

最小 2 乗法と統計的回帰分析

数学概論 A (2025 年 5 月 14 日) ^a

今野 良彦
大阪公立大学

^a2023 年 6 月 21 に行った講義後に受講生より指摘された当日使用した資料の誤りを訂正したものをもとに, 今回のために本編の一部修正し, 補遺 C を大幅に追記した.

概要

19 世紀の初頭に Carl Friedrich Gauss と Adrien-Marie Legendre によって独立に発見された最小 2 乗法は現代においても重要な役割を果たす. 線型代数の言葉を使い, この手法の理解を目指す. さらに統計的回帰分析における最小 2 乗法とその発展形の現代的な役割を簡単に解説する.

目次

0	記号一覧	3
1	最小 2 乗法の起源と考え方	5
2	連立 1 次方程式と過剰決定問題	6
3	最小 2 乗問題	8
3.1	最小 2 乗解の求め方	10
4	最小 2 乗法によるデータのあてはめ	11
5	ridge 解と lasso ¹ 解	15
6	統計的回帰モデルと最小 2 乗法	18

¹Least absolute shrinkage and selection operator.

7	文献についての注意	21
A	補遺: 特異値分解の補足説明	23
B	補遺: Moore-Penrose の一般化逆行列	30
C	補遺: 凸関数	33
C.1	凸関数の性質	33
C.2	凸集合とその性質	35
C.3	共役凸関数と Young の不等式	37
C.4	共役関数と右逆関数	41
C.5	補遺: C 節の定理の証明	43

0 記号一覧

記号	説明
$\mathbb{N}$	自然数全体の集合.
$\mathbb{R}$	実数全体の集合.
$\mathbb{R}^n$	有限 n 個の実数空間の直積集合.
$\text{Mat}(n, m; \mathbb{R})$	n 行 m 列の実行列全体のなす集合. $\text{Mat}(n, n; \mathbb{R})$ を $\text{Mat}(n; \mathbb{R})$ と書く.
$\mathbf{I}_n$	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.
$\mathbf{A}^\dagger$	m 行 n 列の行列 $\mathbf{A}$ の Moore-Penrose の一般化逆行列. これは n 行 m 列の行列.
$\text{range}(\mathbf{A})$	行列 $\mathbf{A}$ が定めた線型変換の値域 (像).
$\text{ker}(\mathbf{A})$	行列 $\mathbf{A}$ が定めた線型変換の核.
$\text{rank}(\mathbf{A})$	行列 $\mathbf{A}$ の階数 (ランク).
$\text{span}(\mathbf{A})$	行列 $\mathbf{A}$ の列で張られるベクトル空間.
$\det(\mathbf{A})$	正方行列 $\mathbf{A}$ の行列式.
$\text{tr}(\mathbf{A})$	正方行列 $\mathbf{A}$ のトレース. すなわち, 対角成分の和.
$*$	真の母数を表す記号. 数学的な意味はない.
$\sim$	確率変数を表す記号. $\tilde{x}$ と書いたら, これは確率変数であることを示す. ただし, この規則は補遺では適用しない.
$ \cdot _{2,n}$	$\mathbb{R}^n$ 上の Euclid ノルム. すなわち, ベクトルの成分の 2 乗の和の平方根.
$ \cdot _{1,n}$	$\mathbb{R}^n$ 上の絶対値ノルム. すなわち, ベクトルの成分の絶対値の和.
$ \cdot _{0,n}$	零でない成分の個数で与えられる $\mathbb{R}^n$ 上のノルム.
$\ \mathbf{A}\ $	行列 $\mathbf{A}$ が表す線型変換の作用素ノルム. $\mathbf{A}$ が正方行列の場合には, $\ \mathbf{A}\ $ は行列 $\mathbf{A}$ の固有値の絶対値の最大値.
Pr	確率.
$\text{N}(0, \sigma^2)$	平均が 0 で分散が σ^2 の正規分布.
$\arg \min_x f(x)$	関数 $f(x)$ の最小値を与える点すべてからなる集合.

文字の使い方:

- スカラーは通常の字体の小文字で表す.

- ベクトルは太文字の小文字で表し, 縦ベクトルとする.
- 行列は太文字の大文字で表す.

1 最小 2 乗法の起源と考え方

統計学において、最小 2 乗法の最初の遭遇は 2 変数間の関係を表す散布図 (scatter diagram) に直線を引くときであろう。直線で変数間の関係を代表するもの (回帰直線と呼ばれる) を実現するための 1 つの方法と位置づけることができる。Legendre は 1805 年に最小 2 乗法の計算方法を明示した²。子午線データに最小 2 乗法を適用して、「メートルの長さ」を決定した。

$n \geq 3 (n \in \mathbb{N})$ とし、データ $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ を観測したとする。ただし、話を簡単にするために $x_1, x_2, \dots, x_n$ はすべて異なる値と仮定する。直線は異なる 2 点で 1 つ定まるので、単純にデータの 2 点を結ぶことにより直線をひくと、 $\frac{n(n-1)}{2}$ 個の直線ができる。ある意味で直線をひくためにはデータが過剰である。

いま、データの関係を表す直線の式を

$$y = \beta_1 + \beta_2 x \quad (1.1)$$

と書く。いま、 n 点 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ すべてを通る直線はないと仮定する。すなわち、連立方程式

$$\begin{cases} \beta_1 + x_1 \beta_2 = y_1 \\ \beta_1 + x_2 \beta_2 = y_2 \\ \vdots \\ \beta_1 + x_n \beta_2 = y_n \end{cases}$$

をみたす解 (β_1, β_2) は存在しない。そのような直線は存在しないが、 β_1 と β_2 をデータからうまい具合に定めたいわけである。そのために $x_i (i = 1, 2, \dots, n)$ と直線 $y = \beta_1 + \beta_2 x$ によって予想された値を $\hat{y}_i := \beta_1 + \beta_2 x_i$ と書く。実際のデータの値 y_i と x_i と直線 (1.1) による y_i の予想値 $\hat{y}_i$ の差 $e_i := y_i - \hat{y}_i$ を残差 ということにする。すると問題は残差の全体 (これはデータに対する直線の当てはまりの悪さを表す量と考えることができる) をなるべく小さくする直線をさがすことになる。たとえば

$$\min_{\beta_1, \beta_2} \sum_{i=1}^n |e_i| \quad (1.2)$$

$$\min_{\beta_1, \beta_2} \sum_{i=1}^n e_i^2 \quad (1.3)$$

の最小化問題を解けばよい。(1.2) で与えられる最小化問題の解を最小絶対値解とよび、(1.3) で与えられる最小化問題の解を最小 2 乗解とよぶ。

²ただし、最小 2 乗法の発明の priority については統計学史においては見解の一致にいまだいないようである。

残差の絶対値または 2 乗和は (β_1, β_2) の凸関数である. 凸関数の性質から (1.2) と (1.3) の解は存在することはわかる³.

解が陽に書ける最小 2 乗解を求めるために

$$h(\beta_1, \beta_2) = \sum_{i=1}^n \{y_i - (\beta_1 + \beta_2 x_i)\}^2$$

とおく. これを β_1, β_2 に関して偏微分して整理すると

$$\begin{cases} n\beta_1 + (\sum_{i=1}^n x_i)\beta_2 = \sum_{i=1}^n y_i \\ (\sum_{i=1}^n x_i)\beta_1 + (\sum_{i=1}^n x_i^2)\beta_2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases} \quad (1.4)$$

を得る. これを解けばよい. この最適問題は狭義凸最適問題なので, 最適解は一意的に存在するので, この必要条件 (1.4) を解けば解が与えられる.

2 連立 1 次方程式と過剰決定問題

前節の議論を線型代数の言葉を用いて考えてみる. $n \geq d$ ($d, n \in \mathbb{N}$) とする. d 個の未知数 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d$ に関する n 個の (実係数の) 1 次方程式の系

$$\begin{cases} x_{11}\beta_1 + x_{12}\beta_2 + \cdots + x_{1d}\beta_d = y_1 \\ x_{21}\beta_1 + x_{22}\beta_2 + \cdots + x_{2d}\beta_d = y_2 \\ \vdots \\ x_{n1}\beta_1 + x_{n2}\beta_2 + \cdots + x_{nd}\beta_d = y_n \end{cases}$$

を考える. 係数の行列とベクトルを

$$\mathbf{X} := \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nd} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\beta} := \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d; \quad \mathbf{y} := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

と記せば, 連立 1 次方程式系は

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{y} \quad (2.1)$$

と書き直せる. 次の定理で方程式 (2.1) の解が存在するための必要十分条件を述べる.

³この問題は狭義凸関数の最適問題である. 節 ?? の議論から最小解は一意的に存在することがわかる.

定理 2.1. 方程式 (2.1) が解を持つための必要十分条件は

$$\text{rank}(\mathbf{X}) = \text{rank}([\mathbf{X} : \mathbf{y}]) \quad (2.2)$$

である. すなわち

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nd} \end{pmatrix} \quad \text{と} \quad \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & y_1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nd} & y_n \end{pmatrix}$$

が同じランクをもつことである.

Proof. 行列 $\mathbf{X}$ の各列を $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_d (\in \mathbb{R}^n)$ と記すと

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{y} \quad \Longleftrightarrow \quad \beta_1\mathbf{x}_1 + \beta_2\mathbf{x}_2 + \cdots + \beta_d\mathbf{x}_d = \mathbf{y}$$

となる. ここで

$$\begin{aligned} \text{span}(\mathbf{X}) &:= \{a_1\mathbf{x}_1 + a_2\mathbf{x}_2 + \cdots + a_d\mathbf{x}_d \in \mathbb{R}^n; a_1, a_2, \dots, a_d \in \mathbb{R}\} \\ \text{span}([\mathbf{X} : \mathbf{y}]) &:= \{a_1\mathbf{x}_1 + a_2\mathbf{x}_2 + \cdots + a_d\mathbf{x}_d + a_{d+1}\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n; a_1, a_2, \dots, a_{d+1} \in \mathbb{R}\} \end{aligned}$$

とおくと

$$\begin{aligned} \text{rank}(\mathbf{X}) &= \dim(\text{span}(\mathbf{X})), \\ \text{rank}([\mathbf{X} : \mathbf{y}]) &= \dim(\text{span}([\mathbf{X} : \mathbf{y}])) \end{aligned}$$

となる. だから

$$\text{rank}(\mathbf{X}) = \text{rank}([\mathbf{X} : \mathbf{y}]) \quad \Longleftrightarrow \quad \text{span}(\mathbf{X}) = \text{span}([\mathbf{X} : \mathbf{y}])$$

がわかる. よって

$$\text{rank}(\mathbf{X}) = \text{rank}([\mathbf{X} : \mathbf{y}]) \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{y} \in \text{span}(\mathbf{X})$$

がわかる. □

系 2.2. 方程式 (2.1) が一意的な解をもつための必要十分条件は (2.2) かつ

$$\text{rank}(\mathbf{X}) = d$$

である.

