$$S(x) := f(x_0) + g(x_0)(x - x_0)$$

は点 x_0 で $f(x)$ を下から支えることがわかる．

十分性: $x, y \in (a, b)$, $x < y$, $0 \leq \lambda \leq 1$ とし

$$x_0 = \lambda x + (1 - \lambda)y$$

とおく．仮定より x_0 において凸関数 f を下から支える直線 $S(x)$ が存在する．すると eq:con-7b (D.13) から $S(x) \leq f(x)$ とである． さらに, S の線型性から

$$\begin{aligned} f\bigl(\lambda x + (1 - \lambda)y\bigr) &= f(x_0) = S(x_0) = \lambda S(x) + (1 - \lambda)S(y) \\ &\leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \end{aligned}$$

となる．よって関数 f は (a, b) 上の凸である． □

D.2　凸集合とその性質

df:con-10 **定義 D.10.** C を $\mathbb{R}^n$ の空でない部分集合とする．部分集合 C は凸であるとは次の条件

$$\forall x, y \in C \text{ と } 0 \leq \lambda \leq 1 \Longrightarrow \lambda x + (1 - \lambda)y \in C$$

をみたすときをいう．

df:con-11 **定義 D.11.** $p \in \mathbb{N}$ とし, $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とする．

(1) $\lambda_k \geq 0\,(k = 1, 2, \ldots, p)$ かつ $\sum_{k=1}^{p} \lambda_k = 1$ のとき

$$\sum_{k=1}^{p} \lambda_k \boldsymbol{a}_k$$

を $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p$ の**凸結合**という．

(2) $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p$ によって**生成された凸多面体**を

$$\bigl\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p \bigr\rangle_{2,\,n} = \left\{ \sum_{k=1}^{p} \lambda_k \boldsymbol{a}_k ;\ \lambda_k \geq 0,\ \sum_{k=1}^{p} \lambda_k = 1 \right\} \subset \mathbb{R}^n$$

で定義する．

thm:con-12

定理 D.12. (Carathéodory の定理) $p \in \mathbb{N}$ とし, $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とする．$\boldsymbol{y} \in \langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p \rangle$ は以下のように表せる．

$$\boldsymbol{y} = \sum_{k=1}^{n+1} \lambda_k \boldsymbol{a}_{j_k},$$

$$1 \leq j_1 < j_2 < \cdots < j_{n+1} \leq p, \quad \lambda_k \geq 0, \quad \sum_{k=1}^{n+1} \lambda_k = 1.$$

Proof. $\boldsymbol{y} \in\in \langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p \rangle =: A$ なので, ある $r \in \mathbb{N}$ と $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_r \in A$ があって

$$\boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \boldsymbol{x}_i, \quad \lambda_i > 0\,(i = 1, 2, \ldots, r), \quad \sum_{i=1}^{r} \lambda_i = 1$$

と書ける．r は最小とする．すなわち, $r-1$ 個以下の A の点では $\boldsymbol{y}$ をそれらの凸結合として表せないとする．$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_r$ はアフファィン従属と仮定する．すると, ある $a_i \in \mathbb{R}\,(i = 1, 2, \ldots, r)$ で $a_1 a_2 \cdots a_r \neq 0$ なるものが存在して

$$\sum_{i=1}^{r} a_i \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{0}_n \quad \text{かつ} \quad \sum_{i=1}^{r} a_i = 0$$

とできる．ただし, $\boldsymbol{0}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の零ベクトルである． 集合 $\{a_1, a_2, \ldots, a_r\}$ の中の少なくとも 1 つは正である．正であるもののなかで $\dfrac{\lambda_i}{a_i}$ が最小となるもの $a_i\,(i \in \{1, 2, \ldots, r\})$ を選ぶ．一般性を失わずにそれを a_1 と書くことができる．すると

$$\boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \boldsymbol{x}_i = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \boldsymbol{x}_i - \frac{\lambda_1}{a_1} \underbrace{\sum_{i=1}^{r} a_i \boldsymbol{x}_i}_{=0} = \sum_{i=1}^{r} \left(\lambda_i - \frac{\lambda_1}{a_1} a_i \right) \boldsymbol{x}_i$$

と書ける． すると $a_i > 0\,(i \in \{2, 3, \ldots, r\})$ のとき, $\dfrac{\lambda_1}{a_1}$ の最小性から, $\dfrac{\lambda_i}{a_i} > \dfrac{\lambda_1}{a_1}$ となる．したがって

$$\lambda_i - \frac{\lambda_1}{a_1} a_i \geq \lambda_i - \frac{\lambda_i}{a_i} a_i = 0$$

となる． $a_i \leq 0\,(i \in \{2, 3, \ldots, r\})$ のときは, 明らかのに $\lambda_i - \dfrac{\lambda_1}{a_1} a_i > 0$ となる．以上から任意の $i \in \{1, 2, \ldots, r\}$ に対して

$$\lambda_i - \frac{\lambda_1}{a_1} a_i \geq 0$$

がわかる．さらに $\left\{\lambda_i - \dfrac{\lambda_1}{a_1}a_i\right\}_{i=1,\,2,\,\dots,\,r}$ の中の少なくとも 1 は零ではない．よって, r の最小性と矛盾する．よって, $x_1,\,x_2,\,\dots,x_r$ はアフファィン独立となるので, $r \le k+1$ がわかる． □

lem:con-13 **補題 D.13.** C を空でない $\mathbb{R}^n$ 凸閉部分集合とし, $\mathbf{0} \notin C$ とする．$\langle\cdot,\,\cdot\rangle_{2,\,n}$ を $\mathbb{R}^n$ の Euclid 内積とし, $|\cdot|_{2,\,n}$ を $\mathbb{R}^n$ の Euclid ノルムとする．

(1) $\boldsymbol{x}_0 \in C$ があって

$$|\boldsymbol{x}_0|_{2,\,n} = \min\Big\{|\boldsymbol{x}|_{2,\,n};\,\boldsymbol{x}\in C\Big\} > 0$$

となる．

(2) さらに

$$0 \le \langle \boldsymbol{x}_0,\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\rangle_{2,\,n}\,(\forall \boldsymbol{x}\in C) \tag{D.14}$$ eq:con-8a

が成立する．

Proof.

$$\delta = \inf\Big\{|\boldsymbol{x}|_{2,\,n};\,\boldsymbol{x}\in C\Big\} \ge 0$$

とおく．点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset C$ を選んで

$$\delta = \lim_{k\to\infty}|\boldsymbol{x}_k|_{2,\,n}$$

となるようにする．$\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は有界なので Bolzano-Weirstrass の定理より収束する部分列 $\{\boldsymbol{x}_{k(j)}\}_{j=1}^{\infty}$ が存在するので, この部分列の収束先を

$$\lim_{j\to\infty}\boldsymbol{x}_{k(j)} =: \boldsymbol{x}_0$$

とおく．結果

$$|\boldsymbol{x}_0|_{2,\,n} = \lim_{j\to\infty}|\boldsymbol{x}_{k(j)}|_{2,\,n} = \delta$$

となる． 部分集合 C は閉なので $\boldsymbol{x}_0 \in C$ となる． $\mathbf{0}_n \notin C$ なので $\delta > 0$ がわかる．
(2) $\boldsymbol{x}_0 \in C$ は $|\boldsymbol{x}_0|_{2,\,n} = \delta$ をみたす唯一の点であることを示すために $\boldsymbol{x}_1 \in C$ で $|\boldsymbol{x}_1|_{2,\,n} = \delta$ とする．部分集合 C の凸性から

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{x}_1) \in C$$

となる． したがって

$$\left|\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{x}_1)\right|_{2,\,n} \ge \delta$$

である．しかし

$$4\delta^2 \leq |\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{x}_1|_{2,n}^2 \leq |\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2 + |\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2 \leq 2\big\{|\boldsymbol{x}_1|_{2,n}^2+|\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2\big\} = 4\delta^2$$

より

$$|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2 = 0 \Longrightarrow \boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_0$$

である．(D.14) を示すために $\forall\boldsymbol{x}\in C$ を取る．このとき $(1-\lambda)\boldsymbol{x}_0+\lambda\boldsymbol{x}\in C\,(0\leq\lambda\leq 1)$ である．したがって

$$|\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2 \leq |(1-\lambda)\boldsymbol{x}_0+\lambda\boldsymbol{x}|_{2,n}^2 = |\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2+\lambda^2|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2+2\lambda\langle\boldsymbol{x}_0,\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\rangle_{2,n}$$

である．結果

$$0\leq\lambda|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2+2\langle\boldsymbol{x}_0,\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\rangle_{2,n}$$

がわかる．ここで，$\lambda\to 0$ とすれば (D.14) がわかる． □

df:con-14 **定義 D.14.** S_1 と S_2 を $\mathbb{R}^n$ の空でない部分集合とする．$\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}^n$, $b\in\mathbb{R}$ とする．

(1) 超平面 $\langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b$ は S_1 と S_2 を**分離**するとは次の条件をみたすときをいう．

$$\forall\boldsymbol{x}\in S_1 \Longrightarrow \langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b\geq 0,$$
$$\forall\boldsymbol{x}\in S_2 \Longrightarrow \langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b\leq 0.$$

(2) 超平面 $\langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b$ は S_1 と S_2 を**厳密に分離**するとは次の条件をみたすときをいう．

$$\forall\boldsymbol{x}\in S_1 \Longrightarrow \langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b> 0,$$
$$\forall\boldsymbol{x}\in S_2 \Longrightarrow \langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b< 0.$$

thm:con-15 **定理 D.15.** $C\subset\mathbb{R}^n$ を空でない凸閉部分集合とし，$\boldsymbol{y}\notin C$ とする．このとき C と $\boldsymbol{y}$ を厳密に分離する超平面 $\langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b\,(\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}^n,\,b\in\mathbb{R})$ が存在する．

Proof. 一般性を失うことなく $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ としてよい．左の仮定から $\boldsymbol{0}\notin C$ に注意して補題 D.13 を用いると $\boldsymbol{x}_0\in C$ があって

$$0<\delta=|\boldsymbol{x}_0|_{2,n}=\min\{|\boldsymbol{x}|_{2,n};\,\boldsymbol{x}\in C\}$$

となる．ここで $\boldsymbol{z}=(1/2)\boldsymbol{x}_0$, $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{x}_0/\delta$ とおく．超平面 $\langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{z}\rangle_{2,n}=0$ を考える．すなわち

$$\langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{x}\rangle_{2,n}+b=0,\qquad b=-\langle\boldsymbol{a},\,\boldsymbol{z}\rangle_{2,n}$$

である． $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}_n$ に対して

$$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{y} \rangle_{2,n} + b = b = -\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} = -\left\langle \frac{\boldsymbol{x}_0}{\delta}, \frac{\boldsymbol{x}_0}{2} \right\rangle_{2,n} = -\frac{|\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2}{2\delta} = -\frac{\delta}{2} < 0. \tag{D.15}$$

eq:con-8b

$\boldsymbol{x} \in C$ に対して (D.14) から

$$0 \leq \langle \boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0 \rangle_{2,n}$$

である． よって

$$0 \leq \langle \delta \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{z} \rangle_{2,n}$$

となる． 上の式の両辺を $\delta > 0$ で割れば

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} - \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} - \left\langle \frac{\boldsymbol{x}_0}{\delta}, \frac{\boldsymbol{x}_0}{2} \right\rangle_{2,n} \\ &= \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} - \frac{|\boldsymbol{x}_0|_{2,n}^2}{2\delta} \\ &= \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} - \frac{\delta}{2} \end{aligned}$$

となる． よって

$$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} \rangle_{2,n} - \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{z} \rangle_{2,n} = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} \rangle_{2,n} + b \geq \frac{\delta}{2} > 0 \tag{D.16}$$

eq:con-8c

となる． (D.15) と (D.16) より $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} \rangle_{2,n} + b$ は $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}_n$ と C を厳密に分離することが示せた． □

df:con-16

定義 D.16. $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とする．集合

$$C = \left\{ \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \boldsymbol{a}_j ;\ \lambda_j \geq 0 \, (j = 1, 2, \ldots, p) \right\}$$

を $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\}$ によって生成された**有限錐**という．

df:con-17

定義 D.17. $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\}$ が線型独立のとき，このベクトルで生成された有限錐を**基本錐**という．

lem:con-18

補題 D.18. $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ は有限錐 C を生成しているとする．$C_1, C_2, \ldots, C_q$ を $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\}$ の部分集合で生成されるすべての基本錐とする．このとき

$$C = \bigcup_{j=1}^{q} C_j$$

となる．

Proof. $C_j \subset C\,(j=1,2,\ldots,q)$ なので

$$\bigcup_{j=1}^{q} C_j \subset C$$

となる． いま $\boldsymbol{b} \in C = \{\mathbf{A}\boldsymbol{\beta};\, \boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p)^\top, \beta_j \geq 0\,(j = 1, 2, \ldots, p)\}$ を選ぶ． ただし $\mathbf{A} = (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p)$ は $n \times p$ 行列である．このとき

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{\beta} \geq \mathbf{0}_p$$

なので, 基本解 $\boldsymbol{\beta}^* = (\beta_1^*, \beta_2^*, \ldots, \beta_p^*)^\top \in \mathbb{R}^p$ が存在して

の存在について
んと書くこと．

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}^* = \boldsymbol{b}$$

となることがわかる．すなわち $\exists m \in \mathbb{N}, (1 \leq m \leq n)$ があって, $1 \leq j_1 < \cdots < j_m \leq p$ は

$$\beta_{j_\ell} > 0\,(j = 1, 2, \ldots, m)$$

で

$$\{\boldsymbol{a}_{j_1}, \boldsymbol{a}_{j_2}, \ldots, \boldsymbol{a}_{j_m}\}$$

は線型独立である．よって $\boldsymbol{b}$ は $\{\boldsymbol{a}_{j_1}, \boldsymbol{a}_{j_2}, \ldots, \boldsymbol{a}_{j_m}\}$ で生成された基本錐に含まれるので

$$\boldsymbol{b} \in \cup_{j=1}^{q} C_j$$

となる． よって

$$C \subset \bigcup_{j=1}^{q} C_j$$

となる． □

thm:con-19

定理 D.19. $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とし, C はこのベクトルで生成された有限錐とする．このとき C は凸かつ閉部分集合である．

Proof. 凸性: $\boldsymbol{c}_1, \boldsymbol{c}_2 \in C$, $0 \leq \lambda \leq 1$ とする．このとき $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2 \in \mathbb{R}^p$ が存在して

$$\boldsymbol{c}_1 = \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_1, \quad \boldsymbol{c}_2 = \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_2$$

となる． ただし $\mathbf{A} = (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p)$, $\boldsymbol{\beta}_1 \geq \mathbf{0}_p$, $\boldsymbol{\beta}_2 \geq \mathbf{0}_p$ である．したがって

$$(1-\lambda)\boldsymbol{c}_1 + \lambda\boldsymbol{c}_2 = \mathbf{A}\big((1-\lambda)\boldsymbol{\beta}_1 + \lambda\boldsymbol{\beta}_2\big)$$

となる． さらに $(1-\lambda)\boldsymbol{\beta}_1 + \lambda\boldsymbol{\beta}_2 \geq \mathbf{0}_p$ である．よって,

$$(1-\lambda)\boldsymbol{c}_1 + \lambda\boldsymbol{c}_2 \in C$$

より C は凸集合であることがわかる．

<u>C は閉集合</u>: $C_j\,(j = 1,\,2,\,\ldots,\,q)$ を独立なベクトル

$$\{\boldsymbol{a}_{j_1},\,\boldsymbol{a}_{j_2},\,\ldots,\,\boldsymbol{a}_{j_\ell}\} \subset \{\boldsymbol{a}_1,\,\boldsymbol{a}_2,\,\ldots,\,\boldsymbol{a}_p\}$$

によって生成される基本錐とする．$\{\boldsymbol{c}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は C_j の収束する点列とし, $\boldsymbol{c}_0 \in \mathbb{R}^n$ に収束するとする．

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{c}_k = \boldsymbol{c}_0.$$

$\boldsymbol{c}_0 \in C_j$ を示そう．$\{\boldsymbol{a}_{j_1},\,\boldsymbol{a}_{j_2},\,\ldots,\,\boldsymbol{a}_{j_\ell}\}$ は線型独立なので, 任意の $\boldsymbol{u} = (u_1,\,u_2,\,\ldots,\,u_\ell)^\top \in \mathbb{R}^\ell$ に対し

$$\sum_{k=1}^{\ell} u_k \boldsymbol{a}_{j_k} = \boldsymbol{0}_n \Longrightarrow \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_n$$

となる． よって上の主張の対偶を取ると $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^\ell$ で $|\boldsymbol{u}|_{2,\,\ell} = 1$ なるものに対して

$$\sum_{k=1}^{\ell} u_k \boldsymbol{a}_{j_k} \neq \boldsymbol{0}_\ell$$

となる． よって C_j は凸集合なので, 補題 D.18 より

$$\min\left\{\left|\sum_{k=1}^{\ell} u_k \boldsymbol{a}_{j_k}\right|_{2,\,\ell};\ |\boldsymbol{u}|_{2,\,\ell} = 1\right\} =: \epsilon > 0$$

がわかる． したがって ϵ の定義に注意すると $\boldsymbol{v} = (v_1,\,v_2,\,\ldots,\,v_\ell)^\top \in \mathbb{R}^\ell$ に対し

$$\left|\sum_{k=1}^{\ell} v_k \boldsymbol{a}_{j_k}\right|_{2,\,\ell} = |\boldsymbol{v}|_{2,\,\ell}\left|\sum_{j=1}^{\ell} \frac{v_k}{|\boldsymbol{v}|_{2,\,\ell}} \boldsymbol{a}_{jk}\right|_{2,\,\ell} \geq \epsilon |\boldsymbol{v}|_{2,\,\ell} \tag{D.17}$$

eq:con-8

となる．$\boldsymbol{c}_k \in C_j\,(k = 1,\,2,\,\ldots)$ に対して

$$\boldsymbol{c}_k = \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_k$$

とおけば

$$\{j_1,\,j_2,\,\ldots,\,j_\ell\} = \{j \in \{1,\,2,\,\ldots,\,p\};\,\beta_j > 0,\,\boldsymbol{\beta}_k = (\beta_1,\,\beta_2,\,\ldots,\,\beta_p)^\top\}.$$

このとき

$$\boldsymbol{c}_k = \sum_{k=1}^{\ell} \beta_{j_k} \boldsymbol{a}_{j_k}.$$

(D.17) より

$$\frac{1}{\epsilon}|\boldsymbol{c}_k|_{2,\,p} \geq |\boldsymbol{\beta}_k|_{2,\,p} \quad (k = 1,\,2,\,\ldots).$$

よって $\{\boldsymbol{c}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は収束するので, $\{\boldsymbol{\beta}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は有界. よって Bolzano-Weierstrass の定理より収束する部分列 $\{\boldsymbol{\beta}_{k_j}\}_{j=1}^{\infty}$ が取れ

$$\lim_{j\to\infty} \boldsymbol{\beta}_{k_j} =: \boldsymbol{\beta}_0$$

とする. このとき $\boldsymbol{\beta}_0 \geq \mathbf{0}$ で

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_0 = \lim_{j\to\infty} \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_{k_j} = \lim_{j\to\infty} \boldsymbol{c}_{k_j} = \boldsymbol{c}_0$$

となる. $\boldsymbol{\beta}_0$ の j_k 成分 $(k = 1, 2, \ldots, \ell)$ 以外は零なので, $\boldsymbol{c}_0 \in C_j$ となる. よって C_j は閉集合である. だから

$$C = \bigcup_{j=1}^{q} C_j$$

も閉集合となることがわかる. □

thm:con-20

定理 D.20. (Farkas の交代定理) $\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列とし, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ とする. このとき次のいずれかが成立し, 同時には成立しない.

(1) $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n$ は解 $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$ を持つ.

(2) $\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_m$, $\langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{b}\rangle_{2,m} < 0$ は解 $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{R}^m$ を持つ.

ただし $\boldsymbol{w} = (w_1, w_2, \ldots, w_n)^\top$, $\boldsymbol{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ のとき

$$\boldsymbol{w} \geq \boldsymbol{z} \Longleftrightarrow w_j \geq z_j \, (j = 1, 2, \ldots, n)$$

である.

Proof. $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^m$ は (1) の解, $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{R}^n$ は (2) の解とする. このとき

$$0 \leq \langle \boldsymbol{x}^*, \mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}^*\rangle_{2,n} = \langle \mathbf{A}\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*\rangle_{2,m} = \langle \boldsymbol{b}, \boldsymbol{y}\rangle_{2,m} < 0$$

となる. よって矛盾. (1) と (2) は同時に起こらないことがわかる.

(1) が起こらないとき, (2) が起こることを示す. 仮定より

$$\boldsymbol{b} \notin C := \{\mathbf{A}\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n\}$$

となる. C は閉凸集合なので超平面が存在して C と $\boldsymbol{b}$ を厳密に分離する. すなわち, $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m$ と $c \in \mathbb{R}$ があって

$$\boldsymbol{z} \in C \Longrightarrow \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{z}\rangle_{2,m} + c > 0 \tag{D.18}$$

eq:con-9

かつ

$$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\rangle_{2,m} + c < 0. \tag{D.19}$$

eq:con-10

$\boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n,\ \lambda > 0$ とし

$$\boldsymbol{z} := \lambda \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \mathbf{A}(\lambda \boldsymbol{x}) \in C$$

となる．eq:con-9 (D.18) より

$$\langle \boldsymbol{a},\, \lambda \mathbf{A}\boldsymbol{x}\rangle_{2,\,n} + c > 0.$$

$\lambda > 0$ で割って $\lambda \to \infty$ とすれば

$$0 \leq \langle \boldsymbol{a},\, \mathbf{A}\boldsymbol{x}\rangle_{2,\,n} = \langle \mathbf{A}^\top \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{x}\rangle_{2,\,n} \quad (\forall \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n)$$

となる．したがって

$$\mathbf{A}^\top \boldsymbol{a} \geq \mathbf{0}_n$$

となる． いま $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{a}$ とおけば, $\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n$ となる．eq:con-9 (D.18) において $\boldsymbol{z} = \mathbf{0}_n \in C$ とおけば

$$c > 0$$

となる．さらに, eq:con-10 (D.19) より

$$\langle \boldsymbol{b},\, \boldsymbol{y}\rangle_{2,\,m} = \langle \boldsymbol{b},\, \boldsymbol{a}\rangle_{2,\,m} < -c < 0$$

となる．よって $\langle \boldsymbol{b},\, \boldsymbol{y}\rangle_{2,\,n} < 0$ となる．よって, (1) が起こらなければ (2) が起こる．対偶をとれば (2) が起こらなければ (1) が起こる． □

記法: $\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列とする．

$$\ker(\mathbf{A}) := \{\boldsymbol{x};\, \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \mathbf{0}_m\} \subset \mathbb{R}^n,$$
$$\mathrm{range}(\mathbf{A}) := \{\mathbf{A}\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m\} \subset \mathbb{R}^m.$$

$S \subset \mathbb{R}^m$ としたとき

$$S^\perp := \{\boldsymbol{x} \subset \mathbb{R}^m;\, \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{s}\rangle_{2,\,m} = 0\,(\forall \boldsymbol{s} \in S)\}$$

とする．

thm:con-21 **定理 D.21.** $\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ とする．このとき次は同値である．

(1) $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は解 $\boldsymbol{x}^*$ を持つ．

(2) $\boldsymbol{b} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)^\perp$ である．

Proof. $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ が解を持つための必要十分条件は

$$\widetilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A},\, -\mathbf{A}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{v} \end{bmatrix} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{u} \geq \mathbf{0}_n,\, \boldsymbol{v} \geq \mathbf{0}_n$$

は解を持つ．これは

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{v} \end{bmatrix} = \boldsymbol{b}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{v} \end{bmatrix} \geq \mathbf{0}_{2n}$$

とした Farkas(1) である．よって

$$\text{「}\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \text{ は解 } \boldsymbol{x}^* \text{ を持つ」} \Longleftrightarrow \text{「Farkas (1) が成立」} \tag{D.20}$$

eq:con-15a

となる．

一方 Farkas(2) が成立するとき

$$\widetilde{\mathbf{A}}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n, \quad \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,n} < 0$$

が解を持つ．これは

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}^\top \\ -\mathbf{A}^\top \end{bmatrix} \boldsymbol{y} \geq \begin{bmatrix} \mathbf{0}_n \\ \mathbf{0}_n \end{bmatrix}$$

である． よって $\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n$ かつ $-\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n$ より $\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} = \mathbf{0}_n$ なので

$$\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} = \mathbf{0}_n, \quad \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,n} < 0$$

は解をもつ．

以上の議論から

1. 「$\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は解 $\boldsymbol{x}^*$ を持つ」が成立する．
2. $\widetilde{\mathbf{A}}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n, \quad \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,n} < 0$ は解をもつ．

のいずれかが成立 (同時には起こらない) することがわかる．

さらに

$$\text{Farkas (2) が起こらない} \Longleftrightarrow \boldsymbol{b} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)^\perp$$

である．なぜならば $\boldsymbol{b} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)^\perp$ ならば

$$\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} = \mathbf{0}_n \quad \text{かつ} \quad \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,n} = 0$$

なので (2) は成立しない．逆に (2) が成立しないならば Farkas(1) が成立する．eq:con-15a (D.20) より

$$\text{「Farkas (1) が起こる」} \Longleftrightarrow \text{「}\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \text{ は解 } \boldsymbol{x}^* \text{ を持つ」}$$

なので $\boldsymbol{b} = \mathbf{A}\boldsymbol{x}^*$ と書ける．よって $\forall \boldsymbol{y} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)$ に対して

$$\langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,n} = \langle \boldsymbol{y},\, \mathbf{A}\boldsymbol{x}^* \rangle_{2,\,n} = \langle \mathbf{A}^\top \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x}^* \rangle_{2,\,n} = 0$$

から $\boldsymbol{b} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)^\perp$ がわかる．

以上の議論から

$$\begin{aligned}\text{「}\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}\text{ は解 }\boldsymbol{x}^*\text{ を持つ」} &\iff \text{「Farkas(1) が成立」}\\ &\iff \text{「Farkas(2) が成立しない」}\\ &\iff \boldsymbol{b} \in \ker\bigl(\mathbf{A}^\top\bigr)^\perp\end{aligned}$$

より定理は証明された． □

D.3 共役凸関数と Young の不等式

df:con-22

定義 D.22. 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ が凸であるとは, $\forall \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ と $0 \leq \lambda \leq 1$ に対して

$$f\bigl(\lambda \boldsymbol{x} + (1-\lambda)\boldsymbol{y}\bigr) \leq \lambda f(\boldsymbol{x}) + (1-\lambda) f(\boldsymbol{y})$$

が成り立つときをいう．

re:con-23

注意 D.23. 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ が凸であるための必要十分条件はそのエピグラフ

$$E = \left\{ \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ y \end{bmatrix} : \, y \geq f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \right\} \subset \mathbb{R}^{n+1}$$

が凸集合となることである．

$m \in \mathbb{N}$ とする．関数 f が凸のとき, 帰納法により $\boldsymbol{x}_1,\, \boldsymbol{x}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{x}_m \in \mathbb{R}^n$ と $\lambda_1,\, \lambda_2,\, \ldots,\, \lambda_m \geq 0$ で $\sum_{k=1}^m \lambda_k = 1$ に対して

$$f\left(\sum_{k=1}^m \lambda_k \boldsymbol{x}_k \right) \leq \sum_{k=1}^m \lambda_k f(\boldsymbol{x}_k)$$

が成り立つ． □

thm:con-24

定理 D.24. (1) 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は連続微分可能とする．関数 f が凸となるための必要十分条件は $\forall \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}_0) + \bigl\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_0),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0 \bigr\rangle_{2,\,n} \leq f(\boldsymbol{x})$$

が成り立つことである．ただし

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}),\, \frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}),\, \ldots,\, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x})\right)^\top,$$
$$\boldsymbol{x} = (x_1,\, x_2,\, \ldots,\, x_n)^\top$$

である．

(2) 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は 2 回連続微分可能とする．関数 f が凸であるための必要十分条件は $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \succeq \mathbf{0}_{n\times n}$$

が成り立つことである．ただし，$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \succeq \mathbf{0}_{n\times n}$ は $\forall \boldsymbol{y} = (y_1,\, y_2,\, \ldots,\, y_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\boldsymbol{y}^\top \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{y} = \sum_{i,\,j=1}^{n} \frac{\partial f^2}{\partial x_i \partial x_j}(\boldsymbol{x}) y_i y_j \geq 0$$

が成り立つことである．

Proof. まず, 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸であるための必要十分条件は $\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して, 関数

$$\phi(t) := f(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{y}) \qquad (t \in \mathbb{R}) \tag{D.21}$$ eq:con-14

が凸であることである．

まず, 関数 f は凸でとし, 関数 ϕ は凸であることを示す．そのために, $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$, $0 \leq \lambda \leq 1$, $s, t \in \mathbb{R}$ を取り,

$$\boldsymbol{w} := \boldsymbol{x} + s\boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{z} := \boldsymbol{x} + t\boldsymbol{y}$$

とおく．このとき

$$f\big(\lambda \boldsymbol{w} + (1-\lambda)\boldsymbol{z}\big) \leq \lambda f(\boldsymbol{w}) + (1-\lambda) f(\boldsymbol{z}) = \lambda\phi(s) + (1-\lambda)\phi(t) \tag{D.22}$$ eq:con-15

となる． また

$$f\big(\lambda \boldsymbol{w} + (1-\lambda)\boldsymbol{z}\big) = f\big(\boldsymbol{x} + \{\lambda t + (1-\lambda)s\}\boldsymbol{y}\big) = \phi(\lambda t + (1-\lambda)s) \tag{D.23}$$ eq:con-16

となる．よって，(D.22) eq:con-15 と (D.23) eq:con-16 を考慮すると ϕ は凸関数であることがわかる．

逆を示す．$0 \leq \lambda \leq 1, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ とする．(D.21) eq:con-14 において, $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ は任意だったので, $\boldsymbol{y}$ と $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}$ とする．すると

$$\phi(t) = f\big(\boldsymbol{y} + t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})\big)$$

とおく. 関数 ϕ は凸だから

$$\begin{aligned} f\big(\lambda\boldsymbol{x}+(1-\lambda)\boldsymbol{y}\big) &= f\big(\boldsymbol{y}+\lambda(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\big) = \phi(\lambda) \\ &= \phi\big((1-\lambda)\times 0+\lambda\times 1\big) \\ &\leq (1-\lambda)\phi(0)+\lambda\phi(1) \\ &= (1-\lambda)f(\boldsymbol{y})+\lambda f(\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$

となる. よって $\forall \boldsymbol{x},\,\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$ に対して関数

$$\mathbb{R}\ni t\mapsto \phi(t)=f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{y})$$

が凸関数ならば f も凸関数であることがわかる.
2. 凸関数 $\phi(t)=f\big(\boldsymbol{x}_0+t\boldsymbol{y}\big)$ に対して

$$\phi(t)+\dot{\phi}(t)(s-t)\leq\phi(s)\quad(\forall s,\,t\in\mathbb{R})$$

である. ただし $\dot{\phi}(t)=\dfrac{d\phi}{dt}=\langle\nabla f\big(\boldsymbol{x}_0+t\boldsymbol{y}\big),\,\boldsymbol{y}\rangle_{2,\,n}$ である. ここで $s=1,\,t=0$ とおくと

$$\phi(0)+\dot{\phi}(0)\leq\phi(1)\Longleftrightarrow f(\boldsymbol{x}_0)+\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_0),\,\boldsymbol{y}\big\rangle_{2,\,n}\leq f\big(\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{y}\big)$$

となる. 上式に $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0$ を代入すると

$$f(\boldsymbol{x}_0)+\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_0),\,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0\big\rangle_{2,\,n}\leq f(\boldsymbol{x})$$

を得る.
3. 凸関数 $\phi(t)=f\big(\boldsymbol{x}_0+t\boldsymbol{y}\big)$ は

$$\ddot{\phi}(t)\geq 0$$

をみたす. このとき

$$\dot{\phi}(t)=\big\langle\nabla f\big(\boldsymbol{x}_0+t\boldsymbol{y}\big),\,\boldsymbol{y}\big\rangle_{2,\,n},\quad \ddot{\phi}(t)=\boldsymbol{y}^\top\nabla^2 f\big(\boldsymbol{x}_0+t\boldsymbol{y}\big)\boldsymbol{y}$$

となる. ただし $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\left(\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_i\partial x_j}\right)_{i,\,j=1,\,2,\,\dots,\,n}$ である. $t=0$ とおくと

$$\boldsymbol{y}^\top\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_0)\boldsymbol{y}\geq 0\quad(\forall y\in\mathbb{R}^n)$$

がわかる. □

df:con-25 **定義 D.25.** 関数 $f:\mathbb{R}^n\longrightarrow\mathbb{R}$ は凸とする. 各 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ に対して

$$\partial f(\boldsymbol{x})=\big\{\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^n;\,f(\boldsymbol{x})+\langle\boldsymbol{r},\,\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\rangle_{2,\,n}\leq f(\boldsymbol{y})\,(\forall\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n)\big\}$$

とおく. この集合を点 $\boldsymbol{x}$ における凸関数 f の**劣微分**という.

re:con-26 **注意 D.26.** 凸関数 $f:\mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は点 $\boldsymbol{x}$ で連続微分可能なとき

$$\partial f(\boldsymbol{x}) = \{\nabla f(\boldsymbol{x})\}$$

となる．一般に, $\partial f(\boldsymbol{x})$ は 1 つの元よりも多い元をもつことがある． □

ex:con-27 **例 D.27.** (1) $n=1,\ f(x)=|x|$ とする．このとき

$$\partial f(x) = \begin{cases} \{1\} & (x>0) \\ [-1,\,1] & (x=0) \\ \{-1\} & (x<0) \end{cases}$$

となる．
(2) $n>1,\ f(\boldsymbol{x}) = |\boldsymbol{x}|_{2,n}$ とする．このとき

$$\partial f(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \left\{ \dfrac{\boldsymbol{x}}{|\boldsymbol{x}|_{2,n}} \right\} & (\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}_n) \\ B(1) & (\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}_n). \end{cases}$$

となる．ただし $B(1) := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n;\ |\boldsymbol{x}|_{2,n} = 1\}$ である．
　実際, $\forall \boldsymbol{r} \in \partial f(\boldsymbol{0}_n)$ は $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$|\boldsymbol{0}_n|_{2,n} + \langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{0}_n \rangle_{2,n} \leq |\boldsymbol{x}|_{2,n}$$

を意味する．$|\langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,n}| \leq |\boldsymbol{r}|_{2,n} \times |\boldsymbol{x}|_{2,n}$ から

$$\langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,n} \leq |\boldsymbol{x}|_{2,n} \Longleftrightarrow |\boldsymbol{r}|_{2,n} \leq 1$$

となる． □

thm:con-28 **定理 D.28.** 関数 $f:\mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸とする．各 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\partial f(\boldsymbol{x})\,\text{は凸閉集合}$$

である．

Proof. 明らかに $\partial f(\boldsymbol{x})$ は凸集合である．これが閉集合であることを示すために

$$\{\boldsymbol{r}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \partial f(\boldsymbol{x}) \quad \text{かつ} \quad \boldsymbol{r}_0 = \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{r}_k$$

を取る．$\boldsymbol{r}_k \in \partial f(\boldsymbol{x})\,(k=1,\,2,\,\ldots)$ だから $\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{r}_k,\, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,n} \leq f(\boldsymbol{x})$$

となる．$k \to \infty$ とすれば, $\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{r}_0,\, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,n} \leq f(\boldsymbol{y})$$

となるから $\boldsymbol{r}_0 \in \partial f(\boldsymbol{x})$ となる．よって $\partial f(\boldsymbol{x})$ は閉集合となる． □

thm:con-29 **定理 D.29.** 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸とする．このとき，各 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $\partial f(\boldsymbol{x}) \neq \varnothing$ となる．

Proof. 凸関数 f のエピグラフ[3] E は凸閉集合なので正の整数 k に対して

$$\boldsymbol{e}_k := \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ f(\boldsymbol{x}) - \dfrac{1}{k} \end{bmatrix} \notin E$$

である．分離定理 (定理 D.15) よりある超平面

$$\langle \boldsymbol{a}_k,\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} + d_k \, (\boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^{n+1},\, d_k \in \mathbb{R})$$

は $\boldsymbol{e}_k$ と E を厳密に分離する．

$$\boldsymbol{a}_k = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_k \\ c_k \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}_k \in \mathbb{R}^n, \quad c_k \in \mathbb{R}$$