Proof. β_0 を方程式 $\mathbf{X}\beta = \mathbf{y}$ の一つの解とする. 斉次^{せいじ}方程式 $\mathbf{X}\beta = \mathbf{0}_n$ の解を $\tilde{\beta}$ を用いると, 方程式 (2.1) の解は $\beta_0 + \tilde{\beta}$ と書ける. ただし $\mathbf{0}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の零ベクトルである. したがって解が一意であるための必要十分条件は, $\beta_0 = \mathbf{0}_d$ である. このことから, 解が一意であるための必要十分条件は

$$\ker(\mathbf{X}) := \{\beta \in \mathbb{R}^d; \mathbf{X}\beta = \mathbf{0}_n\} = \{\mathbf{0}_d\} \iff \text{rank}(\mathbf{X}) = d$$

であることがわかる. □

3 最小 2 乗問題

過剰決定下では, 方程式 $\mathbf{X}\beta = \mathbf{y}$ の解は存在しない. その代わりに近似解を以下のように考えよう. ベクトル β に対する残差ベクトル e を

$$e := \mathbf{X}\beta - \mathbf{y} \quad (3.1)$$

と定める. 近似解として残差ベクトル e ができるだけ小さくなるものを採用する.

いま, ベクトル $e = (e_1, e_2, \dots, e_d)^\top$ に対して

$$|e|_{1,d} := \sum_{i=1}^d |e_i|, \quad |e|_{2,d} := \sqrt{\sum_{i=1}^d e_i^2} \quad (3.2)$$

とおく. このとき, 最小 2 乗解 $\hat{\beta}^{\text{ls}}$ と最小絶対値解 $\hat{\beta}^{\text{ab}}$ をそれぞれ

$$\begin{aligned} |\mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ls}} - \mathbf{y}|_{2,n} &\leq |\mathbf{X}\beta - \mathbf{y}|_{2,n} \quad (\forall \beta \in \mathbb{R}^d), \\ |\mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ab}} - \mathbf{y}|_{1,n} &\leq |\mathbf{X}\beta - \mathbf{y}|_{1,n} \quad (\forall \beta \in \mathbb{R}^d) \end{aligned}$$

をみたすもので定めることにする. これらを方程式 (2.1) の近似解と考える.

注意 3.1. 凸関数の性質から

$$\{\hat{\beta}^{\text{ab}} \in \mathbb{R}^d; |\mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ab}} - \mathbf{y}|_{1,n} \leq |\mathbf{X}\beta - \mathbf{y}|_{1,n} (\forall \beta \in \mathbb{R}^d)\} \neq \emptyset$$

となることが知られている.

注意 3.2. 最小 2 乗解が広く用いられるのは, 解析的に扱いやすいことが一つの理由であろう.

例 3.3.

$$\mathbf{X} := \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

とする. すなわち

$$\begin{cases} 2\beta_1 = 1 \\ -\beta_1 + \beta_2 = 0 \\ 2\beta_2 = -1 \end{cases}$$

を考える. すると定理 2.1 から直ちに解が存在しないことがわかる. 最小 2 乗解は, β に関する最小化問題

$$\text{minimize} \left\{ (2\beta_1 - 1)^2 + (-\beta_1 + \beta_2)^2 + (2\beta_2 + 1)^2 \right\} \quad (3.3)$$

の解として与えられる. すると

$$\hat{\beta}^{\text{ls}} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

がわかる. さらに

$$\hat{\mathbf{e}} := \mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ls}} - \mathbf{y} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ls}} - \mathbf{y}|_{2,3}^2 = \frac{2}{3}$$

を得る. 一方, 連立 1 次方程式

$$\begin{cases} 2\beta_1 = 1 \\ 2\beta_2 = -1 \end{cases}$$

を考える. 上の連立 1 次方程式の解 β_0 は

$$\beta_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

で与えられ

$$|\mathbf{X}\beta_0 - \mathbf{y}|_{2,3}^2 = 1$$

となる. よって, $\mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ls}}$ より $\mathbf{X}\beta_0$ は $\mathbf{y}$ からより離れていることがわかる. すなわち

$$\mathbf{X}\hat{\beta}^{\text{ls}} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

が $\mathbf{y}$ に最も近いことがわかる. これは $\mathbf{y}$ の $\mathbf{X}$ の列で張られる部分空間への直交射影になっていることがわかる. $\square$

3.1 最小 2 乗解の求め方

いま

$$f(\boldsymbol{\beta}) = \|\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y}\|_{2,n}^2, \quad \nabla := \left(\frac{\partial}{\partial \beta_1}, \frac{\partial}{\partial \beta_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial \beta_d} \right)^\top, \\ \boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d)^\top$$

とおくと最小 2 乗解 $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}}$ は方程式

$$\nabla f(\boldsymbol{\beta}) := \left(\frac{\partial f}{\partial \beta_1}(\boldsymbol{\beta}), \frac{\partial f}{\partial \beta_2}(\boldsymbol{\beta}), \dots, \frac{\partial f}{\partial \beta_d}(\boldsymbol{\beta}) \right)^\top = \mathbf{0}_d \quad (3.5)$$

をみたさなければならない. すると (3.5) の左辺は

$$\nabla f(\boldsymbol{\beta}) = 2\mathbf{X}^\top(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y}) \quad (3.6)$$

と書けることがわかる. 実際, 以下の議論からわかる. $\mathbb{R}^d$ のベクトル $\mathbf{x}$ の第 k 成分を $(\mathbf{x})_k$ (x_k と記す), 行列 $\mathbf{X}$ の第 (i, j) 成分を $(\mathbf{X})_{ij}$ (x_{ij} と記す) と記すことにする. すると $k = 1, 2, \dots, d$ に対して

$$\begin{aligned} (\nabla f(\boldsymbol{\beta}))_k &= \sum_{i=1}^n 2 \left(\sum_{j=1}^d x_{ij} \beta_j - y_i \right) x_{ik} = \sum_{i=1}^n 2 (\mathbf{X}^\top)_{ki} (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y})_i \\ &= (2\mathbf{X}^\top(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y}))_k \end{aligned}$$

からわかる.

(3.5) と (3.6) から

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X}^\top \mathbf{y} \quad (3.7)$$

を得る. この方程式を正規方程式という.

さらに $\mathbf{X}$ の列ベクトルが 1 次独立 のとき, 正方行列 $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \in \text{Mat}(d; \mathbb{R}^d)$ は可逆となり, (3.7) から

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

となることがわかる. さらに d 行 n 列の行列 $(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$ を $\mathbf{X}^\dagger$ と記し, n 行 d 列の行列 $\mathbf{X}$ の Moore-Penrose の一般化逆行列とよぶ. すなわち

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y}$$

である.

実際, $n \geq d$ で $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ が正則のとき, $\mathbf{X}^\dagger \mathbf{X} = \mathbf{I}_d$ となるので

$$\begin{aligned}
\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} &= \mathbf{X}^\top \mathbf{y} \Leftrightarrow (\mathbf{X}^\dagger)^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = (\mathbf{X}^\dagger)^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{y} \\
&\Leftrightarrow (\mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger)^\top \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = (\mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger)^\top \mathbf{y} \\
&\Leftrightarrow \mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y} \quad (\because ((\text{B.5}))) \\
&\Leftrightarrow \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y} \quad (\because ((\text{B.3}))) \\
&\Leftrightarrow \mathbf{X}^\dagger \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y} \\
&\Leftrightarrow \hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y} \quad (\because ((\text{B.4})) \text{ と } \mathbf{X}^\dagger \mathbf{X} = \mathbf{I}_d)
\end{aligned}$$

からわかる. 特に, $n = d$ のときは, $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X}^{-1} \mathbf{y}$ である.

注意 3.4. 一般には $\mathbf{X}^\dagger \mathbf{X} \neq \mathbf{I}_d$, $\mathbf{X} \mathbf{X}^\dagger \neq \mathbf{I}_n$ である. ただし $\mathbf{I}_d$ は d 次の単位行列である. Moore-Penrose の一般化逆行列の定義については, 補遺の節 B を参照のこと. $\square$

4 最小 2 乗法によるデータのあてはめ

2 次元のデータ (y, x) が

$$\tilde{y} = \sin x + \tilde{\epsilon} \quad (4.1)$$

というモデルで表現されているとする. 変数 $\tilde{y}$ を応答変数といい, x を説明変数 (ランダムではない変数) とよぶことにする. $\tilde{\epsilon}$ は誤差 (確率変数) で観測できない量である. 通常, (4.1) の左辺の一項目の関数は未知なので, 同一条件のもとでの繰り返しの観測されたデータに基づき一項目の関数を何らかの形で回復 (推定) することを考える.

たとえば, $\tilde{\epsilon} \sim \text{N}(0, 0.04)$ (平均が 0 で分散が 0.04 の正規分布) に従うと仮定して, 疑似的にデータを作成した結果が以下である.

x	0	1	2	3	4	5	6
y	-0.0343	1.0081	0.8326	0.04047	-0.7585	-0.9285	-0.2110
x	7	8	9	10			
y	0.6626	0.08492	0.2761	-0.6962			

すなわち

$$(x_1, y_1) = (0, -0.0343), (x_2, y_2) = (1, 1.0081), \dots, (x_{11}, y_{11}) = (10, -0.6962)$$

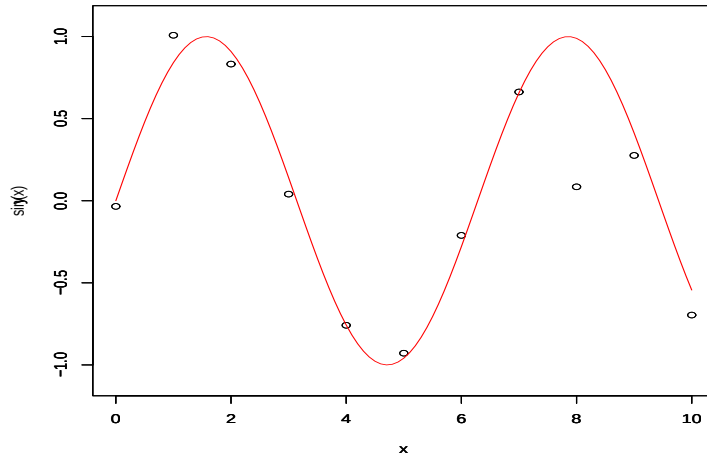


図 1: データの散布図

である.

まず, 多項式曲線

$$f(x) = \beta_1 + \beta_2 x + \beta_3 x^2 + \cdots + \beta_{11} x^{10}$$

をデータにあてはめてみよう. ここで $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{11}$ は係数である. データから連立方程式

$$\begin{cases} \beta_1 + \beta_2 x_1 + \beta_3 x_1^2 + \cdots + \beta_{11} x_1^{10} = y_1 \\ \beta_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \cdots + \beta_{11} x_2^{10} = y_2 \\ \vdots \\ \beta_1 + \beta_2 x_{11} + \beta_3 x_{11}^2 + \cdots + \beta_{11} x_{11}^{10} = y_{11} \end{cases}$$

を得る. ここで $d = 2, 3, \dots, 11$ に対して

$$\mathbf{X}_d := \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{d-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{d-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 1 & x_{11} & x_{11}^2 & \cdots & x_{11}^{d-1} \end{pmatrix} \in \text{Mat}(11, d; \mathbb{R}), \quad \mathbf{y} := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{11} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{11},$$

$$\boldsymbol{\beta}_d := \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$$

とおき, $\mathbf{X} := \mathbf{X}_{11}$, $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_{11}$ と書く. このとき

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d} \|\mathbf{X}_d \boldsymbol{\beta}_d - \mathbf{y}\|_{2,n}^2$$

の解を $\hat{\beta}_d^{\text{ls}}$ と書く. と書ける. 行列 $\mathbf{X}$ は Vandermonde 行列と呼ばれるもので

$$\det \mathbf{X} = \prod_{1 \leq i < j \leq 11} (x_i - x_j) \quad (4.2)$$

となることが知られている. よって $x_i \neq x_j (i \neq j)$ のとき $\mathbf{X}_d^\top \mathbf{X}_d$ は正則となるから

$$\hat{\beta}_d^{\text{ls}} = (\mathbf{X}_d^\top \mathbf{X}_d)^{-1} \mathbf{X}_d^\top \mathbf{y} = \mathbf{X}_d^\dagger \mathbf{y}$$

を得る. 特に, $d = 11$ の計算結果は

$$\hat{\beta}_{11}^{\text{ls}} = \begin{pmatrix} -0.0343 \\ 16.2400 \\ -38.0984 \\ 37.8369 \\ -20.2842 \\ 6.5035 \\ -1.3100 \\ 0.1677 \\ -0.0133 \\ 0.0006 \\ -0.0000 \end{pmatrix}$$

となる. 7 次以上の係数は非常に小さくなっている.

$\beta_8 = \beta_9 = \beta_{10} = \beta_{11} = 0$ となるものを考える. すなわち

$$\beta_6 = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_6)^\top \in \mathbb{R}^6$$

である. すると定理 2.1 から

$$\mathbf{y} = \mathbf{X} \beta_6 \iff \begin{cases} \beta_1 + \beta_2 x_1 + \beta_3 x_1^2 + \dots + \beta_7 x_1^6 = y_1 \\ \beta_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2 + \dots + \beta_7 x_2^6 = y_2 \\ \vdots \\ \beta_1 + \beta_2 x_{11} + \beta_3 x_{11}^2 + \dots + \beta_7 x_{11}^6 = y_{11} \end{cases}$$

をみたす β_6 は存在しないので, 解の近似値を最小 2 乗法で求めよう. $x_i \neq x_j (i \neq j)$ のとき, $\mathbf{X}_6$ の列は 1 次独立である. よって, 前節の議論から

$$\hat{\beta}_6^{\text{ls}} = \mathbf{X}_6^\dagger \mathbf{y} \quad \mathbf{X}_6^\dagger = (\mathbf{X}_6^\top \mathbf{X}_6)^{-1} \mathbf{X}_6^\top$$

となる. 計算結果は

$$\hat{\beta}_6^{\text{ls}} = \begin{pmatrix} -0.0260 \\ 1.0636 \\ 0.3067 \\ 0.1426 \\ -0.0146 \end{pmatrix}$$

となる.

注意 4.1. $\hat{\beta}_{11}$ で定まる 10 次の多項式は $\hat{\beta}_6$ で定まるものと比較すると大きく振動していることがわかる. この 10 次の多項式はデータの過学習 (over-fitting) を起こしている. まさに「過ぎたるは猶及ばざるが如し」で中庸が大切ということだ. しかし, データからどの程度で中庸かを判定するのはやさしいことではない. $\square$

R でデータと $\sin$ 曲線と 5 次多項式の図を描いてみる. $d = 11$ のときの図は overflow で作図できなかった.

=====

```
set.seed(125)
x<-0:10
y<-sin(x)+rnomr(11,0,0.2)
plot(x,y,ylim=c(-1.1,1.1))
par(new = TRUE)
curve(sin,0,10,col="red",ylim=c(-1.1,1.1))
x0<-rep(1,10)
xx<-cbind(x0,x,x^2,x^3,x^4,x^5)
h<-t(xx)%*%xx
inv_h<-solve(h)
b<-inv_h%*%t(xx)%*%y
plot(x,y,ylim=c(-1.5,1.5))
par(new = TRUE)
curve(b[1]+b[2]*x+b[3]*x^2+b[4]*x^3+b[5]*x^4+b[6]*x^5,0,10,col="blue",
ylim=c(-1.5,1.5))
par(new=TRUE)
curve(sin,0,10,col="red",ylim=c(-1.5,1.5))
```

=====

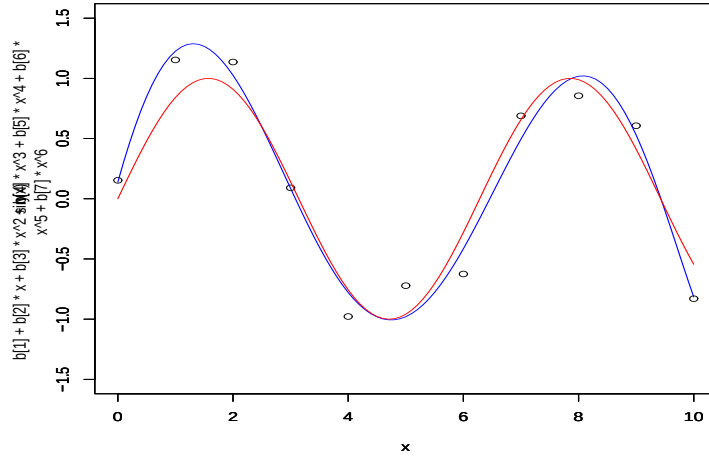


図 2: 赤が $\sin$ で, 青が 5 次多項式

5 ridge 解と lasso ⁴ 解

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} c \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad c \in \mathbb{R}$$

とする. 方程式

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{y} \tag{5.1}$$

を考える. ただし $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2)^\top$ である. 定理 2.1 から $c \neq 1$ のとき解は存在しないことがわかる. $c \neq 1$ のとき, 最小 2 乗解を求める ⁵ と

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.2}$$

となる. さらに $c = 1$ のとき, 最小 2 乗解 $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}}$ は方程式 (5.1) の 1 つの解となっている. $c = 1$ のときの斉次方程式

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \implies \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

の解は

$$\boldsymbol{\beta} = b \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (b \in \mathbb{R})$$

⁴Least absolute shrinkage and selection operator.

⁵ 2×2 の正則行列の逆行列の計算をすることになる.

と表現できる. よって, $c = 1$ のとき, 方程式 (5.1) の解は

$$\beta = \hat{\beta}^{\text{ls}} + b \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} =: \hat{\beta}^{\text{ls}}[b] \quad (b \in \mathbb{R})$$

と表現できる. $c = 1$ のとき, $\hat{\beta}^{\text{ls}}[b]$ は最小 2 乗解となる. 一方, $c \neq 1$ のとき

$$|\hat{\beta}^{\text{ls}}[b] - \hat{\beta}^{\text{ls}}|_{2,2}^2 = \sqrt{2}|b|$$

となる. b は任意だったので, c が 1 に近いときには, データ $\mathbf{y}$ のすこしの変化で最小 2 乗解は大きく変化することを予想される. c が 1 に近いとき, 行列 $\mathbf{X}$ は線型共変性をもつという. このような場合には, 最小 2 乗解は不安定になる. データ $\mathbf{y}$ のすこし変化で最小 2 乗解は大きく変化する.

行列 $\mathbf{X}$ が線型共変性をもつときの不安定性を回避するために, つぎのような最適問題を考える. 固定した $r \in (0, \infty)$ に対して

$$\beta \mapsto |\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta|_{2,11}^2 + r|\beta|_{2,2}^2$$

を β に関して最小化してみよう. 最小値を与える点を **ridge 解**といい, $\hat{\beta}^{\text{ridge}}[r]$ と記すことにする. 上の式の左辺の第一項はデータの当てはまりのよさを測る項で, 第二項は β に長さについての罰則と考えることができる. これは

$$(\beta \text{ のデータへの適合度}) + (\beta \text{ への罰則})$$

と解釈できる.

$\hat{\beta}^{\text{ridge}}[r]$ が ridge 解であるための必要十分条件は

$$(\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + r\mathbf{I}_2) \hat{\beta}^{\text{ridge}}[r] = \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$$

であることがわかる. c の値に関わらず $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + r\mathbf{I}_2$ は正則であるので

$$\begin{aligned} \hat{\beta}^{\text{ridge}}[r] &= (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + r\mathbf{I}_2)^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} \\ &= \frac{1}{4(1-c)^2 + (9+c^2)r + r^2} \begin{pmatrix} 4(1-c)^2 + 5r \\ (4+c)r \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.3)$$

となる. $r > 0$ を固定すると $\hat{\beta}^{\text{ridge}}[r]$ は c に関して連続的に変化することがわかる. さらに

$$\lim_{r \rightarrow 0+} \hat{\beta}^{\text{ridge}}[r] = \begin{cases} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \hat{\beta}^{\text{ls}}[1/2] & (c = 1), \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{\beta}^{\text{ls}}[0] = \hat{\beta}^{\text{ls}} & (c \neq 1) \end{cases}$$

となる. とくに $c = 1$ のとき $\hat{\beta}^{\text{ls}}[1/2]$ は方程式 (5.1) をみたすもののうち, 長さ $|\beta|_2 = \sqrt{(1-b)^2 + b^2}$ を最小にするものになっている.

注意 5.1. $c = 1$ のとき, $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$ は正則でない. 一般化逆行列 $\mathbf{X}^\dagger$ がみたすべき以下の関係式を解く.

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \mathbf{X}\mathbf{X}^\dagger\mathbf{X} &= \mathbf{X}, & \textcircled{2} \mathbf{X}^\dagger\mathbf{X}\mathbf{X}^\dagger &= \mathbf{X}^\dagger, & \textcircled{3} (\mathbf{X}\mathbf{X}^\dagger)^\top &= \mathbf{X}\mathbf{X}^\dagger, \\ \textcircled{4} (\mathbf{X}^\dagger\mathbf{X})^\top &= \mathbf{X}^\dagger\mathbf{X}. \end{aligned}$$

煩わしい計算をすると $\mathbf{X}^\dagger = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ を得る⁶. このことから $c = 1$ のとき

$$\mathbf{X}^\dagger \mathbf{y} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \hat{\beta}^{\text{ls}}[1/2]$$

となっていることがわかる. 一方 $c \neq 1$ のとき $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & c \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$ は正則で,

$$\mathbf{X}^\dagger = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top = \frac{1}{4 - 8c - 4c^2} \begin{pmatrix} 4 - 4c & -2c + 2c^2 \\ -4 + 4c & 2 - 2c \end{pmatrix}$$

となるので

$$\mathbf{X}^\dagger \mathbf{y} = \frac{1}{4 - 8c - 4c^2} \begin{pmatrix} 4 - 4c & -2c + 2c^2 \\ -4 + 4c & 2 - 2c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{\beta}^{\text{ls}}[0]$$

となる. 以上から c の値に関わらず

$$\lim_{r \rightarrow 0+} \hat{\beta}^{\text{ridge}}[r] = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y}$$

と書けることがわかる. □

多項式回帰の場合のように β の成分の多くが 0 であるような「疎らな」 β に対しては固定した $r \in (0, \infty)$ に対して

$$\beta \mapsto |\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta|_{2,11}^2 + 2r|\beta|_{1,2} \quad (5.4)$$

⁶① ~ ④ の関係式から $\mathbf{X}^\dagger$ をみつけるのは大変である. しかし, $\mathbf{X}$ と $\mathbf{X}^\dagger$ は① ~ ④ の関係式をみたしていることは比較的簡単に確認できる. 一般論から① ~ ④ の関係式をみたすものが唯一存在することが知られているので, $\mathbf{X}^\dagger = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ となることがわかる.