と書くと

$$\langle \boldsymbol{a}_k,\, \boldsymbol{e}_k \rangle_{2,\,n} + d_k < 0, \tag{D.24}$$ eq:con-17

$$\langle \boldsymbol{a}_k,\, \boldsymbol{z} \rangle_{2,\,n} + d_k > 0 \qquad (\forall \boldsymbol{z} \in E) \tag{D.25}$$ eq:con-18

となる．(D.24) は

$$\langle \boldsymbol{b}_k,\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} + c_k \left(f(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{k} \right) + d_k < 0 \tag{D.26}$$ eq:con-19

となる． $\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y} \\ f(\boldsymbol{y}) \end{bmatrix} \in E$$

なので

$$\langle \boldsymbol{b}_k,\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} + c_k f(\boldsymbol{y}) + d_k > 0 \tag{D.27}$$ eq:con-20

となる． (D.26) を -1 倍して (D.27) に加わえると $\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\langle \boldsymbol{b}_k,\, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} + c_k \left(f(\boldsymbol{y}) - f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{k} \right) > 0 \tag{D.28}$$ eq:con-21

となる． (D.28) に $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}$ を代入すると

$$\frac{c_k}{k} > 0 \quad \Longrightarrow \quad c_k > 0$$

[3] epigraph の epi は「上の」という意味の接頭語．

となる． したがって eq:con-21 (D.28) は $\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\boldsymbol{y}) + \frac{1}{k} \geq -\left\langle \frac{\boldsymbol{b}_k}{c_k},\, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \right\rangle_{2,\,n} + f(\boldsymbol{x}) \tag{D.29}$$

eq:con-22

を意味する．ここで

$$\boldsymbol{r}_k = -\frac{1}{c_k}\boldsymbol{b}_k$$

とおく．

次に $\{\boldsymbol{r}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathbb{R}^n$ は有界であることを示す．$|\boldsymbol{r}_k|_2 \neq 0$ ならば eq:con-22 (D.29) において

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x} + \frac{\boldsymbol{r}_k}{|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n}}$$

とおく[4]と

$$f\left(\boldsymbol{x} + \frac{\boldsymbol{r}_k}{|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n}}\right) + \frac{1}{k} \geq |\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n} + f(\boldsymbol{x})$$

となる． よって $k = 1,\, 2,\, \ldots$ に対して

$$|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n} \leq 1 + \max_{|\boldsymbol{u}|_{2,\,n}=1} \left|f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{u})\right| + f(\boldsymbol{x}) =: M$$

となる．よって $\{\boldsymbol{r}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は有界であることがわかる．

Bolzano-Weirstrass の定理より収束する部分列 $\{\boldsymbol{r}_{k(j)}\}_{j=1}^{\infty}$ が取れる．

$$\boldsymbol{r}_0 := \lim_{j\to\infty} \boldsymbol{r}_{k(j)}$$

とおく．eq:con-22 (D.29) において $k = k_j \to \infty\,(j \to \infty)$ とすれば

$$f(\boldsymbol{y}) \geq \langle \boldsymbol{r}_0,\, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}\rangle_{2,\,n} + f(\boldsymbol{x}) \quad (\forall \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n)$$

を得る．よって $\boldsymbol{r}_0 \in \partial f(\boldsymbol{x})$ がわかる．したがって $\partial f(\boldsymbol{x}) \neq \varnothing$ が示せた．
□

以降, この節では関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸で

$$\lim_{|\boldsymbol{x}|_{2,\,n}\to\infty} \frac{f(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}|_{2,\,n}} = +\infty \tag{D.30}$$

eq:con-11

をみたすとする．これを**超線型成長条件**という．

[4]定義から $|\boldsymbol{b}_k|^2 = c_k^2|\boldsymbol{r}_k|^2$ である．

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{b}_k}{c_k},\, \frac{\boldsymbol{r}_k}{|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n}} \right\rangle_{2,\,n} = \left\langle \frac{\boldsymbol{b}_k}{c_k},\, -\frac{\boldsymbol{b}_k}{c_k|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n}} \right\rangle_{2,\,n} = -\frac{|\boldsymbol{b}_k|_{2,\,n}^2}{c_k^2|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n}} = -|\boldsymbol{r}_k|_{2,\,n}$$

になることに注意する．

df:con-30 **定義 D.30.** $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$f^*(\boldsymbol{y}) = \max_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \bigl\{ \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x}) \bigr\}$$

とする．f^* を f **の凸共役関数**という．

re:con-31 **注意 D.31.** $n = 1,\ f(x) = x^2/2\,(x \in \mathbb{R})$ とする．このとき $y \in \mathbb{R}$ に対し

$$f^*(y) = \max_x \left(xy - \frac{x^2}{2} \right) = \frac{y^2}{2}$$

となる．
(2) $n = 1,\ 1 < p < \infty,\ f(x) = |x|^p/p$ とする．このとき $y \in \mathbb{R}$ に対し

$$f^*(y) = \max_x \left(xy - \frac{|x|^p}{p} \right) = \frac{|y|^q}{q}, \qquad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$$

となる．
$\because$) y を固定し

$$g(x) = xy - \frac{|x|^p}{p}$$

とする．すると $\dot{g}(x) = y - |x|^{p-1}\mathrm{sgn}(x)$ となる．ただし

$$\mathrm{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ -1 & (x < 0) \\ 0 & (x = 0) \end{cases}$$

とした．したがって

$$0 = \dot{g}(x) \Longleftrightarrow y = |x|^{p-1}\mathrm{sgn}(x) \Longrightarrow x = |y|^{1/(p-1)}\mathrm{sgn}(y)$$

となる． 結果

$$\begin{aligned} f^*(y) &= \bigl(|y|^{1/(p-1)}\mathrm{sgn}(y)\bigr)y - \frac{\Bigl||y|^{1/(p-1)}\mathrm{sgn}(y)\Bigr|^p}{p} = |y|^{\frac{1}{1-p}+1} - \frac{|y|^{\frac{p}{p-1}}}{p} \\ &= \left(1 - \frac{1}{p}\right)|y|^{\frac{p}{p-1}} = \frac{|y|^q}{q} \end{aligned}$$

がわかる． □

lem:con-33 **補題 D.32.** $\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} \leq f(\boldsymbol{x}) + f^*(\boldsymbol{y}) \tag{D.31}$$ eq:con-31a

である． これを Fenchel-Young **双対**という．

Proof. 双対関数の定義 (定義 D.30) よりわかる. □

thm:con-33 **定理 D.33.** (1) $f^*: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸関数である.
(2) $\displaystyle\lim_{|\boldsymbol{y}|_{2,n}\to\infty} \frac{|f^*(\boldsymbol{y})|_{2,n}}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}} = +\infty$ となる.
(3) $f^{**} = f$ である.

Proof. 任意の $\boldsymbol{y}, \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n$, $0 \leq \lambda \leq 1$ に対し

$$\begin{aligned} f^*\bigl(\lambda\boldsymbol{y} + (1-\lambda)\boldsymbol{w}\bigr) &= \max_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Bigl(\langle\lambda\boldsymbol{y} + (1-\lambda)\boldsymbol{w},\, \boldsymbol{x}\rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\Bigr) \\ &= \max_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Bigl(\lambda\bigl\{\langle\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x}[rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\bigr\} + (1-\lambda)\bigl\{\lambda\langle\boldsymbol{w},\, \boldsymbol{x}\rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\bigr\}\Bigr) \\ &\leq \lambda\max_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Bigl(\langle\boldsymbol{y},\, \boldsymbol{x}\rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\Bigr) + (1-\lambda)\max_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Bigl(\langle\boldsymbol{w},\, \boldsymbol{x}\rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\Bigr) \\ &= \lambda f^*(\boldsymbol{y}) + (1-\lambda)f^*(\boldsymbol{w}) \end{aligned}$$

がわかる. したがって 関数 f^* は凸である.
2. 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}) + f^*(\boldsymbol{y}^*) \geq \langle\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}\rangle_{2,n}$$

であった. ここで, $\boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{0}$ と $\lambda > 0$ に対し

$$\boldsymbol{x} = \frac{\lambda\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}}$$

とおく. このとき

$$f^*(\boldsymbol{y}) \geq \left\langle\frac{\lambda\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}},\, \boldsymbol{y}\right\rangle_{2,n} - f\left(\frac{\lambda\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}}\right) \geq \lambda|\boldsymbol{y}|_{2,n} - \max_{|\boldsymbol{u}|_{2,n}=\lambda} f(\boldsymbol{u}).$$

となることがわかる. したがって

$$\frac{f^*(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}} \geq \lambda - \frac{1}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}}\max_{|\boldsymbol{u}|_{2,n}=\lambda} f(\boldsymbol{u})$$

となる. ここで

$$\liminf_{|\boldsymbol{y}|_{2,n}\to\infty}\frac{f^*(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{y}|_{2,n}} \geq \lambda > 0$$

を得る. 最後に $\lambda \to \infty$ とすれば, (2) がわかる.
(3). まず, $f(\boldsymbol{x}) + f^*(\boldsymbol{y}) \geq \langle\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}\rangle_{2,n}$ から

$$f(\boldsymbol{x}) \geq \max_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n}\Bigl(\langle\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}\rangle_{2,n} - f^*(\boldsymbol{y})\Bigr) = f^{**}(\boldsymbol{x}) \tag{D.32}$$ eq:con-25

となることに注意する． 逆に, 定理 D.29 から $\partial f(\boldsymbol{x}) \neq \varnothing$ であることがわかる． このことから $\boldsymbol{r} \in \partial f(\boldsymbol{x})$ を取る．すると $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\boldsymbol{z}) \geq f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{z} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n}$$

となる． 上の式を書きかえると

$$\langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x}) \geq \langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{z} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{z})$$

を得る．よって

$$\langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x}) = \max_{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n} \Big(\langle \boldsymbol{r},\, \boldsymbol{z} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{z}) \Big) = f^*(\boldsymbol{r}) \tag{D.33}$$ eq:con-24

がわかる． さらに, (D.33) から

$$f^{**}(\boldsymbol{x}) = \max_{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n} \Big(\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} - f^*(\boldsymbol{y}) \Big) \geq \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{r} \rangle_{2,\,n} - f^*(\boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{x}) \tag{D.34}$$ eq:con-26

がわかる． よって, (D.32) と (D.34) から $f^{**} = f$ がわかる． □

thm:con-34 **定理 D.34.** $\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して次の条件は同値である．

(1) $\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} = f(\boldsymbol{x}) + f^*(\boldsymbol{y})$.

(2) $\boldsymbol{y} \in \partial f(\boldsymbol{x})$.

(3) $\boldsymbol{x} \in \partial f^*(\boldsymbol{y})$.

Proof. (1) $\Longrightarrow$ (2) **の証明**. 任意の $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x}) = f^*(\boldsymbol{y}) \geq \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{z} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{z})$$

となる．上の式の最左辺と最右辺から $\forall \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$f(\boldsymbol{z}) \geq \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{z} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} + f(\boldsymbol{x})$$

を得る．よって

$$\boldsymbol{y} \in \partial f(\boldsymbol{x})$$

が示せた．
(2) $\Longrightarrow$ (1) **の証明**. $\boldsymbol{y} \in \partial f(\boldsymbol{x})$ のとき, $\forall \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$f(\boldsymbol{z}) \geq \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{z} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,n} + f(\boldsymbol{z}) \quad \Longrightarrow \quad \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x}) \geq \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{z} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{z})$$

となる．よって

$$\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x}) \geq \max_{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n} \Big(\langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{z} \rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{z}) \Big) = f^*(\boldsymbol{y}) \tag{D.35}$$ eq:con-31b

から

$$\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\, n} \geq f(\boldsymbol{x}) + f^{*}(\boldsymbol{y})$$

を得る．Fenchel-Young の不等式 eq:con-31a (D.31) から

$$\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\, n} \leq f(\boldsymbol{x}) + f^{*}(\boldsymbol{y}) \tag{D.36}$$

eq:con-31c

である． よって, eq:con-31b (D.35) と eq:con-31c (D.36) を合わせると

$$\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\, n} = f(\boldsymbol{x}) + f^{*}(\boldsymbol{y})$$

が示せた．

(1) $\Longleftrightarrow$ (3) も同様に示すことができる． □

D.4 非線形最適化と KKT 条件

$n,\, p \in \mathbb{N}$ とし, $f,\, h_1,\, h_2,\, \ldots,\, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は連続微分可能とする．次の記号を導入する．

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_p \end{bmatrix},$$

$$\nabla \boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} \left(\nabla h_1\right)^{\top} \\ \left(\nabla h_2\right)^{\top} \\ \vdots \\ \left(\nabla h_p\right)^{\top} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial h_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial h_1}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial h_1}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial h_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial h_2}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial h_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial h_p}{\partial x_1} & \dfrac{\partial h_p}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial h_p}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

この節では, 制約付く最適化問題

$$\operatorname{minimize} f(\boldsymbol{x}) \qquad \text{subject to} \quad \boldsymbol{h} \leq \boldsymbol{0}_p \tag{D.37}$$

eq:con-27

の解 $\boldsymbol{x}^{*}$ をみつけたい．ただし $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0}_p$ は $\forall j \in \{1,\, 2,\, \ldots,\, p\}$ に対して $h_j(\boldsymbol{x}) \leq 0$ が成立していることである．

$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0}_p$ をみたす点 $\boldsymbol{x}^{*}$ を**実行可能解**という．実行可能解 $\boldsymbol{x}^{*}$ に対して $h_j(\boldsymbol{x}^{*}) = 0$ となる制約式を**有効制約式**という．解 $\boldsymbol{x}^{*}$ に対する有効制約式の添え字集合を J と書く．すなわち

$$J = \{j \in \{1,\, 2,\, \ldots,\, p\};\, h_j(\boldsymbol{x}^{*}) = 0\}$$

である．

記号 関数 $\boldsymbol{r} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^n$ に対して

$$\boldsymbol{r} = o(t) \iff \lim_{t \to 0+} \frac{|\boldsymbol{r}(t)|_{2,n}}{t} = 0$$

と定める.

df:con-35 **定義 D.35.** $\boldsymbol{x}^*$ における制約 qualification 条件 (CQ 条件) が成立するとは

$$\left\langle \boldsymbol{y}, \nabla h_j(\boldsymbol{x}) \right\rangle_{2,n} \leq 0 \qquad (j \in J) \tag{D.38}$$ eq:con-28

をみたす $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ にたいしてある正数 t_0 と連続曲線 $\{\boldsymbol{x}(t), 0 \leq t < t_0\}$ があって

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0}_p \qquad (0 \leq t < t_0) \tag{D.39}$$ eq:con-29

かつ

$$\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}^* + t\boldsymbol{y} + o(t) \qquad (t \to 0+) \tag{D.40}$$ eq:con-30

が成立するときをいう.

re:con-36 **注意 D.36.** 条件 eq:con-29 (D.39) は $\boldsymbol{x}(t)\,(0 \leq t < t_0)$ は実行可能解であることを保証している. eq:con-30 (D.40) は $\boldsymbol{x}(t)$ の $t = 0$ における右微分係数ベクトル $\dot{\boldsymbol{x}}(0)$ が存在し

$$\dot{\boldsymbol{x}}(0) = \boldsymbol{y}$$

であることを保証している. □

thm:con-37 **定理 D.37.** (Karush-Kuhn-Tucker(KKT) 条件) $\boldsymbol{x}^*$ は問題 eq:con-27 (D.37) の解とし, $\boldsymbol{x}^*$ において CQ 条件は成立しているとする. このとき実数 $\lambda_1^*, \lambda_2^*, \ldots, \lambda_p^*$ が存在して

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_n \tag{D.41}$$ eq:con-31

が成立する. さらに $\boldsymbol{\lambda}^* := (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \ldots, \lambda_p^*)^\top$ は

$$\boldsymbol{\lambda}^* \geq \boldsymbol{0}_p, \quad \left\langle \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,p} = 0 \tag{D.42}$$ eq:con-32

をみたしている;

注意 D.38. 条件 eq:con-31 (D.41) と eq:con-32 (D.42) を合わせて Karush-Kuhn-Tuckeer 条件 (KKT 条件) という. eq:con-32 (D.42) は

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)^\top \boldsymbol{\lambda}^* = \boldsymbol{0}_n$$

とも表すことができる. $\boldsymbol{\lambda}^*$ は Lagrange 乗数という. $\left\langle \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,n} = 0$ を相補性条件という. 定理の証明からわかることであるが $\lambda_j^* = 0$ か $h_j(\boldsymbol{x}^*) = 0$ のいずれかが成立しているのでこのように呼んでいる. □

Proof. **定理 D.37 の証明**. ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ は (D.40) をみたしているとする. CQ 条件で保証されている $\boldsymbol{y}$ に対応する曲線を $\{\boldsymbol{x}(t);\, 0 \leq t < t_0\}$ とする. いま

$$\phi(t) := f(\boldsymbol{x}(t)) \tag{D.43}$$

eq:con-32a

とおく. このとき $\boldsymbol{x}^*$ は問題 (D.37) の解なので

$$\phi(0) = f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\boldsymbol{x}(t)) = \phi(t) \quad (0 \leq t < t_0)$$

が成り立つ. したがって ϕ は $t = 0$ で最小値を取るので

$$\dot{\phi}(0) \geq 0$$

となる. さらに, (D.43) を t に関して微分して, $t = 0$ を代入すると

$$\dot{\phi}(0) = \langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \dot{\boldsymbol{x}}(0) \rangle_{2,n} = \langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,n}$$

を得る. この式から (D.38) をみたす $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,n} \geq 0$$

となるとなることがわかる. よって

$$\langle \boldsymbol{y},\, \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,n} \leq 0\,(j \in J) \Longrightarrow \langle \boldsymbol{y},\, \nabla f(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,n} \geq 0 \tag{D.44}$$

eq:con-33

を示せた. ここで Farkas の交代定理 (定理 D.20) を思い出す. 以下の (1) か (2) のいずれかは成立する.

(1) $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},\, \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n$ は解 $\boldsymbol{x}$ を持つ.

(2) $\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n,\, \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,n} < 0$ は解を持つ.