を β に関して最小化をするものを用いるとよいことが知られている。すなわち、罰則項を成分の絶対値の和とする。これを **lasso 解**といい、 $\hat{\beta}^{\text{lasso}}[r]$ と記すことにする。第 4 節の多項式回帰の問題の $r = 1$ のときの lasso 解は

$$\hat{\beta}^{\text{lasso}}[1] = \begin{pmatrix} 0.1448 \\ 0.2691 \\ 0.0674 \\ 0.0769 \\ -0.0334 \\ -0.0674 \\ 0.0386 \\ -0.0085 \\ 0.0001 \\ 0.0000 \end{pmatrix}$$

となる。

注意 5.2. ridge 解と lasso 解はともに新たな母数 r の選択が必要となる。「よい」 r の選択を交差検証法などのデータの情報にのみですることができる。

注意 5.3. 凸関数の性質から最適問題 (4.2) の解は一意に存在することがわかる。しかし、最適問題 (4.2) を陽に解くことはできない。この問題を繰り返し計算で解くためのアルゴリズムは統計解析環境 R⁷ には実装されている。

注意 5.4. β の次元が大きいモデルを高次元統計的回帰モデルという。次元の高い回帰ベクトルの場合、 β が疎らな構造をもつことがよくある。このような状況では、lasso はよい「精度」をもつことが理論的にも調べられている。この点については次の節で簡単に説明する。

6 統計的回帰モデルと最小 2 乗法

$(\Omega, \mathcal{A}, \text{Pr})$ を確率空間 (underlying probability space) とする。統計的回帰モデルを導入する。

$$\tilde{y}_i = \beta_1^* + \beta_2^* x_{i1} + \cdots + \beta_d^* x_{i,d-1} + \tilde{\epsilon}_i \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (6.1)$$

⁷オープンソース・フリーソフトウェアの統計解析向けのプログラミング言語及びその開発実行環境のこと。詳しくは RjpWiki<http://www.okadajp.org/RWiki/> を参照せよ。

ここで $\beta_i^* \in \mathbb{R}$ は未知で, $\tilde{\epsilon}_1, \tilde{\epsilon}_2, \dots, \tilde{\epsilon}_n$ は観測誤差 (確率空間 $(\Omega, \mathcal{A}, \Pr)$ 上で定義された確率変数列) で, 独立同一に正規分布 $N(0, \sigma^2)$ (平均が 0 で分散が σ^2 の正規分布を表す) に従うとする. また $\sigma > 0$ は既知とする.

観測データは確率変数 $\tilde{y}_i$ の実現値と $(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{id})$ の組が n 個である. このモデルをベクトルと行列を用いて表現する.

$$\tilde{\mathbf{y}} := \begin{pmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \\ \vdots \\ \tilde{y}_n \end{pmatrix}, \quad \underbrace{\mathbf{X}}_{n \text{ 行 } d \text{ 列}} := \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1,d-1} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2,d-1} \\ \vdots & & & & \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{n,d-1} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\beta}^* := \begin{pmatrix} \beta_1^* \\ \beta_2^* \\ \vdots \\ \beta_d^* \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} := \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_1 \\ \tilde{\epsilon}_2 \\ \vdots \\ \tilde{\epsilon}_n \end{pmatrix}$$

とくと

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

と書ける. 議論を簡単にするために

$$\text{rank} \mathbf{X} = \min(d, n)$$

を仮定する. ただし $\min(d, n)$ は d と n の大きい方を表す.

$r > 0$ とし, 最小 2 乗推定量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}}$ と lasso $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{lasso}}[r]$ は

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} = \mathbf{X}^\dagger \tilde{\mathbf{y}}, \quad (6.2)$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{lasso}}[r] \in \arg \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d} \left\{ \|\tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|_{2,n}^2 + 2r \|\boldsymbol{\beta}\|_{1,d} \right\} \quad (6.3)$$

で定義できる. ただし

$$\|\mathbf{x}\|_{2,n} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}, \quad \|\mathbf{x}\|_{1,n} = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad (\forall \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n)$$

である. $f(x)$ を関数としたとき, $\arg \min_x f(x)$ の意味は関数

$$x \mapsto f(x)$$

を最小にする点すべてのなす集合である. たとえば

$$\arg \min_{0 \leq x \leq 4\pi} \sin x = \left\{ \frac{3}{2}\pi, \frac{7}{2}\pi \right\}$$

となる.

注意 6.1. 前節までの $\tilde{\mathbf{y}}$ と $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}}$ はデータの値から計算されたものである。したがって、ランダムではない。しかし、この節では、ランダムベクトル $\tilde{\mathbf{y}}$ で表現される $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}}$ と $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{lasso}}[r]$ はランダムベクトルであることに注意せよ。さらに、(6.3) は確率ベクトル $\tilde{\mathbf{y}}$ で表現されるので、ランダムな量である。したがって、 $\omega \in \Omega$ ごとに定まる $\tilde{\mathbf{y}}$ によって与えられる関数の最小化問題を解いたものが $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{lasso}}[r]$ であり、 $\omega \in \Omega$ ごとに定まるランダムな量である。(6.2) の $\left\| \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^* \right\|_{2,n}^2$ はランダムな量となるので、評価するために確率を計算したり、期待値を計算することが必要となる。□

統計的回帰モデル (6.1) のもとで以下が成立する。 $\forall a > 0$ に対して

$$\Pr\left(\frac{1}{n}\left\|\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{ls}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*\right\|_{2,n}^2 \leq C_1\sigma^2\frac{d}{n}\right) \geq 1 - a \quad (6.4)$$

となる。ただし $\Pr(\cdot)$ は確率で、 $C_1 > 0$ は $d, n, \sigma, \boldsymbol{\beta}^*, a$ に依存しない定数である。

$k \in \mathbb{N}$ は $k < \min(n, d)$ とする。以下の仮定をおく。

- $|\boldsymbol{\beta}^*|_0 \leq k$ とする。ただし $|\boldsymbol{\beta}^*|_0$ はベクトル $\boldsymbol{\beta}^*$ の零でない成分の個数を表す。

•

$$\|\mathbf{X}^\top \mathbf{X} - \mathbf{I}_d\| \leq \frac{1}{32k} \quad (6.5)$$

とする。ただし、正方行列 $\mathbf{A}$ に対して、 $\|\mathbf{A}\|$ は $\mathbf{A}$ の固有値の絶対値の最大のもをを表す。

注意 6.2. 上の最初の仮定は回帰ベクトル $\boldsymbol{\beta}$ が疎であることを仮定している。高次元の設定では、疎な回帰ベクトルが自然に表れることが知られている。2 番目の仮定は技術的な仮定である。 $\mathbf{X}$ がよく計画された行列になっていることを意味する。しかし、通常、 k は観測者には未知であるので、(6.5) は観測者には確認できない条件である。□

このとき、 $\forall a > 0$ に対して

$$r = \sigma\sqrt{\frac{2\log(2d)}{n}} + \sigma\sqrt{\frac{2\log(1/a)}{n}}$$

とおくと

$$\Pr\left(\frac{1}{n}\left\|\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}^{\text{lasso}}[r] - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^*\right\|_{2,n}^2 \leq C_2k\sigma^2\frac{\log(2d/a)}{n}\right) \geq 1 - a$$

となる. ただし $C_2 > 0$ は $d, n, k, \sigma, \beta^*, a$ に依存しない定数である.

(6.4) と (6.3) と比較すると β^* が疎で d が大きいときに, $\hat{\beta}^{\text{lasso}}[r]$ の精度は $\hat{\beta}^{\text{ls}}$ のものよりよいことがみてとれる.

注意 6.3. この手の問題は逆問題 (無限次元でもよい) とみなすことができる. 逆問題の有力な解法として, ridge 回帰に対応する正則化法はよく研究されている. [15, 6 章] を参照のこと.

7 文献についての注意

節 1 は [8], [18] を参考にした. 節 2 は [14] からの借用である. 節 C.3 は [3] を参考にした. 節 4 は [16] からの借用である. 節 5 は [7] からの借用である. 節 6 は [9] を参考にした. 補遺 A は [1] から, 補遺 B は [11] からの借用である. また, [17] も参考にした. 補遺 C は [2, 12, 13, 19] からの借用である.

参考文献

- [1] BISGARD, J. (2021). Analysis and Linear algebra: The Singular Value Decomposition and Applications. *Student Mathematical Library* **94**. American Mathematical Society.
- [2] BORWEIN, J.M., LEWIS, A.S. (2006). Convex Analysis and Nonlinear Optimization Theory and Examples, 2nd. edition. Spriner.
- [3] BOYD, S., VANDENBERGHE, L. (2018). Introduction to Applied Linear algebra. Cambridge University Press.
- [4] EVANS, L.C., GARIEPY, R.F. (2025). Measure Theory and Fine Properties of Functions. CRC Press.
- [5] GALLIER, J. (2001). Geometrical Methods and Applications. *Texts in Applied Mathematics* **38**. Springer.
- [6] KAIPIO, J., SOMERSLO, E. (2005). Statistical and Computational Inverse Problems. *Applied Mathematical Sciences* **60**. Springer.
- [7] LEDERER, J. (2022). Fundamentals of High-Dimensional Statistics with Exercies and R Labs. *Springer Text in Statistics*. Springer.
- [8] NYBLOM, J. (2023+). Note on Legendre's Method of Least Squares. To appear in *Stattistical Science*.

- [9] RIGOLLET, P., HÜTTER, J.-C. (2017). High Dimensional Statistics. Available at <https://math.mit.edu/~rigollet/PDFs/RigNotes17.pdf>(2023/05/17 accessed).
- [10] STIEGLER, S. M. (1981). Gauss and the invention of least squares. *Annals of Statistics* **9** 465-474.
- [11] 新井仁之 (2006). 線形代数 基礎と応用 (第 1 刷). 日本評論社.
- [12] 風巻紀彦 (2005). 凸関数論 (初版). 横浜図書.
- [13] 北廣男 (2009). オーリッツ空間とその応用 (第 1 刷). 岩波書店
- [14] 高橋礼二 (2019). 線型代数講義 (第 1 版第 2 刷). 日本評論社.
- [15] 堤正義 (2018). 逆問題 (第 2 刷り). 朝倉書店.
- [16] 永原正章 (2020). スパースモデリング (第 1 版第 4 刷). コロナ社.
- [17] . 中神祥臣, 柳井晴夫 (2012). 矩形行列の行列式 (初版). 丸善書店.
- [18] 森棟公夫 (2010). 地球の大きさと最小 2 乗法. 社会とマネジメント **8** 111-130.
- [19] 柳田英二 (2022). 解析入門 (第 1 版第 1 刷). 裳華房.

注意 .1. 補遺では、「 $\sim$ 」は確率変数を示す記号としては用いない。

A 補遺: 特異値分解の補足説明

定義 A.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.
 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p \in V$ とする.