さらに (1) と (2) は同時に成立しない. ただし, $\mathbf{A}$ は $n \times n$ 行列である. $J = \{j_1,\, j_2,\, \ldots,\, j_k\}$ と書き

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= -\big[\nabla h_{j_1}(\boldsymbol{x}^*),\, \nabla h_{j_2}(\boldsymbol{x}^*),\, \ldots,\, \nabla h_{j_k}(\boldsymbol{x}^*)\big], \\ \boldsymbol{b} &= \nabla f(\boldsymbol{x}^*) \end{aligned}$$

に対して Farkas の交代定理を適用する. (D.44) は

$$\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}_n \Longrightarrow \langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,n} \geq 0$$

を主張しているので, Farkas 交代定理の (2) は成立しない. 結果 Farkas 交代定理の (1) が成立する. つまり $\sigma_j \geq 0\,(j \in J)$ が存在して

$$-\sum_{j \in J} \sigma_j \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \nabla f(\boldsymbol{x}^*)$$

が成り立つ. そこで $\boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \ldots, \lambda_p^*)^\top$ を

$$\lambda_j^* = \begin{cases} \sigma_j & (j \in J) \\ 0 & (j \notin J) \end{cases}$$

と定めると $j \in J$ のとき $h_j(\boldsymbol{x}^*) = 0$, $j \notin J$ のとき, $\lambda_j^* = 0$ なので

$$\langle \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,p} = 0$$

となる. さらに Frakas の交代定理の (1) から

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\lambda}^* \geq \mathbf{0}_p, \\ &\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}_n \end{aligned}$$

もわかる. □

re:con- **注意 D.39.** CQ 条件をみたす制約の例を上げておく

(1) $\{h_j\}_{j=1}^p$ は $\boldsymbol{x}$ の線型関数.

(2) $\{\nabla h_j(\boldsymbol{x}^*)\}_{j\in J}^p$ は $\mathbb{R}^n$ の線型独立なベクトル.

これらが CQ 条件をみたすことの証明は Evans の pp.115-117 を参照のこと. □

D.5 Lagrange 乗数についてのさらなる議論

$f, g_1, g_2, \ldots, g_m, h_1, h_2, \ldots, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ 連続微分可能とし

$$\boldsymbol{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_p \end{bmatrix}$$

とおく. この節では, 下記の最小化問題

$$\text{minimize} \quad f(\boldsymbol{x}) \qquad \text{subject to} \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}_m \text{ and } \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \mathbf{0}_p. \quad \text{(D.45)}$$ eq:con-34

を考える.

thm:con-40 **定理 D.40.** $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$ は問題 (D.45) の解とする．このとき実数の組

$$\gamma^*, \quad \boldsymbol{\mu}^* = (\mu_1^*, \mu_2^*, \ldots, \mu_m^*)^\top, \quad \boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^*, \quad \lambda_2^*, \ldots, \lambda_p^*)^\top$$

が存在し，これはすべては 0 に同時になることはなく，さらに

$$\gamma^* \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{k=1}^{m} \mu_k^* \nabla g_k(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}_n \tag{D.46}$$ eq:con-35

と

$$\gamma^* \geq 0, \quad \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}_p, \quad \langle \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,p} = 0 \tag{D.47}$$ eq:con-36

をみたす．

re:com-41 **注意 D.41.** (1) (D.46) は

$$\gamma^* \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)^\top \boldsymbol{\mu}^* + \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0}_n$$

と書き直すことができる．ただし

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_p \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix},$$

$$\nabla \boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} (\nabla h_1)^\top \\ (\nabla h_2)^\top \\ \vdots \\ (\nabla h_p)^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1} & \frac{\partial h_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial h_2}{\partial x_1} & \frac{\partial h_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial h_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_p}{\partial x_1} & \frac{\partial h_p}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial h_p}{\partial x_n} \end{bmatrix},$$

$$\nabla \boldsymbol{g} = \begin{bmatrix} (\nabla g_1)^\top \\ (\nabla g_2)^\top \\ \vdots \\ (\nabla g_m)^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_m}{\partial x_1} & \frac{\partial g_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

である．
(2) $\gamma^* = 1$ のとき (D.46) と (D.47) は

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)^\top \boldsymbol{\mu}^* + \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0}_n \tag{D.48}$$ eq:con-37

と

$$\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}_p, \quad \langle \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,p} = 0 \tag{D.49}$$

eq:con-38

となり KKT 条件となる.

$\gamma^* \neq 0$ のときは γ^* または $-\gamma^*$ で割ることで (D.46) と (D.47) を KKT 条件に直すことができる.

$\gamma^* = 0$ のとき, 異常な乗数とよぶ. □

Proof. **(定理 D.40 の証明)**. $k = 1, 2, \ldots$ に対して

$$F_k(\boldsymbol{x}) := f(\boldsymbol{x}) + \frac{k}{2}\left(|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})|_{2,m}^2 + |\boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x})|_{2,p}^2 \right)^2 + \frac{1}{2}|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*|_{2,n}$$

とおく. ただし $\ell = 1, 2, \ldots, p$ に対し

$$h_\ell^+(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} h_\ell(\boldsymbol{x}) & (h_\ell(\boldsymbol{x}) \geq 0 \text{ の場合}) \\ 0 & (h_\ell(\boldsymbol{x}) = 0 \text{ の場合}) \end{cases}$$

である. ここで $B = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n ;\, |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*|_{2,n} \leq 1\}$ とおく. すると B はコンパクトで F_k は連続関数なので, 点 $\boldsymbol{x}_k \in B$ があって

$$F_k(\boldsymbol{x}_k) = \min_{\boldsymbol{x} \in B} F_k(\boldsymbol{x})$$

が成り立つ. したがって

$$F_k(\boldsymbol{x}_k) \leq F_k(\boldsymbol{x}^*)$$

である. さらに $\boldsymbol{x}^*$ は問題 (D.45) の解なので, $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}_m$ かつ $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \leq \mathbf{0}_p$ となる. よって h_ℓ^+ の定義から $\boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}_p$ となる. したがって

$$f(\boldsymbol{x}_k) + \frac{k}{2}\left(|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)|_{2,m}^2 + |\boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}_k)|_{2,p}^2 \right) + \frac{1}{2}|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*|_{2,n}^2 = F_k(\boldsymbol{x}_i) \tag{D.50}$$

$$\leq F_k(\boldsymbol{x}^*) = f(\boldsymbol{x}^*) + \frac{k}{2}\left(\underbrace{|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)|_{2,m}^2}_{=0} + \underbrace{|\boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}^*)|_{2,p}^2}_{=0} \right) = f(\boldsymbol{x}^*) \tag{D.51}$$

eq:con-39

が成り立つ. したがって, $\left\{ \frac{k}{2}|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)|_{2,m} \right\}_{k=1}^{\infty}$ と $\left\{ \frac{k}{2}|\boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}_k)|_{2,p} \right\}_{k=1}^{\infty}$ は有界なので

$$\lim_{k \to \infty} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k) = \mathbf{0}_m, \quad \lim_{k \to \infty} \boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}_k) = \mathbf{0}_p \tag{D.52}$$

eq:con-40

となる. そうでなければ, $\{k/2\}_{k=1}^{\infty}$ は発散するので, $\left\{ \frac{k}{2}|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)|_{2,m} \right\}_{k=1}^{\infty}$ と $\left\{ \frac{k}{2}|\boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}_k)|_{2,p} \right\}_{k=1}^{\infty}$ にはならない. さらに Bolzano-Weirstrass の定理

から $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset B$ から収束する部分列 $\{\boldsymbol{x}_{k(j)}\}_{j=1}^{\infty}$ を選ぶことができることがわかる．以上から

$$\lim_{j\to\infty} \boldsymbol{x}_{k(j)} = \overline{\boldsymbol{x}} \in B$$

と書くことにする．(D.51) は

$$f(\boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*|_{2,n}^2 \leq f(\boldsymbol{x}^*)$$

となる．したがって

$$f(\overline{\boldsymbol{x}}) + \frac{1}{2}|\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*|_{2,n}^2 \leq f(\boldsymbol{x}^*) \tag{D.53}$$

eq:con-41

となる．しかし (D.52) から

$$\boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{0}_p, \quad \text{かつ} \quad \boldsymbol{g}(\overline{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{0}_m$$

となるので，$\overline{\boldsymbol{x}}$ も実行可能となる．したがって

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\overline{\boldsymbol{x}}) \tag{D.54}$$

eq:con-42

を得る．(D.53) と (D.54) を合わせると

$$f(\boldsymbol{x}^*) + \frac{1}{2}|\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*|_{2,n} \leq f(\overline{\boldsymbol{x}}) + \frac{1}{2}|\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*|_{2,n} \leq f(\boldsymbol{x}^*) \iff |\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*|_{2,n} = 0$$

を得る．したがって

$$\boldsymbol{x}^* = \overline{\boldsymbol{x}}$$

がわかる．収束する部分列 $\{\boldsymbol{x}_{k(j)}\}_{j=1}^{\infty}$ はすべて同じ収束先をもつので

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^* \tag{D.55}$$

eq:con-42a

がわかる．

$\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は $\boldsymbol{x}^*$ に収束するので，k を十分大きくとれば $\boldsymbol{x}_k$ は B の境界から離れている．このことより関数

$$B \ni \boldsymbol{x} \mapsto F_k(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}$$

は制約なしの局所解 $\boldsymbol{x}_k$ を持つ．よって

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{0}_n &= \nabla F_k(\boldsymbol{x}_k) \\
&= \nabla f(\boldsymbol{x}_k) + k\Big(\big(\nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)\big)^{\top} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k) + \big(\nabla \boldsymbol{h}^{+}(\boldsymbol{x}_k)\big)^{\top} \boldsymbol{h}^{+}(\boldsymbol{x}_k) \Big) + \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_k \\
&= \nabla f(\boldsymbol{x}_k) + k\Big(\big(\nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)\big)^{\top} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k) + \big(\nabla \boldsymbol{h}^{+}(\boldsymbol{x}_k)\big)^{\top} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}_k) \Big) + \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_k
\end{aligned} \tag{D.56}$$

eq:con-43

となる．最後の等号は $h_\ell^+ \neq 0\,(\ell = 1,\,2,\,\ldots,\,p)$ のとき $\frac{\partial}{\partial x_\ell} h_\ell^+ = \frac{\partial}{\partial x_\ell} h_\ell$ であることからわかる．つぎに定数

$$\gamma_k := \left(1 + k^2 |\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)|_{2,\,m}^2 + k^2 |\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}_k)|_{2,\,p}^2\right)^{-1/2} > 0$$

を (D.56) の最右辺に掛けると

$$\mathbf{0}_n = \gamma_k \nabla f(\boldsymbol{x}_k) + \left(\nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k)\right)^\top \boldsymbol{\mu}_k + \left(\nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}_k)\right)^\top \boldsymbol{\lambda}_k + \gamma_k(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*) \tag{D.57}$$

eq:con-44

を得る．ただし

$$\boldsymbol{\mu}_k := \gamma_k k \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k), \quad \boldsymbol{\lambda}_k =: \gamma_k k \boldsymbol{h}^+(\boldsymbol{x}_k) \geq \mathbf{0}_p$$

である．記号の定義から

$$\gamma_k^2 + |\boldsymbol{\mu}_k|_{2,\,m}^2 + |\boldsymbol{\lambda}_k|_{2,\,p}^2 = 1$$

なので，$\{(\gamma_k,\,\boldsymbol{\mu}_k,\,\boldsymbol{\lambda}_k)\}_{k=1}^\infty$ は有界である．したがって，収束する部分列 $\{(\gamma_{k(j)},\,\boldsymbol{\mu}_{k(j)},\,\boldsymbol{\lambda}_{k(j)})\}_{j=1}^\infty$ を取ることができる．すなわち $j \to \infty$ のとき

$$\gamma_{k(j)} \longrightarrow \gamma_0 \geq \in \mathbb{R}, \quad \boldsymbol{\mu}_{k(j)} \longrightarrow \boldsymbol{\mu}_0 \in \mathbb{R}^m, \quad \boldsymbol{\lambda}_{k(j)} \longrightarrow \boldsymbol{\lambda}_0 \in \mathbb{R}^p$$

と書くことができる．このとき

$$\gamma_0^2 + |\boldsymbol{\mu}_0|_{2,\,m}^2 + |\boldsymbol{\lambda}|_{2,\,p}^2 = 1$$

なので

$$(\gamma_0,\,,\boldsymbol{\mu}_0,\,\boldsymbol{\lambda}_0) \neq (0,\,\mathbf{0}_m,\,\mathbf{0}_p)$$

である．(D.57) で $k = k(j) \to \infty\,(j \to \infty)$ とすると (D.55) から (D.46) を得る．

次に $\boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{x}^*) \geq \mathbf{0}_p$ と $\boldsymbol{\lambda}^* \geq \mathbf{0}_p$ に注意する．ある $\ell \in \{1,\,2,\,\ldots,\,p\}$ に対して

$$h_\ell(\boldsymbol{x}^*) < 0$$

ならば十分大きな k に対して

$$h_\ell(\boldsymbol{x}_k) < 0$$

となる． よって $h_\ell^+(\boldsymbol{x}_k) = 0$ なので λ_k の第 ℓ 成分は 0 となるので $\lambda_\ell^* = 0$ となる．よって

$$\langle \boldsymbol{\lambda}^*,\,\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)\rangle_{2,\,n} = 0$$

が成り立つ．よって (D.47) が示された． □

単調増加関数の不連続点は高々可算個であることの証明をのせる．

D.6 変分不等式

$C \subset \mathbb{R}^n$ 空でない凸部分集合とする．基本的な問題

$$\text{minimize}\, f(\boldsymbol{x}) \qquad \text{subject to } \boldsymbol{x} \in C \tag{D.58}$$ eq:con-46

の解 $\boldsymbol{x}^*$ をみつけることを考える．

thm:con-42 **定理 D.42.** (i) 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は連続微分可能で，$\boldsymbol{x}^* \in C$ は問題 (D.58) eq:con-46 の解のとき

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq 0 \qquad (\boldsymbol{x} \in C) \tag{D.59}$$ eq:con-47

が成立する．
(ii) 関数 f は凸とする．$\boldsymbol{x}^* \in C$ が (D.59) eq:con-47 をみたすとき，$\boldsymbol{x}^*$ は問題 (D.58) eq:con-46 の解である．

re:con-43 **注意 D.43.** (D.59) eq:con-47 を**変分不等式**という．これは制約問題 (D.58) eq:con-46 の 1 次変分の形になっている． □

定理 D.42 thm:con-42 の証明: (i) $\boldsymbol{x} \in C$ を任意の点とする．このとき，C の凸から $0 \leq t \leq 1$ に対して

$$\boldsymbol{x}^* + t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*) = t\boldsymbol{x} + (1-t)\boldsymbol{x}^* \in C$$

である．さらに $\boldsymbol{x}^*$ は問題 (D.58) eq:con-46 の解なので，関数

$$\phi(t) := f\big(\boldsymbol{x}^* + t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)\big) \qquad (0 \leq t \leq 1)$$

は $t = 0$ で最小となる．したがって

$$\dot{\phi}(0) = \left.\frac{d\phi}{dt}\right|_{t=0} \geq 0$$

である．ただし $\dot{\phi}(0)$ は $t = 0$ における ϕ の右微分係数である．しかし

$$\dot{\phi}(t) = \left\langle \nabla f\big(\boldsymbol{x}^* + t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)\big),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n}$$

なので

$$\dot{\phi}(0) = \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq 0$$

となる．
(ii) 関数 f は点 $\boldsymbol{x}^*$ で連続微分可能なので

$$f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \qquad (\boldsymbol{x} \in C)$$

である. eq:con-47 (D.59) より

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq 0$$

なので

$$f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}^*) \qquad (\boldsymbol{x} \in C)$$

となる. よって $\boldsymbol{x}^*$ は問題 eq:con-46 (D.58) の解である.

ex:con-44 **例 D.44.** 関数 $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は連続微分可能とし, $\mathbf{A} \in \mathrm{Mat}(p,\, n;\, \mathbb{R})$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^p$ とする. 問題

$$\operatorname{minimize} f(\boldsymbol{x}) \qquad \text{subject to } \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{D.60}$$ eq:con-48

を考える.