(1) $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p$ はベクトル空間 V の基底であるとは, 任意の $\mathbf{v} \in V$ に対して, 唯一の $a_1, a_2, \dots, a_p \in \mathbb{R}$ があって

$$\mathbf{v} = a_1 \mathbf{v}_1 + a_2 \mathbf{v}_2 + \dots + a_p \mathbf{v}_p$$

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) $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p$ は線型独立 (1 次独立) であるとは

$$a_1 \mathbf{v}_1 + a_2 \mathbf{v}_2 + \dots + a_p \mathbf{v}_p = \mathbf{0}_n \ (a_1, a_2, \dots, a_p \in \mathbb{R}) \implies a_1 = a_2 = \dots = a_p = 0$$

が成り立つときをいう. ただし, $\mathbf{0}_n = \underbrace{(0, 0, \dots, 0)^\top}_{n \text{ 個}} \in \mathbb{R}^n$ である.

定義 A.2. (1) $n, p \in \mathbb{N}, n \geq p$ とする. ベクトル $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p \in \mathbb{R}^n$ で張られた $\mathbb{R}^n$ の部分空間 $\text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p\}$ を

$$\text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p\} = \{a_1 \mathbf{x}_1 + a_2 \mathbf{x}_2 + \dots + a_p \mathbf{x}_p; a_1, a_2, \dots, a_p \in \mathbb{R}\}$$

と定義する.

(2) $m, n \in \mathbb{N}$ とし, $\mathbf{A} \in \text{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ とする. $\mathbf{A}$ と $\mathbf{A}^\top$ の像と核をそれぞれ

$$\begin{aligned} \text{range}(\mathbf{A}) &= \{\mathbf{Ax}; \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m, \\ \ker(\mathbf{A}) &= \{\mathbf{x}; \mathbf{Ax} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^m\} \subset \mathbb{R}^n, \\ \text{range}(\mathbf{A}^\top) &= \{\mathbf{A}^\top \mathbf{y}; \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m\} \subset \mathbb{R}^n, \\ \ker(\mathbf{A}^\top) &= \{\mathbf{y}; \mathbf{A}^\top \mathbf{y} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

で定める.

定義 A.3. $n \in \mathbb{N}$ とする. 行列式は関数 $\det : \text{Mat}(n; \mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}$ で以下のように定義する.

(1) 1×1 の行列 (a) の行列式を

$$\det(a) = a.$$

(2) $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$ とき, 行列

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$$

の行列式を以下のように定める. $i, j = 1, 2, \dots, n$ 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

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{k=1}^n (-1)^{k+1} a_{1k} \det(\mathbf{A}_{1k})$$

で定める.

命題 A.4. $n \times n$ の行列 $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n) \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対して, 行列式は以下の性質をみたす.

(1) $k = 1, 2, \dots, n$ と $d \in \mathbb{R}$ に対し,

$$\det(\mathbf{a}_1, \dots, \lambda \mathbf{a}_k, \dots, \mathbf{a}_n) = \lambda \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k, \dots, \mathbf{a}_n).$$

(2) $j \neq k$ に対し,

$$\det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k + \lambda \mathbf{a}_j, \dots, \mathbf{a}_n) = \lambda \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k, \dots, \mathbf{a}_n).$$

(3) $\det(\mathbf{I}_n) = 1$.

(4) $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対し

$$\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B}).$$

定義 A.5. $\mathbf{A} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対し, ある $\mathbf{B} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ が存在し

$$\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}_n$$

が成り立つとき, $\mathbf{A}$ は可逆であるという. さらに, $\mathbf{B}$ を $\mathbf{A}$ の逆行列といい, これを $\mathbf{A}^{-1}$ と記す.

命題 A.6. $\mathbf{A} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ とする. このとき

$$\mathbf{A} \text{ は可逆} \iff \det(\mathbf{A}) \neq 0$$

である.

定理 A.7. (特異値分解) $m, n \in \mathbb{N}$ とする. 任意の $\mathbf{A} \in \text{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ は

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^\top$$

と分解できる. ただし $\mathbf{U} \in \text{Mat}(m; \mathbb{R})$, $\mathbf{V} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ は直交行列で, $\mathbf{D} \in \text{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ 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. $d_j (j = 1, 2, \dots, \min(m, n))$ を行列 $\mathbf{A}$ の特異値といい, $\{(d_j, \mathbf{u}_j, \mathbf{v}_j); j = 1, 2, \dots, \min(m, n)\}$ を特異値系⁸という.

注意 A.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 A.7 の証明 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ に対し

$$|\mathbf{y}|_{2, n} = \sqrt{\mathbf{y}^\top \mathbf{y}}$$

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

$$\|\mathbf{A}\| := \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{|\mathbf{A}\mathbf{x}|_{2, n}}{|\mathbf{x}|_{2, n}}$$

で定義すると

$$d_1 := \|\mathbf{A}\| := \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, |\mathbf{x}|_2=1} |\mathbf{A}\mathbf{x}|_{2, n}$$

⁸ $j = 1, 2, \dots, \min(m, n)$ に対して

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_j = d_j \mathbf{u}_j$$

となっている.

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 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ($|\mathbf{x}|_{2,n} = 1$) が存在して

$$|\mathbf{Ax}|_{2,n} = d_1$$

をみたすとする.

$$\mathbf{y} = \frac{1}{d_1} \mathbf{Ax} \in \mathbb{R}^m$$

とおけば

$$|\mathbf{y}|_{2,n}^2 = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} = \frac{1}{d_1^2} \mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{Ax} = \frac{|\mathbf{Ax}|_{2,n}^2}{d_1^2} = 1$$

より $|\mathbf{y}|_2 = 1$ となる. $\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_n \in \mathbb{R}^n$ と $\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_m \in \mathbb{R}^m$ をうまく選んで, $\{\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ と $\{\mathbf{y}, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m\}$ 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.

$$\mathbf{U}_1 = (\mathbf{y}, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m) \in \text{Mat}(m; \mathbb{R}), \quad \mathbf{V}_1 = (\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n) \in \text{Mat}(n; \mathbb{R}),$$

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{U}_1^\top \mathbf{AV}_1$$

とおけば

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 = \mathbf{U}_1^\top \mathbf{AV}_1 &= \begin{bmatrix} \mathbf{y}^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_m^\top \end{bmatrix} \mathbf{A}[\mathbf{x}, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n] = \begin{bmatrix} \mathbf{y}^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_m^\top \end{bmatrix} [\mathbf{Ax}, \mathbf{Av}_2, \dots, \mathbf{Av}_n] \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{y}^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_m^\top \end{bmatrix} [d_1 \mathbf{y}, \mathbf{Av}_2, \dots, \mathbf{Av}_n] = \begin{bmatrix} d_1 \mathbf{y}^\top \mathbf{y} & \mathbf{y}^\top \mathbf{Av}_2 & \dots & \mathbf{y}^\top \mathbf{Av}_n \\ 0 & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{Av}_2 & \dots & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{Av}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{Av}_2 & \dots & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{Av}_n \end{bmatrix} \\ &=: \begin{bmatrix} d_1 & \mathbf{w}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と書き直せる. ただし

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}^\top \mathbf{Av}_2 \\ \mathbf{y}^\top \mathbf{Av}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{y}^\top \mathbf{Av}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n-1},$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_2^\top \mathbf{Av}_2 & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{Av}_3 & \dots & \mathbf{u}_2^\top \mathbf{Av}_n \\ \mathbf{u}_3^\top \mathbf{Av}_2 & \mathbf{u}_3^\top \mathbf{Av}_3 & \dots & \mathbf{u}_3^\top \mathbf{Av}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{u}_m^\top \mathbf{Av}_2 & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{Av}_3 & \dots & \mathbf{u}_m^\top \mathbf{Av}_n \end{bmatrix} \in \text{Mat}(m-1, n-1; \mathbb{R})$$

である．上記の形に注意して計算すると

$$\mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 & \mathbf{w}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1^2 + \mathbf{w}^\top \mathbf{w} \\ \mathbf{B}\mathbf{w} \end{bmatrix}$$

となる．したがって

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|_{2,n}^2 &= \left\| \begin{bmatrix} d_1^2 + \mathbf{w}^\top \mathbf{w} \\ \mathbf{B}\mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|_{2,n}^2 \\ &= \{d_1^2 + \mathbf{w}^\top \mathbf{w}\}^2 + \mathbf{w}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B} \mathbf{w} \\ &\geq \{d_1^2 + |\mathbf{w}|_{2,n-1}^2\}^2 \end{aligned}$$

から

$$\left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|_{2,n} \geq d_1^2 + |\mathbf{w}|_{2,n-1}^2, \quad \left\| \frac{1}{\sqrt{d_1^2 + |\mathbf{w}|_{2,n-1}^2}} \begin{bmatrix} d_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|_{2,n} = 1$$

がわかる．よって

$$\|\mathbf{A}_1\| = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, |\mathbf{x}|_{2,n}=1} |\mathbf{A}_1 \mathbf{x}|_{2,n} \quad (\text{A.1})$$

$$\geq \frac{1}{\sqrt{d_1^2 + |\mathbf{w}|_{2,n-1}^2}} \left\| \mathbf{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} \right\|_{2,n} \quad (\text{A.2})$$

$$\geq \sqrt{d_1^2 + |\mathbf{w}|_{2,n-1}^2}. \quad (\text{A.3})$$

を得る．直交変換に関して $\|\cdot\|$ は不変⁹なので，

$$d_1 = \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_1\|$$

である．これと (A.3) と合わせると

$$d_1 = \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_1\| \geq \sqrt{d_1^2 + |\mathbf{w}|_{2,n-1}^2} \geq d_1$$

となるので

$$|\mathbf{w}|_{2,n-1} = 0 \iff \mathbf{w} = \mathbf{0}_{n-1}$$

⁹ $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ($|\mathbf{x}|_{2,n} = 1$) に対して $|\mathbf{V}_1 \mathbf{x}|_{2,n} = 1$ に注意すれば，

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\| &= \|\mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{V}_1\| = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x}|_{2,n}=1} |\mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{V}_1 \mathbf{x}|_{2,n} = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x}|_{2,n}=1} |\mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{x}|_{2,n} \\ &= \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x}|_{2,n}=1} \sqrt{\mathbf{x}^\top \mathbf{A}_1^\top \mathbf{U}_1^\top \mathbf{U}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{x}} = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x}|_{2,n}=1} \sqrt{\mathbf{x}^\top \mathbf{A}_1^\top \mathbf{A}_1 \mathbf{x}} \\ &= \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x}|_{2,n}=1} |\mathbf{A}_1 \mathbf{x}|_{2,n} = \|\mathbf{A}_1\| \end{aligned}$$

からわかる．

がわかる．よって

$$\mathbf{U}_1^\top \mathbf{A} \mathbf{V}_1 = \mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} d_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^\top & \mathbf{B} \end{bmatrix}$$

と書けることがわかった．

次に, $d_2 = \|\mathbf{B}\|$ とおけば

$$\begin{aligned} d_2 &= \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n-1}; |\mathbf{x}|_{2,n-1}=1} |\mathbf{B}\mathbf{x}|_{2,n-1} = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n-1}; |\mathbf{x}|_{2,n-1}=1} \left\| \begin{bmatrix} d_1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} \right\|_{2,n} \\ &\leq \sup_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{z}|_{2,n}=1} |\mathbf{A}_1 \mathbf{z}|_{2,n} = \|\mathbf{A}_1\| = \|\mathbf{A}\| = d_1 \end{aligned}$$

である． $d_2 = 0$ 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

$$|\mathbf{B}\mathbf{x}|_{2,n-1} = 1, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n-1} \text{ s.t. } |\mathbf{x}|_2 = 1, \mathbf{y} = \frac{1}{d_2} \mathbf{B}\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m-1}$$

と取る．さきほどの議論を繰り返すと $\tilde{\mathbf{U}}_2 \in \text{Mat}(m-1; \mathbb{R})$, $\tilde{\mathbf{V}}_2 \in \text{Mat}(n-1; \mathbb{R})$ で

$$\tilde{\mathbf{U}}_2^\top \mathbf{B} \tilde{\mathbf{V}}_2 = \begin{bmatrix} d_2 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{bmatrix}, \mathbf{C} \in \text{Mat}(m-2, n-2; \mathbb{R})$$

となるので

$$\mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{U}}_2 \end{bmatrix}, \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{V}}_2 \end{bmatrix}$$

とおく．すると $\mathbf{U}_2, \mathbf{V}_2$ は直交行列で

$$\mathbf{U}_2^\top \mathbf{U}_1^\top \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{C} \end{bmatrix}$$

となる．さらに $\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2 \in \text{Mat}(m; \mathbb{R})$ と $\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ 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． $\square$

定理 A.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, $p \leq \min(m, n)$ に対し

$$d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_p > d_{p+1} = d_{p+2} = \cdots = d_{\min(m,n)} = 0$$

とする.

$$\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m), \mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n)$$

としたとき

$$\begin{aligned} \ker(\mathbf{A}) &= \text{span}\{\mathbf{v}_{p+1}, \mathbf{v}_{p+2}, \dots, \mathbf{v}_n\} = \text{range}(\mathbf{A})^\perp, \\ \ker(\mathbf{A}^\top) &= \text{span}\{\mathbf{u}_{p+1}, \mathbf{u}_{p+2}, \dots, \mathbf{u}_m\} = \text{range}(\mathbf{A}^\top)^\perp \end{aligned}$$

となる. 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

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0} \ (x \in \mathbb{R}^n) \iff \mathbf{D}\mathbf{V}^\top \mathbf{x} = \begin{bmatrix} d_1 \mathbf{v}_1^\top \mathbf{x} \\ d_2 \mathbf{v}_2^\top \mathbf{x} \\ \vdots \\ d_p \mathbf{v}_p^\top \mathbf{x} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}_m$$

である. よって $\ker(\mathbf{A})$ の任意の元 $\mathbf{x}$ は $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p$ と直交するので

$$\ker(\mathbf{A}) = \text{span}\{\mathbf{v}_{p+1}, \mathbf{v}_{p+2}, \dots, \mathbf{v}_n\}$$

となる. さらに $\mathbf{A}^\top = \mathbf{V}\mathbf{D}^\top\mathbf{U}^\top$ より

$$\ker(\mathbf{A}^\top) = \text{span}\{\mathbf{u}_{p+1}, \mathbf{u}_{p+2}, \dots, \mathbf{u}_m\} = \text{range}(\mathbf{A})^\perp$$

である. 一方, $\forall \tilde{\mathbf{x}} \in \text{range}(\mathbf{A}^\top)$ とすれば, ある $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ があって, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \mathbf{y}$ とかける. このことより

$$\mathbf{x} \in \ker(\mathbf{A}) \iff \mathbf{x}^\top \tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}\mathbf{x})^\top \mathbf{y} = 0$$

となるので, $\mathbf{x}$ は $\text{range}(\mathbf{A}^\top)$ と直交する. 同様に, $\forall \tilde{\mathbf{y}} \in \text{range}(\mathbf{A})$ をとる. ある $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ があって, $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ とかける. このことより

$$\mathbf{y} \in \ker(\mathbf{A}^\top) \iff \mathbf{y}^\top \tilde{\mathbf{y}} = (\mathbf{A}^\top \mathbf{y})^\top \mathbf{x} = 0$$

となる. よって, $\mathbf{y}$ は $\text{range}(\mathbf{A})$ と直交することもわかる. □

注意 A.10.

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_1 &= [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_p], \mathbf{U}_2 = [\mathbf{u}_{p+1}, \mathbf{u}_{p+2}, \dots, \mathbf{u}_m], \\ \mathbf{V}_1 &= [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_p], \mathbf{V}_2 = [\mathbf{v}_{p+1}, \mathbf{v}_{p+2}, \dots, \mathbf{v}_n] \end{aligned}$$

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 補遺: Moore-Penrose の一般化逆行列

$\mathbf{A} \in \text{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ で $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ とする. 定理 A.7 から $1 \leq p \leq \min(m, n)$ があって

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{V}}^\top,$$

$\tilde{\mathbf{U}} \in \text{Mat}(m; \mathbb{R})$, $\tilde{\mathbf{V}} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$ は直交行列,

$\tilde{\mathbf{D}} \in \text{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ は対角行列 (非対角成分は 0) で

その正の対角成分は $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_p > 0$

と書ける. ここで $\tilde{\mathbf{U}}$, $\tilde{\mathbf{D}}$, $\tilde{\mathbf{V}}$ を分解し

$$\tilde{\mathbf{U}} = [\mathbf{U}, \mathbf{U}^\perp], \quad \mathbf{U} \in \text{Mat}(m, p; \mathbb{R}),$$

$$\tilde{\mathbf{V}} = [\mathbf{V}, \mathbf{V}^\perp], \quad \mathbf{V} \in \text{Mat}(n, p; \mathbb{R}),$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p \end{bmatrix} \in \text{Mat}(p; \mathbb{R})$$

とする. すると

$$\tilde{\mathbf{U}}^\top \tilde{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}^\top \mathbf{U} & \mathbf{U}^\top \mathbf{U}^\perp \\ (\mathbf{U}^\perp)^\top \mathbf{U} & (\mathbf{U}^\perp)^\top \mathbf{U}^\perp \end{bmatrix} = \mathbf{I}_m,$$

$$\tilde{\mathbf{V}}^\top \tilde{\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}^\top \mathbf{V} & \mathbf{V}^\top \mathbf{V}^\perp \\ (\mathbf{V}^\perp)^\top \mathbf{V} & (\mathbf{V}^\perp)^\top \mathbf{V}^\perp \end{bmatrix} = \mathbf{I}_n$$

から

$$\mathbf{U}^\top \mathbf{U} = \mathbf{I}_p, \quad \mathbf{U}^\top \mathbf{U}^\perp = \mathbf{0}, \quad \mathbf{V}^\top \mathbf{V} = \mathbf{I}_p, \quad \mathbf{V}^\top \mathbf{V}^\perp = \mathbf{0}$$

となる. よって

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{U}}\tilde{\mathbf{D}}\tilde{\mathbf{V}}^\top = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top \quad (\text{B.1})$$

となる. ただし

$$\mathbf{U}^\top \mathbf{U} = \mathbf{V}^\top \mathbf{V} = \mathbf{I}_p, \mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p \end{bmatrix}$$

となる.

(B.1) を踏まえて, $\mathbf{A}^\dagger \in \text{Mat}(n, m; \mathbb{R})$ を

$$\mathbf{A}^\dagger := \mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top, \mathbf{D}^{-1} = \begin{bmatrix} d_1^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p^{-1} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

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.

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} = \mathbf{A}, \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger, \quad (\text{B.4})$$

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)^\top, \quad (\text{B.5})$$

$$\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} = (\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A})^\top \quad (\text{B.6})$$

が成立する. 上記 (B.3) – (B.6) は (B.1) と (B.2) よりわかる. 実際

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} &= \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top\mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top = \mathbf{A}, \\ \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger &= \mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top\mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top = \mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top = \mathbf{A}^\dagger, \\ \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger &= \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top\mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top = \mathbf{U}\mathbf{U}^\top = (\mathbf{U}\mathbf{U}^\top)^\top = (\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)^\top, \\ \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} &= \mathbf{V}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^\top\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top = \mathbf{V}\mathbf{V}^\top = (\mathbf{V}\mathbf{V}^\top)^\top = (\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A})^\top \end{aligned}$$

からわかる. さらに

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger : \mathbb{R}^m \longrightarrow \text{range}(\mathbf{A}) \subset \mathbb{R}^m, \\ \mathbf{Q} &= \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \text{range}(\mathbf{A}^\top) \subset \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

は射影行列になっている. すなわち $\mathbf{P} \in \text{Mat}(m; \mathbb{R})$ と $\mathbf{Q} \in \text{Mat}(n; \mathbb{R})$

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}, \mathbf{P}^\top = \mathbf{P}, \mathbf{Q}^2 = \mathbf{Q}, \mathbf{Q}^\top = \mathbf{Q}$$

をみたしている.

最後に $A^\dagger$ の一意性を示す. $B^\dagger$ も A の Moore-Penrose の一般逆行列とする. すると $A^\dagger$ を B と替えた

$$ABA = A, \quad (\text{B.7})$$

$$BAB = B, \quad (\text{B.8})$$

$$AB = (AB)^\top, \quad (\text{B.9})$$

$$BA = (BA)^\top \quad (\text{B.10})$$

も成立する. すると

$$\begin{aligned} A^\dagger &= A^\dagger AA^\dagger \quad (\because (\text{B.3})) \\ &= A^\dagger (ABA) A^\dagger \quad (\because (\text{B.7})) \\ &= A^\dagger (AB)^\top (AA^\dagger)^\top \quad (\because (\text{B.5}) \text{ と } (\text{B.9})) \\ &= A^\dagger B^\top (AA^\dagger A)^\top \\ &= A^\dagger B^\top A^\top \quad (\because (\text{B.3})) \\ &= A^\dagger (AB)^\top \\ &= A^\dagger AB \quad (\because (\text{B.9})) \\ &= A^\dagger ABAB \quad (\because (\text{B.7})) \\ &= (A^\dagger A)^\top (BA)^\top B \quad (\because (\text{B.6}) \text{ と } (\text{B.10})) \\ &= (AA^\dagger A)^\top B^\top B \\ &= A^\top B^\top B \quad (\because (\text{B.3})) \\ &= (BA)^\top B \\ &= BAB \quad (\because (\text{B.10})) \\ &= B \quad (\because (\text{B.7})) \end{aligned}$$

からわかる. よって一意性を証明できた.

注意 B.1. (1) 多くの本では, $A \in \text{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ に対して (B.3) – (B.6) をみたす $n \times m$ の行列 $A^\dagger$ を A の Moore-Penrose の一般逆行列と定義している.

(2) Moore-Penrose 型以外にも以下のような一般化逆行列を考えることができる.

- (B.3) と (B.4) をみたすものを A の反射型一般化逆行列という.
- (B.3) と (B.5) をみたすものを A の最小 2 乗型一般化逆行列という.

- (B.3) と (B.6) をみたすものを $\mathbf{A}$ のノルム最小型一般化逆行列という.