$\boldsymbol{x}^*$ は問題 eq:con-48 (D.60) の解のとき eq:con-47 (D.59) は

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq 0 \qquad (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n;\, \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}) \tag{D.61}$$ eq:con-48a

である. $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ は

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{w} \qquad (\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{w} \in \ker(\mathbf{A}))$$

の形で書く. すると eq:con-48a (D.61) から

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{w} \right\rangle_{2,\,n} = \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq 0 \qquad (\forall \boldsymbol{w} \in \ker(\mathbf{A}))$$

となる. $\boldsymbol{w}$ を $-\boldsymbol{w}$ に置き換えると

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{w} \right\rangle_{2,\,n} \leq 0 \qquad (\forall \boldsymbol{w} \in \ker(\mathbf{A}))$$

となるので

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{w} \right\rangle_{2,\,n} = 0 \qquad (\forall \boldsymbol{w} \in \ker(\mathbf{A}))$$

がわかる. したがって

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \in \bigl(\ker(\mathbf{A})\bigr)^{\perp} = \operatorname{range}(\mathbf{A}^{\top})$$

がわかる. したがって, $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ が $\mathbf{A}^{\top}$ の像に含まれるので, ある $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^m$ が存在して

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{A}^{\top}(-\boldsymbol{\lambda}^*) \iff \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \mathbf{A}^{\top}\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0}_n$$

と書ける. このとき $\boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^*,\, \lambda_2^*,\, \ldots,\, \lambda_p^*)^{\top}$ は制約 $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の Lagrange 乗数となる. □

D.7 凸性と Lagrange 乗数

問題

$$\text{minimize } f(\boldsymbol{x}) \qquad \text{subject to } \boldsymbol{h} \le \boldsymbol{0}_p \tag{D.62}$$

eq:con-49

の解 $\boldsymbol{x}^*$ をみつけるときの Lagrange 乗数の存在を定理 thm:con-37 D.37 は保証している．これは関数の凸性の仮定を用いていない．しかし多くの場合 qualification 条件を確認することが容易でない．この節では強い仮定

$$f,\, h_1,\, h_2,\, \ldots,\, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R} \text{ は凸関数} \tag{D.63}$$

eq:con-50

を課す．

まず凸関数にたいして，KKT 条件は最適解の十分条件になることを示す．

thm:con-45

定理 D.45. $f,\, h_1,\, h_2,\, \ldots,\, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸関数かつ連続微分可能とする．$\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$ は

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \le \boldsymbol{0}_p \tag{D.64}$$

eq:con-51a

をみたすとする．さらに，ある $\boldsymbol{\mu}^* = (\mu_1^*,\, \mu_2^*,\, \ldots,\, \mu_p^*)^\top \in \mathbb{R}^p$ が存在して KKT 条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_n \tag{D.65}$$

eq:con-51

$$\boldsymbol{\mu}^* \ge \boldsymbol{0}_p, \qquad \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p} \ge 0 \tag{D.66}$$

eq:con-52

が成立するとする．このとき $\boldsymbol{x}^*$ は問題 (eq:con-49 D.62) の解である．

Proof. $C := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n;\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \le \boldsymbol{0}\}$ は実行可能解の集合とする．各 $h_j\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ は凸関数なので

$$C_j := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n;\, h_j(\boldsymbol{x}) \le 0\}$$

は凸集合である．したがって

$$C = \bigcap_{j=1}^{p} C_j$$

も凸集合となる．(eq:con-51 D.65) は

$$\begin{aligned} 0 &= \Big\langle \underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*)}_{\boldsymbol{0}_n},\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \Big\rangle_{2,\,n} \\ &= \big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \big\rangle_{2,\,n} + \left\langle \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \qquad (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n) \end{aligned} \tag{D.67}$$

eq:con-53

となる. $\boldsymbol{x} \in C$ である. C の定義と $h_j\,(j = 1,\, 2,\, \dots,\, p)$ の凸性と eq:con-51a (D.64) より

$$h_j(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \leq h_j(\boldsymbol{x}) \leq 0 \tag{D.68}$$ eq:con-55a

がわかる. なぜならば, 関数 $\phi(t) := h_j\big(\boldsymbol{x}^* + t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)\big)\,(0 \leq t \leq 1)$ を考える. すると関数 h_j の凸性から関数 ϕ も凸となる. したがって

$$h_j(0) + t\frac{d}{dt}\phi(t)\bigg|_{t=0} \leq h_j(t) \tag{D.69}$$ eq:con-55b

を得る. さらに

$$\frac{d}{dt}\phi(t)\bigg|_{t=0} = \left\langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n}$$

であることに注意して, eq:con-55b (D.69) に $t = 1$ を代入すると

$$h_j(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} = \phi(0) + \frac{d}{dt}\phi(t)\bigg|_{t=0} \leq \phi(1) = h_j(\boldsymbol{x})$$

を得る. eq:con-55a (D.68) の両辺を $\mu_j^*\,(\geq 0)$ 倍して和をとれば

$$0 \geq \underbrace{\left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p}}_{\geq 0 \quad \because \text{eq:con-52 (D.66)}} + \left\langle \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n}$$

がわかる. したがって, 上式と eq:con-51 (D.65) から

$$\left\langle \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \leq 0 \iff \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq 0 \qquad (\forall \boldsymbol{x} \in C) \tag{D.70}$$ eq:con-55

がわかる. 関数 f の凸性と eq:con-55 (D.70) から

$$f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \geq f(\boldsymbol{x}^*) \qquad (\forall \boldsymbol{x} \in C)$$

を得る. したがって $\boldsymbol{x}^*$ は問題 eq:con-49 (D.62) の解であることが示せた. □

df:con-56 **定義 D.46.** 問題 eq:con-49 (D.62) を考える.

$$\text{ある } \overline{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n \text{ が存在して } \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) < \boldsymbol{0}_p \tag{D.71}$$ eq:con-56

が成り立つとき, 問題 eq:con-49 (D.62) に対する **Slater 条件**が成立するという. ただし, $\boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) < \boldsymbol{0}_p$ は, $h_j(\overline{\boldsymbol{x}}) < 0\,(\forall j = 1,\, 2,\, \dots,\, p)$ が成り立つことである.

thm:con-47 **定理 D.47.** Slater 条件 (D.71) が成立するとする.

$$f,\, h_1,\, h_2,\, \ldots,\, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$$

は凸関数かつ連続微分可能とし, $\boldsymbol{x}^*$ を問題 (D.62) の解とする.
(i) このとき $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^p$ が存在して KKT 条件 (D.65) と (D.66) が成り立つ.
(ii) さらに

$$\boldsymbol{x} \mapsto f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \rangle_{2,\,p}$$

は点 $\boldsymbol{x}^*$ で最小となる.

Proof. 定理 D.37 の John の formulation から, ある 非負実数の組 $\gamma^*,\, \mu_1^*,\, \mu_2^*,\, \ldots,\, \mu_p^*$ が存在 (すべてが同時に零になることはない.) して

$$\gamma^* \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_n \tag{D.72}$$ eq:con-57

$$\gamma^* \geq 0, \qquad \boldsymbol{\mu}^* \geq \boldsymbol{0}_p, \qquad \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p} \geq 0 \tag{D.73}$$ eq:con-58

が成立する.

まず

$$\gamma^* \neq 0 \tag{D.74}$$ eq:con-59

を示す. そのために $\gamma^* = 0$ を仮定して矛盾を導く. すべては同時に零にならないので $\boldsymbol{\mu}^* \neq \boldsymbol{0}_p$ でである. 一方, $\gamma^* = 0$ の仮定と (D.72) から

$$\sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_n \tag{D.75}$$ eq:con-60

となる. したがって, (D.75) と Slater 条件 D.71 から

$$\left\langle \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} = 0 \quad かつ \quad \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) < \boldsymbol{0}_p \tag{D.76}$$ eq:con-61

である. しかし $h_j\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ は凸関数なので

$$h_j(\boldsymbol{x}^*) + \big\langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \big\rangle_{2,\,n} \leq h_j(\overline{\boldsymbol{x}})$$

が成り立つ. 上式の辺々と $\mu_j^*\,(j = 1,\, 2, \ldots,\, p)$ の積を取り, j について和を取ると

$$\begin{aligned}
\big\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \big\rangle_{2,\,p} &= \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* h_j(\overline{\boldsymbol{x}}) = \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* h_j(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \left\langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \\
&= \big\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \big\rangle_{2,\,p} + \underbrace{\left\langle \sum_{j=1}^{p} \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n}}_{=0 \quad \because (\mathrm{D.76})} \\
&= \big\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \big\rangle_{2,\,p}
\end{aligned}$$

から

$$\left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \right\rangle_{2,\,p} = \left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} \tag{D.77}$$

eq:con-61a

を得る．よって，$\boldsymbol{\mu}^* \geq \boldsymbol{0}_p$ かつ $\boldsymbol{\mu}^* \neq \boldsymbol{0}_p$ で $\boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) < \boldsymbol{0}_p$ ($\because$ (D.74)) なので，(D.79) と合わせると

$$\left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} < 0$$

となる．これは (D.73) と矛盾する．背理法の仮定から $\gamma^* \neq 0$ となる．よって，このことと (D.73) から $\gamma^* > 0$ が示せた．

次に，(D.72) を $\gamma^* > 0$ で割り

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \frac{\mu_j^*}{\gamma^*} \nabla h_j(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}_n$$

を考える．$\widetilde{\mu}_j^* = \mu_j^*/\gamma^* \geq 0\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ とおけば，(D.73) から

$$\begin{aligned} &\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \widetilde{\mu}_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_n, \\ &\widetilde{\boldsymbol{\mu}} = (\widetilde{\mu}_1^*,\, \widetilde{\mu}_2^*,\, \ldots,\, \widetilde{\mu}_p^*) \geq \boldsymbol{0}_p, \\ &\left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} = 0 \end{aligned} \tag{D.78}$$

eq:con-61c

を得る．ただし，$\widetilde{\boldsymbol{\mu}}^* = (\widetilde{\mu}_1^*,\, \widetilde{\mu}_2^*,\, \ldots,\, \widetilde{\mu}_p^*)^\top$ とした．関数 $h_j\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ の凸性より

$$h_j(\overline{\boldsymbol{x}}) \geq h_j(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x}^* - \overline{\boldsymbol{x}} \right\rangle_{2,\,n}$$

を得る．上式の辺々に $\widetilde{\mu}_j$ を掛けて，j について和ををると

$$\left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \right\rangle_{2,\,p} \geq \left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} + \left\langle \sum_{j=1}^{p} \widetilde{\mu}_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x}^* - \overline{\boldsymbol{x}} \right\rangle_{2,\,p} \tag{D.79}$$

eq:con-61a

を得る．さらに f の凸性から

$$f(\overline{\boldsymbol{x}}) \geq f(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \tag{D.80}$$

eq:con-61b

がわかる．(D.79) と (D.80) を合わせると

$$\begin{aligned} f(\overline{\boldsymbol{x}}) + \left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \right\rangle_{2,\,p} \geq{}& f(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} + \left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} \\ &+ \left\langle \sum_{j=1}^{p} \widetilde{\mu}_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \\ ={}& f(\overline{\boldsymbol{x}}) + \left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} + \left\langle \underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{p} \widetilde{\mu}_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x})}_{=\boldsymbol{0}_n \quad \because \text{(D.78)}},\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \\ ={}& f(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \widetilde{\boldsymbol{\mu}}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} \end{aligned}$$

を得る．よって (ii) は示された． □

D.8 凸双対性

D.8.1 双対問題

与えられた関数 $f,\, g_1,\, g_2,\, \ldots,\, g_m,\, h_1,\, h_2,\, \ldots,\, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ に対して

$$\boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_p \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix}$$

と書くことにする．

問題

$$\text{minimize}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{subject to}\;\; g(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}_m \text{ and } h(\boldsymbol{x}) \leq \mathbf{0}_p \tag{D.81}$$ eq:con-64

の解を $\boldsymbol{x}^*$ をみつけたいとする．

df:con-48 **定義 D.48.** 問題 (D.81) eq:con-64 に対応する Lagrange 問題 $L(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu})$ $(\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,\, \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m,\, \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p)$ を

$$L(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \big\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \big\rangle_{2,\, m} + \big\langle \boldsymbol{\mu},\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \big\rangle_{2,\, p}$$

で定める．さらに

$$L^*(\boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu})$$

と定める．

注意 D.49. $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1,\, \lambda_2,\, \ldots,\, \lambda_m)^\top$, $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1,\, \mu_2,\, \ldots,\, \mu_p)^\top$ と書いたとき

$$L(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j g_j(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j h_j(\boldsymbol{x})$$

とも書ける． □

ex:con-49 **例 D.50.** 関数 f は凸とし，問題

$$\text{minimize}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{subject to } \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \text{ and } \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n \tag{D.82}$$ eq:con-65

を考える．ただし $\mathrm{A} \in \mathrm{Mat}(m,\, n;\, \mathbb{R})$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ とする． $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ と $\boldsymbol{\mu} \leq \mathbf{0}_n\,(\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n)$ を取り, $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{x}$ とおくと

$$
\begin{aligned}
L^*(\boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) &= \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\left\{f(\boldsymbol{x}) + \big\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\big\rangle_{2,\,m} + \big\langle \boldsymbol{\mu},\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})\big\rangle_{2,\,n}\right\} \\
&= \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\left\{f(\boldsymbol{x}) + \big\langle \boldsymbol{\lambda},\, \mathrm{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\big\rangle_{2,\,m} - \big\langle \boldsymbol{\mu},\, \boldsymbol{x}\big\rangle_{2,\,n}\right\} \\
&= -\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{b}\rangle_{2,\,m} + \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\left\{f(\boldsymbol{x}) + \big\langle \mathrm{A}^\top\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\mu},\, \boldsymbol{x}\big\rangle_{2,\,n}\}\right\} \\
&= -\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{b}\rangle_{2,\,m} - \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\left\{\big\langle \boldsymbol{\mu} - \mathrm{A}^\top\boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{x}\big\rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x})\right\}
\end{aligned}
$$

となる．したがって

$$
L^*(\boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) = -\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{b}\rangle_{2,\,n} - f^*\big(\boldsymbol{\mu} - \mathrm{A}^\top\boldsymbol{\lambda}\big)
$$

となる．ただし

$$
f^*(\boldsymbol{x}) = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\left\{\langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y}\rangle_{2,\,n} - f(\boldsymbol{x})\right\}
$$

は凸関数 f の双対関数である． □

df:con-50 **定義 D.51.** 問題 (D.81) に対する双対問題は eq:con-64

$$
\text{minimize}\, L^*(\boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) \quad \text{subject to } \boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}_p \tag{D.83}
$$

eq:con-66

の解 $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^p$ をみつけることである．

ex:con-51 **例 D.52.** $f(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{a}\rangle_{2,\,n}$ とする．ただし $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^n$ は定数ベクトルである．線型計画法

$$
\text{minimize } \langle \boldsymbol{x},\, \boldsymbol{a}\rangle_{2,\,n} \quad \text{subject to } \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},\, \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}_n
$$

を考える．ただし $\mathbf{A} \in \mathrm{Mat}(m,\, n;\, \mathbb{R})$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ である．いま

$$
f^*(\boldsymbol{y}) = \max_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\big\{\langle \boldsymbol{y} - \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{x}\rangle_{2,\,n}\big\} = \begin{cases} 0 & (\boldsymbol{y} = \boldsymbol{a}) \\ \infty & (\text{その他の場合}) \end{cases}
$$

と定める．したがって

$$
L^*(\boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) = -\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{b}\rangle_{2,\,m} - f^*\big(\boldsymbol{\mu} - \mathrm{A}^\top\boldsymbol{\lambda}\big) = \begin{cases} -\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{b}\rangle_{2,\,n} & (\boldsymbol{\mu} - \mathrm{A}^\top\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{a}) \\ -\infty & (\text{その他の場合}) \end{cases}
$$

となる．このとき双対問題は

$$
\text{minimize } -\langle \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{b}\rangle_{2,\,m} \quad \text{subject to } \boldsymbol{\mu} - \mathrm{A}^\top\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{a} = \mathbf{0}_p \text{ and } \boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}_p
$$

となる． □

thm:con-52 **定理 D.53.** (弱双対不等式) 不等式

$$\sup_{\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{R}^p,\,\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^m} L^*(\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) \leq \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n;\,\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}_m,\,\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})\leq\boldsymbol{0}_p} f(\boldsymbol{x}) \tag{D.84}$$ eq:con-67

が成立する． この不等式が厳密に成立するとき, **双対ギャップ**があるという．

Proof. $\boldsymbol{\mu} \geq \boldsymbol{0}_p$, $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, , $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}_m$, $\boldsymbol{h} \leq \boldsymbol{0}_p$ とする．このとき

$$L(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \underbrace{\langle\boldsymbol{\mu},\,\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})\rangle_{2,\,p}}_{\leq 0} + \langle\boldsymbol{\lambda},\,\underbrace{\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})}_{=0}\rangle_{2,\,m} \leq f(\boldsymbol{x})$$

となる．さらに

$$L^*(\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) \leq L(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu})$$

より

$$L^*(\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) \leq f(\boldsymbol{x}).$$

よって (D.84) が示された．eq:con-67 □

D.8.2 Slaker **条件** (再訪問)

$\mathbf{A} \in \mathrm{Mat}(m,\,n;\,\mathbb{R})$, $m \leq n$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ とし,

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$$

とおく．さらに

$$\mathrm{rank}\,(\mathbf{A}) = m$$

とする．

主問題

$$\text{minimize } f(\boldsymbol{x}) \quad \text{subject to } \mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \text{ and } \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{0}_p \tag{D.85}$$ eq:con-68

の解 $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$ をみつけた．対応する双対問題

$$\text{maximize } L^*(\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) \quad \text{subject to } \boldsymbol{\mu} \geq \boldsymbol{0}_p \tag{D.86}$$ eq:con-69

の解 $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^p$, $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ をみつけたい．ただし

$$L^*(\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}),$$
$$L(\boldsymbol{x},\,\boldsymbol{\lambda},\,\boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \left\langle\boldsymbol{\lambda},\,\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}\right\rangle_{2,\,m} + \left\langle\boldsymbol{\mu},\,\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})\right\rangle_{2,\,p}$$

である．

thm:con-53 **定理 D.54.** 関数 $h_1, h_2, \ldots, h_p : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸かつ連続微分可能とする．さらに修正 Slaker 条件が成立するとする．

$$\text{ある } \overline{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n \text{ があって } \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \leq \mathbf{0}_p \text{ かつ } \mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b} \tag{D.87}$$ eq:con-70

をみたす．このとき以下が成り立つ．
(i) $\boldsymbol{x}^*$ は主問題 (D.85) の解のとき

$$\text{組 } (\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \text{ は双対問題 (D.86) の解である．} \tag{D.88}$$ eq:con-71

(ii) さらに

$$L^*(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = f(\boldsymbol{x}^*) \tag{D.89}$$ eq:con-72

が成立する．したがって，強双対性

$$\sup_{\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{R}^p,\, \boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}^m,\, \boldsymbol{\mu}\geq\mathbf{0}_p} L^*(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})=\mathbf{0}_m,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})\geq\mathbf{0}_p} f(\boldsymbol{x})$$

が成立する．

Proof. 定理 D.40 から $(\gamma^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \neq (0, \mathbf{0}_p, \mathbf{0}_m)$ があって F.John の条件をみたす．すなわち

$$\gamma^*\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \mathbf{A}^\top\boldsymbol{\lambda}^* + \nabla\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)^\top\boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0}_n, \tag{D.90}$$ eq:con-73a

$$\gamma^* \geq 0,\ \boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}_m,\ \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}_p,\ \left\langle\boldsymbol{\mu}^*, \boldsymbol{h})(\boldsymbol{x}^*)\right\rangle_{2,n} = 0 \tag{D.91}$$ eq:con-73b

が成り立つ．
　まず背理法を用いて

$$\gamma^* \neq 0 \tag{D.92}$$ eq:con-73

を示す．そのために $\gamma = 0$ と仮定すると (D.90) から

$$\mathbf{A}^\top\boldsymbol{\lambda}^* + \nabla\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)^\top\boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0}_n \tag{D.93}$$

となる．さらに (D.87) をみたす $\overline{\boldsymbol{x}}$ を用いて $\boldsymbol{x}^* - \overline{\boldsymbol{x}}$ と上の式の内積をとると

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle\mathbf{A}^\top\boldsymbol{\lambda}^*, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\right\rangle_{2,n} + \left\langle\nabla\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)^\top\boldsymbol{\mu}^*, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\right\rangle_{2,n} \\ &= \left\langle\boldsymbol{\lambda}^*, \mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}} - \mathbf{A}\boldsymbol{x}^*\right\rangle_{2,m} + \left\langle\boldsymbol{\mu}^*, \nabla\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)(\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*)\right\rangle_{2,p} \end{aligned}$$

となる．しかし

$$\mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}} - \mathbf{A}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{b} = \mathbf{0}_m$$