Moore-Penrose の一般化逆行列は反射型, 最小 2 乗型, かつノルム最小型であって, 常に一意的存在することが証明できる. 詳しくは, [11, 15 章] と [17, 3.5 節] を参照のこと. $\square$

注意 B.2.

C 補遺: 凸関数

この節では, 凸関数と集合の定義と基本的な性質の説明をする. 証明は C.5 にまとめて与えることにする.

C.1 凸関数の性質

この節では, 凸関数の定義をまず述べる. 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のは容易である. 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¹⁰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, 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, 凸関数の必要十分条件を 2 つ述べる. ひとつは, ① 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, ② 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.

定義 C.1. $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$ とする. 関数 $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ が $x, y \in [a, b]$, $0 \leq c \leq 1$ に対して

$$f(cx + (1 - c)y) \leq cf(x) + (1 - c)f(y)$$

をみたすとき, f は凸関数 (convex function) であるという. とくに $x \neq y$, $0 < c < 1$ のとき

$$f(cx + (1 - c)y) < cf(x) + (1 - c)f(y)$$

が成立する場合は, f は狭義凸関数 (strictly convex function) であるという.

注意 C.2. $-f$ が凸関数 (狭義凸関数) のとき, 関数 f は concave 関数 (狭義 concave 関数) であるという. $\square$

¹⁰たとえば, この定義の直接的な利用では Jensen の不等式の証明はむずかしい.

定理 C.3. 区間 $[a, b]$ 上の凸関数は开区間 (a, b) 上の各点で連続である.

定理 C.4. 関数 $\varphi: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ が単調増加ならば

$$f(x) := C + \int_a^x \varphi(t) dt \quad (a \leq x \leq b)$$

は凸関数である. ただし C は定数である.

定理 C.5. 関数 f が区間 $[a, b]$ 上の凸のとき, 开区間 (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

$$\dot{f}_-: (a, b) \ni x \mapsto \dot{f}_-(x) \in \mathbb{R}$$

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.

定理 C.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

$$f(x) = f(c) + \int_c^x g(t) dt \quad (a < x < b)$$

と表せる.

定理 C.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

$$(a, b) \setminus \{x_0\} \ni x \mapsto \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \in \mathbb{R} \quad (\text{C.1})$$

が単調増加となることである.

定義 C.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

$$S(x) := m(x - x_0) + f(x_0) \leq f(x) \quad (\text{C.2})$$

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.

定理 C.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.

C.2 凸集合とその性質

定義 C.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

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in C \text{ と } 0 \leq c \leq 1 \Rightarrow c\mathbf{x} + (1-c)\mathbf{y} \in C$$

をみたすときをいう.

定義 C.11. $p \in \mathbb{N}$ とし, $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とする.

(1) $c_k \geq 0$ ($k = 1, 2, \dots, p$) かつ $\sum_{k=1}^p c_k = 1$ のとき

$$\sum_{k=1}^p c_k \mathbf{a}_k$$

を $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p$ の凸結合という.

(2) $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p$ によって生成された凸多面体を

$$\langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p \rangle = \left\{ \sum_{k=1}^p c_k \mathbf{a}_k; c_k \geq 0, \sum_{k=1}^p c_k = 1 \right\} \subset \mathbb{R}^n$$

で定義する.

定理 C.12. (Carathéodory の定理) $p \in \mathbb{N}$ とし, $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とする. $\mathbf{y} \in \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p \rangle$ は以下のように表せる.

$$\mathbf{y} = \sum_{k=1}^{n+1} c_k \mathbf{a}_{j_k},$$

$$1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_{n+1} \leq p, \quad c_k \geq 0, \quad \sum_{k=1}^{n+1} c_k = 1.$$

補題 C.13. C を空でない $\mathbb{R}^n$ 凸閉部分集合とし, $\mathbf{0}_n \notin C$ 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) $\mathbf{x}_0 \in C$ があって

$$|\mathbf{x}_0|_{2,n} = \min\{|\mathbf{x}|_{2,n}; \mathbf{x} \in C\} > 0$$

となる.

(2) さらに

$$0 \leq \langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_{2,n} \quad (\forall \mathbf{x} \in C) \quad (\text{C.3})$$

が成立する.

定義 C.14. S_1 と S_2 を $\mathbb{R}^n$ の空でない部分集合とする. $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$ とする.

- (1) 超平面 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b$ 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.

$$\begin{aligned}\forall \mathbf{x} \in S_1 &\Rightarrow \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b \geq 0, \\ \forall \mathbf{x} \in S_2 &\Rightarrow \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b \leq 0.\end{aligned}$$

- (2) 超平面 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b$ 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.

$$\begin{aligned}\forall \mathbf{x} \in S_1 &\Rightarrow \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b > 0, \\ \forall \mathbf{x} \in S_2 &\Rightarrow \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b < 0.\end{aligned}$$

定理 C.15. $C \subset \mathbb{R}^n$ を空でない凸閉部分集合とし, $\mathbf{y} \notin C$ とする. このとき C と $\mathbf{y}$ を厳密に分離する超平面 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b$ ($\exists \mathbf{a} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$) が存在する.

定義 C.16. $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ とする. 集合

$$C = \left\{ \sum_{j=1}^p c_j \mathbf{a}_j; c_j \geq 0 (j = 1, 2, \dots, p) \right\}$$

を $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\}$ によって生成された有限錐という.

定義 C.17. $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\}$ 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.

補題 C.18. $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ は有限錐 C を生成しているとする. $C_1, C_2, \dots, C_q$ を $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\}$ 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.

定理 C.19. $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\} \subset \mathbb{R}^n$ 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.

定理 C.20. (Farkas の交代定理) $\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列とし, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ 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) $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}_n$ は解 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ を持つ.
(2) $\mathbf{A}^\top \mathbf{y} \geq \mathbf{0}_m, \langle \mathbf{y}, \mathbf{b} \rangle_{2,m} < 0$ は解 $\mathbf{y}^* \in \mathbb{R}^m$ を持つ.

ただし $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)^\top$, $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots, z_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ のとき

$$\mathbf{w} \geq \mathbf{z} \Leftrightarrow w_j \geq z_j \ (j = 1, 2, \dots, n)$$

である.

記法: $\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列とする.

$$\begin{aligned} \ker(\mathbf{A}) &:= \{\mathbf{x}; \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}_m\} \subset \mathbb{R}^n, \\ \text{range}(\mathbf{A}) &:= \{\mathbf{A}\mathbf{x}; \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m. \end{aligned}$$

$S \subset \mathbb{R}^m$ としたとき

$$S^\perp := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m; \langle \mathbf{x}, \mathbf{s} \rangle_{2,m} = 0 \ (\forall \mathbf{s} \in S)\}$$

とする.

定理 C.21. $\mathbf{A}$ を $m \times n$ 行列, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ とする. このとき次は同値である.

(1) $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ は解 $\mathbf{x}^*$ を持つ.

(2) $\mathbf{b} \in \ker(\mathbf{A}^\top)^\perp$ である.

C.3 共役凸関数と Young の不等式

定義 C.22. 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ が凸であるとは, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ と $0 \leq c \leq 1$ に対して

$$f(c\mathbf{x} + (1-c)\mathbf{y}) \leq cf(\mathbf{x}) + (1-c)f(\mathbf{y})$$

が成り立つときをいう.

注意 C.23. 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ が凸であるための必要十分条件はそのエピグラフ

$$E = \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ y \end{bmatrix} : y \geq f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \right\} \subset \mathbb{R}^{n+1}$$

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 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathbb{R}^n$ と $c_1, c_2, \dots, c_m \geq 0$ で $\sum_{k=1}^m c_k = 1$ に対して

$$f\left(\sum_{k=1}^m c_k \mathbf{x}_k\right) \leq \sum_{k=1}^m c_k f(\mathbf{x}_k)$$

が成り立つ.

□

定理 C.24. (1) 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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 $\forall \mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\mathbf{x}_0) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_0), \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{x})$$

が成り立つことである. ただし

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}) &= \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \right)^\top, \\ \mathbf{x} &= (x_1, x_2, \dots, x_n)^\top \end{aligned}$$

である.

(2) 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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 $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq \mathbf{0}_{n \times n}$$

が成り立つことである. ただし, $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq \mathbf{0}_{n \times n}$ は $\forall \mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\mathbf{y}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{y} = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}) y_i y_j \geq 0$$

が成り立つことである. ただし

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) := \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}(\mathbf{x}) \right)_{j,k=1,2,\dots,n}$$

である.

定義 C.25. 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ はとする. 各 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\partial f(\mathbf{x}) = \left\{ \mathbf{r} \in \mathbb{R}^n; f(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{r}, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{y}) \ (\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n) \right\}$$

とおく. この集合を点 $\mathbf{x}$ における凸関数 f の劣微分という.

注意 C.26. 凸関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は点 $\mathbf{x}$ で連続微分可能なとき

$$\partial f(\mathbf{x}) = \{ \nabla f(\mathbf{x}) \}$$

となる. 一般に, $\partial f(\mathbf{x})$ は1つの元よりも多い元をもつことがある. $\square$

例 C.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) $n > 1$, $f(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}|_{2,n}$ とする. このとき

$$\partial f(\mathbf{x}) = \begin{cases} \left\{ \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|_{2,n}} \right\} & (\mathbf{x} \neq \mathbf{0}_n) \\ B(1) & (\mathbf{x} = \mathbf{0}_n) \end{cases}$$

となる. ただし $B(1) := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; |\mathbf{x}|_{2,n} = 1\}$ である.

実際, $\forall \mathbf{r} \in \partial f(\mathbf{0}_n)$ は $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$|\mathbf{0}_n|_{2,n} + \langle \mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{0}_n \rangle_{2,n} \leq |\mathbf{x}|_{2,n}$$

を意味する. $|\langle \mathbf{r}, \mathbf{x} \rangle_{2,n}| \leq |\mathbf{r}|_{2,n} \times |\mathbf{x}|_{2,n}$ から

$$\langle \mathbf{r}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} \leq |\mathbf{x}|_{2,n} \Leftrightarrow |\mathbf{r}|_{2,n} \leq 1$$

となる. □

定理 C.28. 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は凸とする. 各 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\partial f(\mathbf{x}) \text{ は凸閉集合}$$

である.

注意 C.29. 定理 C.24(2) において, 関数 f は凸かつ 2 回微分可能と仮定した. しかし, f は凸関数であると, ほとんど至るところで 2 回微分可能なことが証明できる. 証明は [4, pp.273 – 275] を参照のこと. □

定理 C.30. 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は凸とする. このとき, 各 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $\partial f(\mathbf{x}) \neq \emptyset$ となる.

以降, この節では関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は凸で

$$\lim_{|\mathbf{x}|_{2,n} \rightarrow \infty} \frac{f(\mathbf{x})}{|\mathbf{x}|_{2,n}} = +\infty \quad (\text{C.4})$$

をみたすとする. これを超線型成長条件という.

定義 C.31. $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ を (C.4) をみたす凸関数とする. このとき, f の凸共役関数 $f^\vee$ を

$$f^\vee(\mathbf{y}) = \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{ \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \} \quad (\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n)$$

で定める.