なので

$$\left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)(\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} = 0 \tag{D.94}$$

eq:con-75

を得る．背理法の仮定から $\gamma \neq 0$ なので KKT 条件は

$$\nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) + \mathbf{A}^\top \boldsymbol{\lambda}^* + \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)^\top \boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0}_n \tag{D.95}$$

eq:con-76

となる．ただし，$\boldsymbol{\mu}^* = \gamma^{-1}\boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{\lambda}^* = \gamma^{-1}\boldsymbol{\lambda}$ とした．この等式が eq:con-73 (D.92) を導くことを示そう．$f,\, h_j\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ は凸関数であることと eq:con-75 (D.94) を用いると

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}^*) &= f(\boldsymbol{x}^*) + \langle \boldsymbol{\lambda}^*,\, \underbrace{\mathbf{A}\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}}_{=\mathbf{0}_m} \rangle_{2,\,m} + \underbrace{\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p}}_{=0} \\
&\leq \underbrace{f(\overline{\boldsymbol{x}}) + \langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{x}^* - \overline{\boldsymbol{x}} \rangle_{2,\,n}}_{f\text{ の凸性から}} + \langle \boldsymbol{\lambda}^*,\, (\mathbf{A}\boldsymbol{x}^* - \mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}}) + (\mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}) \rangle_{2,\,m} \\
&\quad + \underbrace{\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) + \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}^* - \overline{\boldsymbol{x}}) \rangle_{2,\,p}}_{h_j\text{ の凸性と }\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0}_p} \\
&= f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{\lambda}^*,\, \mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,m} \\
&\quad + \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \rangle_{2,\,p} + \langle \underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \mathbf{A}^\top \boldsymbol{\lambda}^* + \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)^\top \boldsymbol{\mu}^*}_{=\mathbf{0}_n \because \text{eq:con-76 (D.95)}},\, \boldsymbol{x}^* - \overline{\boldsymbol{x}} \rangle_{2,\,n} \\
&= f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{\lambda}^*,\, \mathbf{A}\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,p} + \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \rangle_{2,\,p}
\end{aligned}$$

となる．さらに $h_j\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ の凸性から

$$h_j(\boldsymbol{x}^*) + \langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle_{2,\,n} \leq h_j(\overline{\boldsymbol{x}})$$

を得る． 上式の辺々に $\mu_j^*\,(j = 1,\, 2,\, \ldots,\, p)$ を掛けて，j について和をとると

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^p \mu_j^* h_j(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^p \mu_j^* \langle \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle_{2,\,n} \leq \sum_{j=1}^p \mu_j^* h_j(\overline{\boldsymbol{x}}) \\
&\iff \sum_{j=1}^p \mu_j^* h_j(\boldsymbol{x}^*) + \left\langle \sum_{j=1}^p \mu_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*),\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \right\rangle_{2,\,n} \leq \sum_{j=1}^p \mu_j^* h_j(\overline{\boldsymbol{x}}) \\
&\iff \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p} + \langle \left(\nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)\right)^\top \boldsymbol{\mu}^*,\, \overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^* \rangle_{2,\,n} \leq \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \rangle_{2,\,p} \\
&\iff \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p} + \underbrace{\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \nabla \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*)(\overline{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p}}_{=0 \quad \because \text{(eq:con-75 (D.94))}} \leq \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \rangle_{2,\,p}
\end{aligned}$$

がわかる．したがって

$$\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{x}^*) \rangle_{2,\,p} \leq \langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \rangle_{2,\,p} \tag{D.96}$$

eq:con-77

となる．しかし，$\boldsymbol{\mu}^* \neq \mathbf{0}_p$ のとき, 修正 Slater 条件より

$$\left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\overline{\boldsymbol{x}}) \right\rangle_{2,\,p} < 0 \tag{D.97}$$ eq:con-78

となる．(D.96) と (D.97) から

$$\left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}^*) \right\rangle_{2,\,p} < 0$$

となり, (D.91) と矛盾する．よって $\gamma^* \neq 0$ ならば $\boldsymbol{\mu} \neq \mathbf{0}_m$ とはならない．

次に $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}_m$ の場合を考える．すると (D.95) から

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0}_m$$

となる．$\mathbf{A}$ は非退化なので $\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0}_p$ となり, $(\lambda^*,\, \boldsymbol{\lambda},\, \boldsymbol{\mu}) = (0,\, \mathbf{0}_m,\, \mathbf{0}_p)$ となるので矛盾する．よって $\gamma^* \neq 0$ となる．したがって

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \left\{ f(\boldsymbol{x}) + \left\langle \boldsymbol{\lambda}^*,\, \mathbf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \right\rangle_{2,\,m} + \left\langle \boldsymbol{\mu}^*,\, \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \right\rangle_{2,\,p} \right\} = L^*(\boldsymbol{\lambda}^*,\, \boldsymbol{\mu}^*)$$

となる．逆向きの不等式は定理 D.53 よりわかる．□

D.9 凸双対性（その２）

D.9.1 Fenchel 双対性

2 つの凸かつ下半連続関数[5]

$$f : \mathbb{R}^n \longrightarrow (-\infty,\, \infty) \cup \{+\infty\}, \quad g : \mathbb{R}^m \longrightarrow (-\infty,\, \infty) \cup \{+\infty\}$$

と $m \times n$ 行列 $\mathbf{A}$ が与えられたとする．

df:con-54 **定義 D.55.** 関数 f と g の**領域**をそれぞれ

$$\mathrm{dom}\ f = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n;\, f(\boldsymbol{x}) < \infty\}$$
$$\mathrm{dom}\ g = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m;\, g(\boldsymbol{y}) < \infty\}$$

で定義する．

[5]関数 f は点 $\boldsymbol{x}$ で下半（かはん）連続であるとは, 任意の点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathbb{R}^n$ で $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}$ なるものに対して

$$\liminf_{k\to\infty} f(\boldsymbol{x}_k) = f(\boldsymbol{x})$$

をみたすときをいう．

katei:con-55 **仮定 D.56.** 関数 f と g は $-\infty$ の値は取らず

$$\operatorname{dom} f \neq \varnothing, \quad \operatorname{dom} g \neq \varnothing$$

とする．このことが成り立つとき，これらの関数は proper であるという．

関数 f, g は凸なので，Young の不等式 (補題 lem:con-33 D.32) を利用すると，任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ と $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ に対して

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) + f^*(\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}) &\geq \left\langle \boldsymbol{x},\, \mathbf{A}^\top \boldsymbol{y} \right\rangle_{2,n}, \\ g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\big) + g^*(-\boldsymbol{y}) &\geq -\left\langle \mathbf{A}\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{y} \right\rangle_{2,m} \end{aligned}$$

が成立するとする．

これらの不等式の辺々を加えると

$$f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\big) \geq -f\big(\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}\big) - g^*(-\boldsymbol{y}) \quad (\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m) \tag{D.98}$$ eq:con-79

となる．このことを踏まえて以下の主問題と双対問題を導入することにする．

$$\text{minimize} \left\{ f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\big) \right\} \quad (\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n) \tag{D.99}$$ eq:con-80

と双対問題

$$\text{maximize} \left\{ -f^*\big(\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}\big) - g^*(-\boldsymbol{y}) \right\} \quad (\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m). \tag{D.100}$$ eq:con-81

このとき (eq:con-79 D.98) は弱双対性を保証する．

以上の議論から以下の定理を得る．

thm:con-56 **定理 D.57.** 不等式

$$\sup_{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m} \left\{ -f^*\big(\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}\big) - g^*(-\boldsymbol{y}) \right\} \leq \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\big) \right\}$$

が成立する．

df:con-57 **定義 D.58.** 関数 $v : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ を

$$v(\boldsymbol{a}) := \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \left\{ f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}\big) \right\} \quad (\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m)$$

で定める．

lem:con-58 **補題 D.59.** 関数 $v : \mathbb{R}^m \longrightarrow (-\infty, \infty) \cup \{+\infty\}$ は凸かつ下半連続である．

Proof. 凸性の証明: 任意の $\boldsymbol{a}, \widetilde{\boldsymbol{a}} \in \mathbb{R}^m$ と $0 \le \lambda \le 1$ に対して, 関数 g の凸性から

$$g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + (\lambda\boldsymbol{a} + (1-\lambda)\widetilde{\boldsymbol{a}})\big) \le \lambda g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}\big) + (1-\lambda) g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \widetilde{\boldsymbol{a}}\big)$$

となる. 上の不等式と inf の性質から

$$\begin{aligned}
v\big(\lambda\boldsymbol{a} + (1-\lambda)\widetilde{\boldsymbol{a}}\big) &\le \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Big\{\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \lambda g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}\big) + (1-\lambda) g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\widetilde{\boldsymbol{a}}\big)\Big\} \\
&= \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Big\{\lambda\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x} g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}\big)\big) + (1-\lambda)\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\widetilde{\boldsymbol{a}}\big)\big)\Big\} \\
&\le \lambda \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Big\{\mathbf{A}\boldsymbol{x} + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}\big)\Big\} \\
&\quad + (1-\lambda)\inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Big\{\mathbf{A}\boldsymbol{x} + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\widetilde{\boldsymbol{a}}\big)\Big\} \\
&= \lambda v(\boldsymbol{a}) + (1-\lambda) v(\widetilde{\boldsymbol{a}})
\end{aligned}$$

を得る. よって, 関数 v は凸であることがわかる.
下半連続性の証明: 任意の $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m$ に対して, 任意の数列 $\{\boldsymbol{a}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathbb{R}^m$ で $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{a}_k = \boldsymbol{a}$ となるものを取る. このとき, 関数 g の下半連続性から

$$\begin{aligned}
\liminf_{k\to\infty} v(\boldsymbol{a}_k) &= \liminf_{k\to\infty}\Big\{f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}_k\big)\Big\} \\
&= f(\boldsymbol{x}) + \liminf_{k\to\infty} g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}_k\big) \\
&= f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}\big) \quad (\because g \text{ は下半連続})
\end{aligned}$$

を得る. よって 関数 v も下半連続である. □

df:con-59 **定義 D.60.** 関数 f, g と行列 $\mathbf{A}$ の組が**双対条件**をみたすとは

$$\text{値関数 } v \text{ は原点の近くで } +\infty \text{ の値を取らない} \tag{D.101}$$ eq:con-82

をみたすときをいう.

re:con-60 **注意 D.61.** 条件 (D.101) eq:con-82 は次のように書きかえることができる. ある小さな正数 $\delta > 0$ があって $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m$ が $|\boldsymbol{a}|_{2,m} \le \delta$ をみたすとき, ある $\boldsymbol{y} \in \operatorname{dom} g$, $\boldsymbol{x} \in \operatorname{dom} f$ があって

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{y} - \mathbf{A}\boldsymbol{x} \tag{D.102}$$ eq:con-83

とかけることである. したがって

$$v(\boldsymbol{a}) \le f(\boldsymbol{x}) + g\big(\mathbf{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}\big) = f(\boldsymbol{x}) + g(\boldsymbol{y}) < \infty$$

となる. □

thm:con-61 **定理 D.62.** $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$ が主問題 (D.99) の解とし，関数 f, g と行列 $\mathbf{A}$ は双対条件 (D.101) をみたすとする．このとき以下が成立する．
(i) $\boldsymbol{y}^* \in \mathbb{R}^m$ が存在して

$$f(\boldsymbol{x}^*) + g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\bigr) = -f^*\bigl(\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}^*\bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*)$$

をみたす．
(ii) 強双対性

$$\inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\Bigl\{f(\boldsymbol{x}) + g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\bigr)\Bigr\} = \sup_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^m}\Bigl\{-f^*\bigl(\mathbf{A}^\top \boldsymbol{y}^*\bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*)\Bigr\} \tag{D.103}$$ eq:con-84

が成立する．

Proof. 注意 D.61 より，双対条件 (D.101) は原点の近くで有限の値を取ることがわかる．よって，関数 $v\colon \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$ は凸であることを合わせて考えると $\partial v(\mathbf{0}) \neq \varnothing$ となることがわかる．そこで

$$-\boldsymbol{y}^* \in \partial v(\mathbf{0}_m)$$

を取る．このとき $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ と $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m$ に対して

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}^*) + g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\bigr) &= v(\mathbf{0}_m) \le v(\boldsymbol{a}) + \langle \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{y}^*\rangle_{2,m} \quad (\because -\boldsymbol{y}^* \in \partial v(\mathbf{0}_m))\\
&\le f(\boldsymbol{x}) + g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}\bigr) + \langle \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{y}^*\rangle_{2,m}\\
&= -\Bigl(\bigl\langle \mathbf{A}^\top\boldsymbol{y}^*,\, \boldsymbol{x}\bigr\rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\Bigr) - \Bigl(-\bigl\langle \boldsymbol{y}^*,\, \mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}\bigr\rangle_{2,n} - g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}\bigr)\Bigr)
\end{aligned}$$

となる．$\boldsymbol{a}$ に関して infimum を取ると

$$f(\boldsymbol{x}^*) + g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x}\bigr) \le -\Bigl(\bigl\langle \mathbf{A}^\top\boldsymbol{y}^*,\, \boldsymbol{x}\bigr\rangle_{2,n} - f(\boldsymbol{x})\Bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*)$$

となる．さらに $\boldsymbol{x}$ に関して infimum を取ると

$$f(\boldsymbol{x}^*) + g\bigl(\mathbf{A}\boldsymbol{x}^*\bigr) \le -f\bigl(\mathbf{A}^\top\boldsymbol{y}^*\bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*)$$

を得る．
逆向きの不等式は定理 D.57 からわかる． □

D.10 半正定値計画法

$\boxed{\text{記号}}$(i) $\mathrm{Sym}(n;\, \mathbb{R})$ を $n\times n$ 対称行列全体の成す線型部分空間とし

$$\mathrm{Sym}^+(n;\, \mathbb{R}) = \{\mathbf{A} \in \mathrm{Sym}(n;\, \mathbb{R});\ \mathbf{A} \succeq \mathbf{0}_{n\times n}\}$$

とする．ただし

$$\mathbf{A} \succeq \mathbf{0}_{n\times n} \Longleftrightarrow \boldsymbol{x}^\top \mathbf{A}\boldsymbol{x} \geq 0\,(\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n))$$

である．
(ii) 行列 $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathrm{Sym}(n;\,\mathbb{R})$ の内積を

$$\left\langle \mathbf{A},\, \mathbf{B} \right\rangle_{\mathrm{F}} = \sum_{i,\,j=1}^{n} a_{ij}b_{ij} \qquad (\mathbf{A} = (a_{ij}),\, \mathbf{B} = (b_{ij}))$$

で定める．
与えられた $\mathbf{A}_k,\, \mathbf{C} \in \mathrm{Sym}(n;\,\mathbb{R})\,(k = 1,\,2,\,\ldots,\,m)$ と $b_k \in \mathbb{R}\,(k = 1,\,2,\,\ldots,\,k)$ に対して半正定値計画問題

$$\begin{aligned} &\text{minimize } \left\langle \mathbf{C},\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} \\ &\text{subject to } \left\langle \mathbf{A}_1,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} = b_1,\, \left\langle \mathbf{A}_2,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} = b_2,\, \ldots,\, \left\langle \mathbf{A}_m,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} = b_m \\ &\qquad \mathbf{X} \succeq \mathbf{0}_{n\times n} \end{aligned} \tag{D.104}$$

eq:con-85

を考える．
<u>**双対性**</u>．まず写像 $\boldsymbol{\alpha} : \mathrm{Sym}(n;\,\mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}^m$ を

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) = \left[\left\langle \mathbf{A}_1,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}},\, \left\langle \mathbf{A}_2,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}},\, \ldots,\, \left\langle \mathbf{A}_m,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}}\right]^\top$$

と定める．さらに写像 $\boldsymbol{\alpha}^\top : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathrm{Sym}(n;\,\mathbb{R})$ を

$$\left\langle \boldsymbol{\alpha}^\top(\boldsymbol{y}),\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} = \left\langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) \right\rangle_{2,\,m} = \sum_{k=1}^{m} y_k \left\langle \mathbf{A}_k,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathbf{F}} \qquad (\forall \mathbf{X} \in \mathrm{Sym}(n;\,\mathbb{R}^n))$$

で定める．主問題 (D.104) [eq:con-85] を

$$\text{minimize } f(\mathbf{X}) + g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X})\bigr) \tag{D.105}$$

eq:con-86

と書きかえる．ただし，$\boldsymbol{b} = (b_1,\, b_2,\, \ldots,\, b_m)^\top$ で

$$f(\mathbf{X}) = \begin{cases} \left\langle \mathbf{C},\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} & (\mathbf{X} \succeq \mathbf{0}) \\ +\infty & (\text{その他の場合}) \end{cases}, \qquad g(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} 0 & (\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}) \\ +\infty & (\text{その他の場合}) \end{cases} \tag{D.106}$$

eq:con-86a

である．このとき $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^m$ に対し

$$g^*(\boldsymbol{z}) = \sup_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^m} \bigl\{\langle \boldsymbol{z},\, \boldsymbol{y} \rangle_{2,\,m} - g(\boldsymbol{y})\bigr\} = \langle \boldsymbol{z},\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,m} \quad (\because\ \boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{b} \text{ のとき } g(\boldsymbol{y}) = +\infty\ ) \tag{D.107}$$

eq:con-86b

となる．さらに $\mathbf{W} \in \mathrm{Sym}(n;\mathbb{R})$ に対して

$$f^*(\mathbf{W}) = \sup_{\mathbf{X}\in\mathrm{Sym}(n;\mathbb{R})} \left\{ \left\langle \mathbf{W},\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} - f(\mathbf{W}) \right\} \tag{D.108}$$

$$= \sup_{\mathbf{X}\in\mathrm{Sym}(n;\mathbb{R})} \left\{ \left\langle \mathbf{W}-\mathbf{C},\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} \right\} \tag{D.109}$$

$$= \begin{cases} 0 & (\mathbf{C} \preceq \mathbf{W}) \\ +\infty & (\text{その他の場合}) \end{cases} \quad (\because \mathbf{X} \succeq \mathbf{0}_n \text{ でなければ } f(\mathbf{X}) = +\infty) \tag{D.110}$$

eq:con-86c

となる．ただし

$$\mathbf{C} \preceq \mathbf{W} \iff \mathbf{W} - \mathbf{C} \succeq \mathbf{0}$$

である．さらに, 任意の $\mathbf{X} \in \mathrm{Sym}(n;\mathbb{R})$ と $\boldsymbol{y} = (y_1,\, y_2,\, \ldots,\, y_m)^\top \in \mathbb{R}^m$ に対し

$$\left\langle \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{y},\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} = \left\langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{\alpha}\mathbf{X} \right\rangle_{2,n} = \left\langle \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix},\, \begin{bmatrix} \left\langle \mathbf{A}_1,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} \\ \left\langle \mathbf{A}_2,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} \\ \vdots \\ \left\langle \mathbf{A}_m,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}} \end{bmatrix} \right\rangle_{2,m} = \sum_{k=1}^{m} y_k \left\langle \mathbf{A}_k,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}}$$

$$= \left\langle \sum_{k=1}^{m} y_k \mathbf{A}_k,\, \mathbf{X} \right\rangle_{\mathrm{F}}$$

から

$$\boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{y} = \sum_{k=1}^{m} y_k \mathbf{A}_k$$

がわかる．

Fenchel **双対問題**.

$$f^*(\boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{y}) - g^*(-\boldsymbol{y})$$

を最大化することは半正定値双対問題

$$\text{minimize } \left\langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{b} \right\rangle_{2,m} \qquad \text{subject to } \sum_{k=1}^{m} y_k \mathbf{A}_k \preceq \mathbf{C} (\iff f^*(\boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{y}) = 0) \tag{D.111}$$

eq:con-87

となる．これは線型計画法の双対問題のアプローチとなる．ただし制約は対称行列に対する不等式制約である．さらに主問題 (D.104) は対称行列 $\mathbf{X}$ が未知であり, 双対問題 (D.105) はベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ が未知である．

thm:con-62 **定理 D.63.** 主問題 (D.104) の実行可能解 $\overline{\mathbf{X}}$ で

$$\overline{\mathbf{X}} \succeq \mathbf{0}_{n\times n} \tag{D.112}$$

eq:con-88

をみたすものが存在したとする．さらに写像

$$\boldsymbol{\alpha} : \mathrm{Sym}(n;\, \mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

は全射とする．このとき主問題 (eq:con-85 D.104) の解を $\mathbf{X}^*$ としたとき双対問題 (eq:con-86 D.105) の実行解 $\boldsymbol{y}^*$ が存在し

$$\left\langle \mathbf{C},\, \mathbf{X}^* \right\rangle_{\mathrm{F}} = \left\langle \boldsymbol{b},\, \boldsymbol{y}^* \right\rangle_{2,\, m}$$

をみたす．

Proof. (eq:con-87 D.111) を考慮すると，十分小さな正数 $\lambda > 0$ が存在して

$$\left\langle \mathbf{Y},\, \mathbf{Y} \right\rangle_{\mathrm{F}} \le \lambda^2 \Longrightarrow \mathbf{X} = \overline{\mathbf{X}} + \mathbf{Y} \in \mathrm{Sym}^+(n;\, \mathbb{R})$$

とできる．写像

$$\boldsymbol{\alpha} : \mathrm{Sym}(n;\, \mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}^m$$

は全射なので，ある正数 $\eta > 0$ が存在して

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbb{B}_{\mathrm{Sym}}(\mathbf{0}_m,\, 1)) \supset \mathbb{B}_{\mathbb{R}^m}(\mathbf{0}_m,\, \lambda) = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m;\, |\boldsymbol{y}|_{2,\, m} \le \lambda\}$$

とできる．ただし $\mathbb{B}_{\mathrm{Sym}}(\mathbf{0}_m,\, 1) = \{\mathbf{A} \in \mathrm{Sym}(n;\, \mathbb{R});\, \left\langle \mathbf{A},\, \mathbf{A} \right\rangle_{\mathrm{F}} \le 1\}$ である．よって，各 $\boldsymbol{a} \in \mathbb{B}_{\mathbb{R}^m}(\mathbf{0}_m,\, \lambda\eta)$ に対して $\mathbf{X} = \overline{\mathbf{X}} + \mathbf{Y} \in \mathrm{Sym}^+(n;\, \mathbb{R})$ かつ $\mathbf{Y} \in \mathbb{B}_{\mathrm{Sym}}(\mathbf{0}_m,\, \lambda)$ が存在して

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\alpha}(\overline{\mathbf{X}}) + \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{a}$$

となる．

関数 $f,\, g$ の定義 (eq:con-86a D.106) から

$$\mathrm{dom}\, f = \mathrm{Sym}^+(n;\, \mathbb{R}), \quad \mathrm{dom}\, g = \{\boldsymbol{b}\}$$

である．したがって $\lambda = \delta\eta$ かつ $|\boldsymbol{a}|_{2,\, m} \le \delta$ のとき (eq:con-83 D.102) から

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X})$$

と書ける．結局双対条件 (eq:con-82 D.101) をみたす．すると値関数

$$v(\boldsymbol{a}) = \inf_{\mathbf{X} \in \mathrm{Sym}(n;\, \mathbb{R})} \left\{ f(\mathbf{X}) + g\big(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) + \boldsymbol{a}\big) \right\}$$

は原点近くで有限の値を取るので，$\partial v(\mathbf{0}_m) \ne \varnothing$ となる．そこで

$$-\boldsymbol{y}^* \in \partial v(\mathbf{0}_m)$$

を取る．このとき, 任意の $\mathbf{X} \in \mathrm{Sym}(n;\,\mathbb{R})$ と $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^m$ に対して

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X}^*) + g\bigl(\mathbf{A}\mathbf{X}\bigr) &= v(\mathbf{0}) \le v(\boldsymbol{a}) + \langle \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{y}^* \rangle_{2,\,m} \\ &\le f(\mathbf{X}) + g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) + \boldsymbol{a}\bigr) + \langle \boldsymbol{a},\, \boldsymbol{y}^* \rangle_{2,\,m} \\ &= -\Bigl(\bigl\langle \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{y},\, \mathbf{X} \bigr\rangle_{\mathrm{F}} - f(\mathbf{X})\Bigr) - \Bigl(-\bigl\langle \boldsymbol{y},\, \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) + \boldsymbol{a} \bigr\rangle_{2,\,m} - g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}) + \boldsymbol{a}\bigr)\Bigr) \end{aligned}$$

を得る．上の式の最右辺を $\boldsymbol{a}$ に関して infimum を取ると

$$f(\mathbf{X}^*) + g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}^*)\bigr) \le -\Bigl(\bigl\langle \boldsymbol{\alpha}^\top(\boldsymbol{y}),\, \mathbf{X} \bigr\rangle_{\mathrm{F}} - f(\mathbf{X})\Bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*)$$

を得る．さらに上の式の右辺を $\mathbf{X}$ に関して infimum を取ると

$$f(\mathbf{X}^*) + g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}^*)\bigr) \le -f^*\bigl(\boldsymbol{\alpha}^\top(\boldsymbol{y}^*)\bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*)$$

を得る．逆向きの不等式は常に成立するので,

$$f(\mathbf{X}^*) + g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}^*)\bigr) = -f^*\bigl(\boldsymbol{\alpha}^\top(\boldsymbol{y}^*)\bigr) - g^*(-\boldsymbol{y}^*) \tag{D.113}$$

eq:con-90

を得る．(D.106) – (D.110) から

eq:con-86a eq:con-86c

$$\begin{aligned} f(\mathbf{X}^*) &= \bigl\langle \mathbf{C},\, \mathbf{X}^* \bigr\rangle_{\mathrm{F}}, \\ g\bigl(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}^*)\bigr) &= 0 (\Longleftrightarrow \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{X}^*) = \boldsymbol{b}), \\ f^*\bigl(\boldsymbol{\alpha}^\top(\boldsymbol{y}^*)\bigr) &= 0\, (\Longleftrightarrow \boldsymbol{\alpha}^\top(\boldsymbol{y}) \preceq \mathbf{C}), \\ g^*(-\boldsymbol{y}^*) &= -\langle \boldsymbol{y}^*,\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,m} \end{aligned}$$

となるので, これらを (D.113) に代入すると

eq:con-90

$$\bigl\langle \mathbf{C},\, \mathbf{X}^* \bigr\rangle_{\mathrm{F}} = \langle \boldsymbol{y}^*,\, \boldsymbol{b} \rangle_{2,\,m}$$

がわかる． □

D.11 最適化アルゴリズム

この節では, 3 つの基本的なアルゴリズムである最急降下法 (steepest-descent method), Newton 法, 共役勾配法 (conjugate-gradient method) について説明をする． 最初の 2 つのアルゴリズムに基づいて多くの最適化がなされている．最急降下法は収束のスピードは遅く実用的ではないが, 簡単で信頼性が高い．Newton 法は非線型方程式の解をみつける一般的な方法である．しかし解の近傍に初期値がないと停留点に収束しない場合がある．共役勾配法は凸 2 次計画法における最適化に用いると効果を発揮する．

D.11.1 多変数関数の微分

df:alg-1

定義 D.64. $U \subset \mathbb{R}^d$ を空でない開部分集合とし, $f : U \longrightarrow \mathbb{R}$ を関数とする. $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)^\top \in U$ に対し, 極限

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\boldsymbol{x}) := \lim_{t\to 0} \frac{f(x_1, \ldots, x_{i-1}, x_i + t, x_{i+1}, \ldots, x_d) - f(\boldsymbol{x})}{t} \qquad (i = 1, 2, \ldots, d)$$

が存在するとき, $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}(\boldsymbol{x})$ 点 $\boldsymbol{x}$ における x_i に関する f の**偏微分係数**という. すべての変数に関して偏微分係数が存在するとき, ベクトル

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) := \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_d}(\boldsymbol{x})\right)^\top$$

は f の**勾配** (gradient) という.

注意 D.65. $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_d)^\top \in \mathbb{R}^d$ とし

$$\boldsymbol{e}_i := (\underbrace{0, 0, \ldots, 0}_{i-1}, 1, 0, \ldots, 0)^\top \qquad (i = 1, 2, \ldots, d)$$

とする. すると

$$\boldsymbol{b} = b_1\boldsymbol{e}_1 + b_2\boldsymbol{e}_2 + \cdots + b_d\boldsymbol{e}_d$$

となる. □

df:alg-2

定義 D.66. 方向 $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^d$ に沿った点 $\boldsymbol{x} \in U$ における f の**方向微分**を

$$\dot{f}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{d}) = \lim_{t\searrow 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{d}) - f(\boldsymbol{x})}{t}$$

で定める. ただし $t > 0$ が 0 に近づくとき上の式の右辺の極限が存在するときに方向微分を定める.

明らかに $\alpha \geq 0$ に対して

$$\dot{f}(\boldsymbol{x}; \alpha\boldsymbol{d}) = \alpha\dot{f}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{d})$$

となる. したがって $\dot{f}(\boldsymbol{x}; -\boldsymbol{d}) = -\dot{f}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{d})$ であるので

$$\dot{f}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{d}) = \lim_{t\to 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{d}) - f(\boldsymbol{x})}{t}$$

となる. 実際

$$\dot{f}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{d}) = -\dot{f}(\boldsymbol{x}; -\boldsymbol{d}) = -\lim_{t\searrow 0} \frac{f(\boldsymbol{x} - t\boldsymbol{d}) - f(\boldsymbol{x})}{t} = \lim_{s\nearrow 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + s\boldsymbol{d}) - \boldsymbol{x})}{s}$$

よりわかる.

df:alg-3 **定義 D.67.** 関数 $f : U \longrightarrow \mathbb{R}$ は点 $\boldsymbol{x} \in U$ で Gâteaux 微分可能であるとは, 任意の方向 $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^d$ に対して, 方向微分 $\dot{f}(\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{d})$ は存在し, それが $\boldsymbol{d}$ の線型関数であるときをいう. f が U の任意の点 $\boldsymbol{x}$ で Gâtaeaux 微分可能のとき, f は U 上で Gâtaeux **微分可能**という.

注意 D.68. 関数 f が点 $\boldsymbol{x}$ において Gâteaux 微分可能とする. このとき, $\boldsymbol{d} = d_1\boldsymbol{e}_1 + d_2\boldsymbol{e}_2 + \cdots + d_d\boldsymbol{e}_d$ とおくと 方向微分 $\dot{f}(\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{d})$ は $\boldsymbol{d}$ の線型関数なので

$$\begin{aligned}\dot{f}(\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{d}) &= \dot{f}(\boldsymbol{x};\, d_1\boldsymbol{e}_1 + d_2\boldsymbol{e}_2 + \cdots + d_d\boldsymbol{e}_d) \\ &= d_1\dot{f}(\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{e}_1) + d_2\dot{f}(\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{e}_2) + \cdots + d_d\dot{f}(\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{e}_d) \\ &= \langle \boldsymbol{d},\, \nabla f(\boldsymbol{x}) \rangle_{2,\,d}\end{aligned}$$

となる. ただし, $\langle\,\cdot\,,\,\cdot\,\rangle_{2,\,d}$ は $\mathbb{R}^d$ 上の Euclid 内積である. □

df:alg-4 **定義 D.69.** 関数 $f : U \longrightarrow \mathbb{R}$ は点 $\boldsymbol{x}$ で Fréchet 微分可能であるとは, ある線型関数 $\ell : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ で $\ell(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{\ell},\, \boldsymbol{x} \rangle_{2,\,d}\, (\boldsymbol{\ell} \in \mathbb{R}^d)$ なるものが存在して

$$\lim_{|\boldsymbol{h}|_{2,\,d} \to 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) - f(\boldsymbol{x}) - \langle \boldsymbol{\ell},\, \boldsymbol{h} \rangle_{2,\,d}}{|\boldsymbol{h}|_{2,\,d}} = 0 \tag{D.114}$$ eq:alg-1

が成り立つときをいう. ただし, $|\cdot|_{2,\,d} = \sqrt{\langle\,\cdot\,,\,\cdot\,\rangle_{2,\,d}}$ である.

注意 D.70. ベクトル $o(\boldsymbol{h}) \in \mathbb{R}^d$ は

$$\lim_{|\boldsymbol{h}|_{2,\,d} \to 0} \frac{o(\boldsymbol{h})}{|\boldsymbol{h}|_{2,\,d}} = 0$$

をみたすものとする. この記号を用いると f が点 $\boldsymbol{x}$ で Fréchet 微分可能であることは

$$f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) = f(\boldsymbol{x}) + \langle \boldsymbol{\ell},\, \boldsymbol{h} \rangle_{2,\,d} + o(\boldsymbol{h}) \qquad (\boldsymbol{h} \to \boldsymbol{0}_d) \tag{D.115}$$ eq:alg-2

と書けることがわかる.

$\boldsymbol{h} = t\boldsymbol{e}_i\, (i = 1,\, 2,\, \ldots,\, d)$ と $t \neq 0$ と取る. $\boldsymbol{\ell} = (\ell_1,\, \ell_2,\, \ldots,\, \ell_d)^\top$ としたとき, (eq:alg-1 D.114) は

$$\lim_{t \to 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{e}_i) - f(\boldsymbol{x}) - t\ell_i}{t} = 0$$

と書きなおすことができる. このとき (eq:alg-2 D.115) は

$$f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) = f(\boldsymbol{x}) + \langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{h} \rangle_{2,\,d} + o(\boldsymbol{h}) \qquad (\boldsymbol{h} \to \boldsymbol{0}_d)$$

となる. □

thm:alg-5

定理 D.71. $U \subset \mathbb{R}^d$ は空でない開部分集合とし, 関数 $f : U \longrightarrow \mathbb{R}$ は点 $\boldsymbol{x} \in U$ で Féchet 微分可能とする. このとき, 関数 f は点 $\boldsymbol{x}$ で Gâteaux 微分可能である.

Proof. Fréchet 微分と Gâteaux 微分の定義から明らか. □

df:alg-6

定義 D.72. $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d$ を点とする. $[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}]$ は $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の間の線分とする. すなわち

$$[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}] = \{\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}^d;\ 0 \le t \le 1\}$$

である. 同様に, 両端点を含まない $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の間の線分を

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}^d;\ 0 < t < 1\}$$

とする. さらに, $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ のとき

$$[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}] = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \{\boldsymbol{x}\}$$

と定める.

lem:alg-7

補題 D.73. $U \subset \mathbb{R}^d$ を空でない開部分集合とし, 関数 $f : U \longrightarrow \mathbb{R}$ は U 上で Gâteaux 微分可能とする. $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in U$ は異なる点で $[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}] \subset U$ とする. このとき, 点 $\boldsymbol{z} \in (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ が存在して

$$f(\boldsymbol{y}) = f(\boldsymbol{x}) + \langle \nabla f(\boldsymbol{z}), \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,d}$$

とすることができる.

Proof. $\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) \in U$ なる任意の $t \in \mathbb{R}$ に対し

$$h(t) := f(\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}))$$

とおく. f は Gâteaux 微分可能なので, $h(t)$ は微分可能で

$$\dot{h}(t) = \langle \nabla f(\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})), \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,d}$$

この式は正しいのかを確認のこと. 2023/08/23 記.

となる. 1 変数実数値関数の中間値の定理から, ある $0 < \bar{t} < 1$ が存在して

$$h(1) - h(0) = \dot{h}(\bar{t}) = f(\boldsymbol{x} + \bar{t}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})) = \langle \nabla f(\boldsymbol{x} + \bar{t}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})), \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,d}$$

と書ける. ここで, $\boldsymbol{z} := \boldsymbol{x} + \bar{t}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})$ とおく. $h(0) = f(\boldsymbol{x})$ かつ $h(1) = f(\boldsymbol{y})$ となるので

$$f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{y}) = \langle \nabla f(\boldsymbol{z}), \boldsymbol{y} - \boldsymbol{x} \rangle_{2,d}$$

となる. □

thm:alg-8

定理 D.74. $U \subset \mathbb{R}^d$ を空でない開部分集合とし, $f : U \longrightarrow \mathbb{R}$ を関数とする. 関数 f は点 $\boldsymbol{x}_0 \in U$ で Gâteaux 微分可能で, $\partial f/\partial x_i \, (i = 1, 2, \ldots, d)$ は点 $\boldsymbol{x}_0$ で連続微分可能ならば, f は点 $\boldsymbol{x}_0$ で Fréchet 微分可能である.

Proof. 補題 D.73 (lem:alg-7) より任意の $\boldsymbol{h} \, (\neq \boldsymbol{0}_d) \in \mathbb{R}^d$ に対して, ある $\overline{\boldsymbol{x}} \in (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})$ が存在し

$$f(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{h}) - f(\boldsymbol{x}_0) - \langle \nabla f(\boldsymbol{x}_0), \boldsymbol{h} \rangle_{2,d} = \langle \nabla f(\overline{\boldsymbol{x}}) - \nabla f(\boldsymbol{x}_0), \boldsymbol{h} \rangle_{2,d}$$

と書ける. さらに, f の勾配 ∇f は点 $\boldsymbol{x}_0$ で連続であるので

$$|\nabla f(\overline{\boldsymbol{x}}) - \nabla f(\boldsymbol{x}_0)|_{2,d} \longrightarrow 0 \quad (|\boldsymbol{h}|_{2,d} \to 0)$$

となる. Cauchy-Schwarz の不等式とこのことから

$$\begin{aligned} \lim_{|\boldsymbol{h}|_{2,d} \to 0} \frac{|\nabla f(\overline{\boldsymbol{x}}) - \nabla f(\boldsymbol{x}_0)|_{2,d}}{|\boldsymbol{h}|_{2,d}} &\leq \lim_{|\boldsymbol{h}|_{2,d} \to 0} \frac{|\nabla f(\overline{\boldsymbol{x}}) - \nabla f(\boldsymbol{x}_0)|_{2,d} |\boldsymbol{h}|_{2,d}}{|\boldsymbol{h}|_{2,d}} \\ &= \lim_{|\boldsymbol{h}|_{2,d} \to 0} |\nabla f(\overline{\boldsymbol{x}}) - \nabla f(\boldsymbol{x}_0)|_{2,d} = 0 \end{aligned}$$

を得る. したがって

$$f(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{h}) - f(\boldsymbol{x}_0) - \langle \nabla f(\boldsymbol{x}_0), \boldsymbol{h} \rangle_{2,d} = o(\boldsymbol{h})$$

となり, f は点 $\boldsymbol{x}_0$ で Fréchet 微分可能であることが示せた. □

D.12 勾配降下法

D.12.1 降下方向

df:alg-9

定義 D.75. $\boldsymbol{x} \in M$ は $\nabla f(\boldsymbol{x}) \neq \boldsymbol{0}_n$ とする. したがって点 $\boldsymbol{x}$ は f の**停留点** (critical point) ではない. f の**降下方向** (descent direction) は $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^d \, (\neq \boldsymbol{0})$ で, ある $\bar{t} > 0$ が存在して

$$f(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{d}) < f(\boldsymbol{x}) \qquad (0 < \forall t < \bar{t})$$

をみたすときをいう. したがって十分小さなステップ幅 $t > 0$ に対して半直線 $\mathbb{R}_{++} := \{\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{d};\, t > 0\}$ 上で f は厳密に減少している.

lem:alg-10

補題 D.76. $\boldsymbol{x} \in U$ は f の停留点ではないとし, $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^d$ は $\boldsymbol{d} \neq \boldsymbol{0}_n$ とする. $\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{d} \right\rangle_{2,d} < 0$ のとき $\boldsymbol{d}$ は点 $\boldsymbol{x}$ における f の降下方向となる.
逆に $\boldsymbol{d}$ が点 $\boldsymbol{x}$ における降下方向としたとき $\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{d} \right\rangle_{2,d} \leq 0$ となる.

Proof. f は Gâteaux 微分可能なので

$$f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}) + t\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{d}\big\rangle_{2,\,d} + o(t) \tag{D.116}$$ eq:alg-3

となる. $\boldsymbol{d}$ は

$$\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{d}\big\rangle_{2,\,d} < 9$$

をみたすので十分小さな $t > 0$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{d}) < f(\boldsymbol{x})$$

となる.

逆に小さな $t > 0$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{d}) < f(\boldsymbol{x})$$

のとき, $t \downarrow 0$ とすると

$$\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{d}\big\rangle_{2,\,d} \leq 0$$

となる. □

D.12.2 最急降下方向

eq:alg-3
(D.116) から十分小さな $t > 0$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{d}) \approx f(\boldsymbol{x}) + t\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{d}\big\rangle_{2,\,d}$$

と書ける. $t > 0$ を固定する. $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^d$ で $|\boldsymbol{d}|_{2,d} = 1$ に対して $\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{d}\big\rangle_{2,\,d}$ を最小にするものが f を最小にする方向である.

$\nabla f(\boldsymbol{x})$ と $\boldsymbol{d}$ の角度を θ とする. このとき

$$\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, \boldsymbol{d}\big\rangle_{2,\,d} = \big|\nabla f(\boldsymbol{x})\big|_{2,\,d} \cdot |\boldsymbol{d}|_{2,d} \cos\theta = \big|\nabla f(\boldsymbol{x})\big|_{2,\,d} \cos\theta$$

となるので $\cos\theta = -1$ と取ると

$$\boldsymbol{d} := -\frac{\nabla f(\boldsymbol{x})}{\big|\nabla f(\boldsymbol{x})\big|_{2,\,d}}$$

となる. このことより方向 $\boldsymbol{d} = -\nabla f(\boldsymbol{x})$ を点 $\boldsymbol{x}$ における f の**最急降下方向** (steepest descent direction) とよぶ.

D.12.3　ステップ幅の選択方法

$k = 1, 2, \ldots$ とする. $\boldsymbol{x}_k$ における降下方向 $\boldsymbol{d}_k$ が選択されると, ステップ幅 t_k を適切に選択して, 次の点 $\boldsymbol{x}_{k+1}$ を

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + t\boldsymbol{d}_k \qquad (t_k > 0)$$

と定める. この方法を**直接降下法**と呼ぶ. t_k を適切に探索しないと $\boldsymbol{x}_k$ が停留点に収束する保証が得られないことがある.

代表的なステップ幅の選択方法である Armijo 法, Goldstein 法, Wolfe 法を説明する.

Armijo 法

$s > 0,\ 0 < \beta < 1,\ 0 < \sigma < 1$ を固定する. $i = 0, 1, 2, \ldots$ に対して

$$f(\boldsymbol{x}_k) - f(\boldsymbol{x}_k + \beta^i s\boldsymbol{d}_k) \geq -\sigma(\beta^i s)\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k \big\rangle_{2,\,d} \tag{D.117}$$

eq:alg-4

をテストする.

$i = 0$ とすると

$$f(\boldsymbol{x}_k) - f(\boldsymbol{x}_k + s\boldsymbol{d}_k) \geq -\sigma\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}),\, s\boldsymbol{d}_k \big\rangle_{2,\,d} \tag{D.118}$$

eq:alg-5

をテストすることになる. 不等式 (D.118) が成り立てば

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + s\boldsymbol{d}_k$$

とする. 逆に, (D.118) が成立していなければ, ステップ幅が大きすぎるので, $i = 1$ の (D.117) をテストする. すなわち

$$f(\boldsymbol{x}_k) - f(\boldsymbol{x}_k + \beta s\boldsymbol{d}_k) \geq -\beta\sigma\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, s\boldsymbol{d}_k \big\rangle_{2,\,d}$$

をテストする.

以上の操作を繰り返して, i をおおくしていくとある i で (D.117) が必ず成立する.

このことを背理法を用いて証明する. すなわち, (D.117) をみたす $i \in \mathbb{N}$ が存在しないと仮定して, 矛盾を導く. i が十分おおきいとき, $t := \beta^i s > 0$ は十分小さい. したがって (D.117) において

$$f(\boldsymbol{x}_k + t\boldsymbol{d}_k) < f(\boldsymbol{x}_k) + \sigma t\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k \big\rangle_{2,\,d}$$

であったとする. ここで, 上式と

$$f(\boldsymbol{x}_k + t\boldsymbol{d}_k) = f(\boldsymbol{x}_k) + t\big\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k \big\rangle_{2,\,d} + o(t)$$

を比較すると

$$(\sigma-1)\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}+\frac{o(t)}{t}<0$$

となる．$t\to 0$ とすると

$$(\sigma-1)\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}\le 0$$

となり, $\sigma-1<0$ なので

$$\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}>0$$

ととなる．これは $\boldsymbol{d}_k$ が降下方向であることと矛盾することから (D.117) eq:alg-4 をみたす i が存在することがわかる．

$\mathbb{R}^d$ の点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は最急降下法により求められる点列とし, $\boldsymbol{d}_k$ を $\boldsymbol{x}_k$ における f の降下方向とする．$-\nabla f(\boldsymbol{x}_k)$ と $\boldsymbol{d}_k$ の角度を θ_k と書く．するとある $\epsilon>0$ が存在して

$$\cos\theta_k:=\frac{\big\langle-\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}}{\big|\nabla f(\boldsymbol{x}_k)\big|_{2,\,d}}\in(\epsilon,\, 1] \qquad |\boldsymbol{d}_k|_{2,\,d}=1 \tag{D.119}$$

eq:alg-6

となる．

Goldstein 法

Güller (2010, pp.365-366) からの借用.

$c\in(0,\,1/2)$ を固定する．降下方向 $\boldsymbol{d}_k\,(k=1,\,2,\,\ldots)$ に対して, ステップ幅 t_k を t に関する不等式

$$f(\boldsymbol{x}_k)+(1-c)t\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}\le f(\boldsymbol{x}_k+t\boldsymbol{d}_k)\le f(\boldsymbol{x}_k)+ct\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}$$

をみたすように取る．そして

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k+t_k\boldsymbol{d}_k$$

と定める．

Wolfe 法

Güller (2010, p. 366) からの借用.

ふたつの定数 $0<c_1<c_2<1$ を固定する．降下方向 $\boldsymbol{d}_k\,(k=1,\,2,\,\ldots)$ に対して, ステップ幅 t_k を t に関する不等式

$$f(\boldsymbol{x}_k+t\boldsymbol{d}_k)\le f(\boldsymbol{x}_k)+c_1t\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d},$$
$$\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k+t\boldsymbol{d}_k,\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}\ge c_2\big\langle\nabla f(\boldsymbol{x}_k),\, \boldsymbol{d}_k\big\rangle_{2,\,d}$$

をみたすように取る．そして

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k+t_k\boldsymbol{d}_k$$

と定める．

D.13 降下法アルゴリズムの収束

Armijo 法でステップ幅を定めた最急降下法の収束を保証する定理を述べる．Goldstein 法と Wolfe 法による降下法の収束は Güller (2010, pp. 367-368) を参照のこと．

thm:alg-11

定理 D.77. $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ を降下法によって生成された点列で

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{d}_k$$

とする．ただし $\boldsymbol{d}_k$ は (D.117) をみたし，α_k はパラメータ s, β, σ に対する Armijo 条件をみたしているとする．$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^*$ としたとき $\boldsymbol{x}^*$ は f の停留点になる．すなわち

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_d$$

をみたす．

Proof. 背理法で証明する．すなわち，$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \neq \boldsymbol{0}_d$ を仮定して矛盾を導く． 必要であれば $\{\boldsymbol{d}_k\}_{k=1}^{\infty}$ の部分列を取ることで $\{\boldsymbol{d}_{k_i}\}_{i=1}^{\infty}$ はある点 $\boldsymbol{d}^* \in \{\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^d;\, |\boldsymbol{d}|_{2,\,d} = 1\}$ に収束する． i 段階において Armijo 条件が成立していたとする．すなわち

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_{k_i}) - f(\boldsymbol{x}_{k_i} + \alpha_{k_i}\boldsymbol{d}_{k_i}) &\geq -\sigma\alpha_{k_i}\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i}\right\rangle_{2,\,d} \\ &= \sigma\alpha_{k_i}\left|\nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i})\right|_{2,\,d}\cos\theta_{k_i} \\ &\geq \epsilon\sigma\alpha_{k_i}\left|\nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i})\right|_{2,\,d} \qquad \text{(D.120)} \end{aligned}$$

eq:alg-7

となる．ただし，ϵ は (D.119) で定めたものである． α_{k_i} で Armijo 条件が成立しているので，$i-1$ ステップでは Armijo 条件は成立していないことになる．このことから

$$f(\boldsymbol{x}_{k_i}) - f\left(\boldsymbol{x}_{k_i} + \frac{\alpha_{k_i}}{\beta}\boldsymbol{d}_{k_i}\right) < -\sigma\frac{\alpha_{k_i}}{\beta}\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i}\right\rangle_{2,\,d} \qquad \text{(D.121)}$$

eq:alg-8

が成立していることになる．$k \to \infty$ のとき，点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は $\boldsymbol{x}^*$ に収束するので，その部分列も $\boldsymbol{x}^*$ に収束する．よって，$\boldsymbol{x}_{k_i} \longrightarrow \boldsymbol{x}^*\,(i\to\infty)$ で $\{f(\boldsymbol{x}_{k_i})\}_{i=1}^{\infty}$ は減少列なので，f の連続性から

$$f(\boldsymbol{x}_{k_i}) \searrow f(\boldsymbol{x}^*)$$

となる． (D.120) の左辺は $i \to \infty$ のとき 0 に収束する．なぜならば $f(\boldsymbol{x}_{k_i}) - f(\boldsymbol{x}_{k_{i+1}}) \longrightarrow 0\,(i \to \infty)$ からわかる． さらに $\alpha_{k_i} = |\boldsymbol{x}_{k_i} - \boldsymbol{x}_{k_{i+1}}|_2 \longrightarrow 0\,(i\to\infty)$ なので，(D.120) の他の項も $i\to\infty$ のときに 0 に収束する．$\boldsymbol{d}_k$ の定め方から (D.119) が成立するので，

$$\lim_{i\to\infty}\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i}\right\rangle_{2,\,d} = \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{d}^*\right\rangle_{2,\,d} \quad \text{かつ} \quad \left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i}\right\rangle_{2,\,d} < 0$$

である. さらに, 背理法の仮定から $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \neq \boldsymbol{0}_d$ なので

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{d}^* \right\rangle_{2,\,d} < 0, \quad \alpha_{k_i} = |\boldsymbol{x}_{k_i} - \boldsymbol{x}_{k_{i+1}}|_{2,\,d} \longrightarrow 0\,(i \to \infty) \tag{D.122}$$

eq:alg-9

がわかる. i が十分大きいとき $\boldsymbol{x}_{k_i}$ においてバックトラックが必要となることがわかる.

一方, 中間値の定理から $\boldsymbol{z}_{k_i} \in \left(\boldsymbol{x}_{k_i},\, \boldsymbol{x}_{k_i} + \dfrac{\alpha_{k_i}}{\beta}\boldsymbol{d}_{k_i}\right)$ が存在して

$$f(\boldsymbol{x}_{k_i}) - f\left(\boldsymbol{x}_{k_i} + \frac{\alpha_{k_i}}{\beta}\boldsymbol{d}_{k_i}\right) = -\frac{\alpha_{k_i}}{\beta}\left\langle \nabla f(\boldsymbol{z}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i} \right\rangle_{2,\,d}$$

とできる. (D.121) と比較すると

$$\begin{aligned} &-\frac{\alpha_{k_i}}{\beta}\left\langle \nabla f(\boldsymbol{z}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i} \right\rangle_{2,\,d} < -\sigma\frac{\alpha_{k_i}}{\beta}\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i} \right\rangle_{2,\,d} \\ &\Longleftrightarrow \left\langle \nabla f(\boldsymbol{z}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i} \right\rangle_{2,\,d} > \sigma\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}_{k_i}),\, \boldsymbol{d}_{k_i} \right\rangle_{2,\,d} \end{aligned}$$

を得る. $i \to \infty$ のとき $\lim \boldsymbol{z}_{k_i} = \boldsymbol{x}^*$ となり, $0 < \sigma < 1$ なので, 上の 2 番目の不等式より

$$\left\langle \nabla f(\boldsymbol{x}^*),\, \boldsymbol{d}^* \right\rangle_{2,\,d} \geq 0$$

を得る. これは (D.122) と矛盾. よって $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}_d$ を示すことができた. □

D.14 章末注釈と参考文献

関連図書

Bisgard [1] Bisgard, J. (2021). Analysis and Linear algebra: The Singular Value Decomposition and Applications. *Student Mathematical Library* **94**. American Mathematical Society.

Borwein [2] Borwein, J.M., Lewis, A.S. (2006). ConvexAnalysis and Nonlinear Optimization Theory and Examples, 2nd. edition. Spriner.

Boyd [3] Boyd, S., Vandenberghe, L. (2018). Introduction to Applied Linear algebra. Cambridge University Press.

Durrett [4] Durrett, R. (2019). Probability, 2nd. edition. *Cambridge Series in Statistical and Probalistic Mathematics*.

Evans [5] Evans, L.C. (2021). Mathematics 170 MATHEMATICAL METHODS FOR OPTIMIZATION Finite Dimensional Optimization Spring 2021 version. `https://math.berkeley.edu/~evans/math%20170%20notes.pdf` (accessed at 2023/09/24).

Gallier [6] Gallier, J. (2001). Geometrical Methods and Applications. *Texts in Applied Mathematics* **38**. Springer.

Guller [7] Güller, O. (2010). Foundations of Optimization. *Graduate Texts in Mathematics*. Springer.

Hult [8] Hult, H. (2015). Lecture note on SF3961 Graduate course in Statistical inference. `https://www.math.kth.se/matstat/gru/Statistical\%20inference/literature.html` (accessed at 2023/06/03).

Kaipio [9] Kaipio, J., Somerslo, E. (2005). Statistical and Computational Inverse Problems. *Applied Mathematical Sciences* **60**. Springer.

Keener [10] Keener, R.W. (2010). Theoretical Statistics. *Springer Texts in Statistics*. Springer.

Kroese [11] Kroese, D.P., Botex, Z.I., Taimire, T., and Vaisman, R. Data Science and Machine Learning *Chapman & Hall/CRC*.

Lederer [12] LEDERER, J. (2022). Fundamentals of High-Dimensional Statistics with Exercies and R Labs. *Springer Text in Statistics*. Springer.

Wu [13] WU, C. F. J. (1983). On the convergence properties of the EM algorithm. *Annals of Statistics* **11** 95-103.

新井 [14] 新井仁之 (2006). 線形代数　基礎と応用 (第 1 刷). 日本評論社.

笠原 [15] 笠原勇二 (2013). 明解 確率論入門 (第 1 版第 2 刷). 日本評論社.

河野 [16] 河野敬雄 (2013). 確率概論 (初版第 5 刷). 京都大学学術出版.

黒田 [17] 黒田正博 (2020). EM アルコリズム (初版第 1 刷). 共立出版.

高橋 [18] 高橋礼二 (2019). 線型代数講義 (第 1 版第 2 刷). 日本評論社.

永原 [19] 永原正章 (2020). スパースモデリング (第 1 版第 4 刷). コロナ社.

柳田 [20] 柳田英二 (2022). 解析入門 (第 1 版第 1 刷). 裳華房.