注意 C.32. $n = 1$, $f(x) = x^2/2$ ($x \in \mathbb{R}$) とする. このとき $y \in \mathbb{R}$ に対し

$$f^\vee(y) = \max_x \left(xy - \frac{x^2}{2} \right) = \frac{y^2}{2}$$

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

$$f^\vee(y) = \max_x \left(xy - \frac{|x|^p}{p} \right) = \frac{|y|^q}{q}, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$$

となる.

$\therefore y$ を固定し

$$g(x) = xy - \frac{|x|^p}{p}$$

とする. すると $\dot{g}(x) = y - |x|^{p-1} \text{sgn}(x)$ となる. ただし

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ -1 & (x < 0) \\ 0 & (x = 0) \end{cases}$$

とした. したがって

$$0 = \dot{g}(x) \Leftrightarrow y = |x|^{p-1} \text{sgn}(x) \Rightarrow x = |y|^{1/(p-1)} \text{sgn}(y)$$

となる. 結果

$$\begin{aligned} f^\vee(y) &= (|y|^{1/(p-1)} \text{sgn}(y))y - \frac{\left| |y|^{1/(p-1)} \text{sgn}(y) \right|^p}{p} = |y|^{\frac{1}{1-p}+1} - \frac{|y|^{\frac{p}{p-1}}}{p} \\ &= \left(1 - \frac{1}{p} \right) |y|^{\frac{p}{p-1}} = \frac{|y|^q}{q} \end{aligned}$$

がわかる. □

次の補題は双対関数の定義 (定義 C.31) よりわかる.

補題 C.33. $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y}) \quad (\text{C.5})$$

である. これを Fenchel-Young 双対という.

定理 C.34. (C.4) をみたす凸関数 f に対して, 以下が成立する.

- (1) $f^\vee : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は凸関数である.
- (2) $\lim_{\|\mathbf{y}\|_{2,n} \rightarrow \infty} \frac{|f^\vee(\mathbf{y})|}{\|\mathbf{y}\|_{2,n}} = +\infty$ となる.
- (3) $(f^\vee)^\vee = f$ である.

定理 C.35. f を (C.4) をみたす凸関数とする. このとき, $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して次の条件は同値である.

$$(1) \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} = f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y}).$$

$$(2) \mathbf{y} \in \partial f(\mathbf{x}).$$

$$(3) \mathbf{x} \in \partial f^\vee(\mathbf{y}).$$

C.4 共役関数と右逆関数

$\varphi: [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ を単調増加で右連続な関数とし

$$\varphi(0) = 0, \quad \varphi(t) > 0 \quad (t > 0), \quad \varphi(\infty) = \infty \quad (\text{C.6})$$

をみたすと仮定する. このとき, φ に右逆関数 $\varphi^\leftarrow$ を

$$\varphi^\leftarrow(x) := \sup\{y \geq 0; \varphi(y) \leq x\}$$

で定義する.

注意 C.36. $x > 0$ に対して, 左逆関数は

$$\varphi(x)^\leftarrow = \inf\{y > 0; \varphi(y) > x\}$$

とも表現できる. また, F を分布関数としてとき, F の quantile 関数を

$$F^-(x) = \inf\{y \in \mathbb{R}; F \geq x\}$$

で定めている. F^- を F の左逆関数とも呼ぶことがある. □

補題 C.37. 関数 φ は (C.6) をみたすとする. このとき, φ の右逆関数 $\varphi^\leftarrow$ は右連続で

$$\varphi^\leftarrow(0) = 0, \quad \varphi^\leftarrow(t) > 0 \quad (t > 0), \quad \varphi^\leftarrow(\infty) = \infty$$

である.

補題 C.38. $x \geq 0$ に対して

$$x \leq \varphi(\varphi^\leftarrow(x)), \quad x \leq \varphi^\leftarrow(\varphi(x))$$

である. さらに, $\forall \epsilon > 0$ に対して

$$\varphi(\varphi^\leftarrow(x) - \epsilon) \leq x, \quad \varphi^\leftarrow(\varphi(x) - \epsilon) \leq x$$

が成り立つ.

(C.6) をみたす単調増加かつ右連続関数 φ とその右逆関数 $\varphi^\leftarrow$ に対して

$$\Phi(x) := \int_0^x \varphi(t) \, d\mathbf{m}(t), \quad \Phi^\vee(x) := \int_0^x \varphi^\leftarrow(t) \, d\mathbf{m}(t) \quad (x \geq 0)$$

と定める. 定理 C.4 から Φ と $\Phi^\vee$ はともに凸関数になる. $\Phi^\vee$ を凸関数 Φ の共役凸関数とよぶ.

例 C.39. $1 < p < \infty$, $p^{-1} + q^{-1} = 1$ とする.

$$\varphi(x) = x^{p-1} \quad (0 \leq x < \infty)$$

とおくと

$$\varphi^\leftarrow(x) = \sup\{y \geq 0; \varphi(y) \leq x\} = \sup\{y \geq 0; y^{p-1} \leq x\} = x^{1/(p-1)}$$

となる. よって

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \int_0^\infty \varphi(t) \, d\mathbf{m}(t) = \int_0^\infty t^{p-1} \, d\mathbf{m}(t) = \frac{x^p}{p}, \\ \Phi(x)^\vee &= \int_0^x \varphi^\leftarrow(t) \, d\mathbf{m}(t) = \int_0^x t^{1/(p-1)} \, d\mathbf{m}(t) = \frac{x^{1+1/(p-1)}}{1+1/(p-1)} = \frac{x^q}{q} \end{aligned}$$

となる. □

定理 C.40. $\forall x, y \geq 0$ に対して

$$xy \leq \Phi(x) + \Phi^\vee(y) \tag{C.7}$$

が成り立つ. とくに

$$x\varphi(x) = \Phi(x) + \Phi^\vee(\varphi(x)) \tag{C.8}$$

$$y\varphi^\leftarrow(y) = \Phi(\varphi^\leftarrow(y)) + \Phi^\vee(y) \tag{C.9}$$

が成り立つ.

Proof. 図を書けばよい. □

系 C.41.

$$\Phi^\vee(y) = \sup_{x \geq 0} \{xy - \Phi(x)\}$$

が成り立つ.

例 C.42 (例 C.39 の続き). 系 C.41 を用いて, $\Phi^\vee$ を求めてみよう.

$$\Phi^\vee(y) = \sup_{x \geq 0} \left\{ xy - \frac{x^p}{p} \right\} =: \sup_{x \geq 0} h(x)$$

であった. すると

$$\dot{h}(x) = y - x^{p-1} = 0$$

なので, $x = y^{-(p-1)}$ である. よって

$$\begin{aligned} \Phi^\vee(y) &= y^{-(p-1)}y - \frac{y^{p/(p-1)}}{p} = y^{1+(p-1)^{-1}} - \frac{y^q}{p} = y^q - \frac{y^q}{p} = \left(1 - \frac{1}{p}\right)y^q \\ &= \frac{y^q}{q} \end{aligned}$$

となる.

C.5 補遺: C 節の定理の証明

定理 C.3 の証明: まず, $\forall x \in [a, b]$ は

$$x = ca + (1 - c)b \quad (0 \leq c \leq 1)$$

と表せるから, 凸関数の定義より

$$f(x) \leq cf(a) + (1 - c)f(b) \leq \max\{f(a), f(b)\} =: K$$

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

$$g(t) := f(x_0 + t) - f(x_0) \quad (a - x_0 < t < b - x_0)$$

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

$$0 < \epsilon' < \min \left\{ \frac{\epsilon}{K + |f(x_0)|}, 1 \right\} \quad (\text{C.10})$$

をみたすように選ぶ. さらに正数 ρ と δ を

$$0 < \rho < \min\{x_0 - a, b - x_0\}, \quad 0 < \delta < \rho\epsilon' \quad (\text{C.11})$$

をみたすように定める. $0 < \epsilon' \leq 1$ だから

$$|t| < \delta \Rightarrow |t| < \rho$$

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

$$|t| < \delta \Rightarrow \left| \frac{t}{\epsilon'} \right| < \rho \Rightarrow x_0 + \frac{t}{\epsilon'} \in (a, b)$$

となること¹¹がわかる. よって, (C.12) 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 (C.10) から

$$g(t) \leq (1 - \epsilon')g(0) + \epsilon'g\left(\frac{t}{\epsilon'}\right) = \epsilon'g\left(\frac{t}{\epsilon'}\right) \leq \epsilon'K_1 < \epsilon \quad (\text{C.12})$$

となることに注意をする. 他方

$$0 = \frac{\epsilon'}{1 + \epsilon'} \left(-\frac{t}{\epsilon'} \right) + \frac{1}{1 + \epsilon'} \cdot t$$

と表されるので

$$\begin{aligned} 0 \leq g(0) &\leq \frac{\epsilon'}{1 + \epsilon'}g\left(-\frac{t}{\epsilon'}\right) + \frac{1}{1 + \epsilon'}g(t) \leq \frac{\epsilon'K_1}{1 + \epsilon'} + \frac{1}{1 + \epsilon'}g(t) \\ &< \frac{\epsilon}{1 + \epsilon'} + \frac{1}{1 + \epsilon'}g(t) \end{aligned}$$

となり

$$-\epsilon < g(t) \quad (\text{C.13})$$

を得る. よって (C.12) と (C.13) より

$$|t| < \delta \Rightarrow |g(t)| < \epsilon$$

である. $t = x - x_0$ と $g(t)$ の定義より

$$|x - x_0| < \delta \Rightarrow |f(x) - f(x_0)| < \epsilon$$

となり, $f(x)$ は点 x_0 で連続となる. □

¹¹ $\left| \frac{t}{\epsilon'} \right| < \rho$ と (C.11) から $-x_0 + a < -\rho < \frac{t}{\epsilon'} < \rho < b - x_0$ となるので $a < \frac{t}{\epsilon'} + x_0 < b$ がわかる.

定理 C.4 の証明: まず, $x, y \in [a, b]$, $x < y$, $0 \leq c \leq 1$ のとき

$$x \leq cx + (1 - c)y \leq y$$

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

$$\int_{cx+(1-c)y}^y \varphi(t) dt \geq \{y - cx - (1 - c)y\} \varphi(cx + (1 - c)y), \quad (\text{C.14})$$

$$\int_x^{cx+(1-c)y} \varphi(t) dt \leq \{cx + (1 - c)y - x\} \varphi(cx + (1 - c)y) \quad (\text{C.15})$$

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.

$$\begin{aligned} & cf(x) + (1 - c)f(y) - f(cx + (1 - c)y) \\ &= (1 - c)\{f(y) - f(cx + (1 - c)y)\} - c\{f(cx + (1 - c)y) - f(x)\} \\ &= (1 - c) \int_{cx+(1-c)y}^y \varphi(t) dt - c \int_x^{cx+(1-c)y} \varphi(t) dt \\ &\geq (1 - c)\{y - cx - (1 - c)y\} \varphi(cx + (1 - c)y) \quad (\because (\text{C.14})) \\ &\quad - c\{cx + (1 - c)y - x\} \varphi(cx + (1 - c)y) \quad (\because (\text{C.15})) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる. 以上の議論から

$$cf(x) + (1 - c)f(y) \geq f(cx + (1 - c)y)$$

が示せた. □

定理 C.5 の証明: 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

$$f(x + \xi) \leq \frac{\xi}{\eta}f(x + \eta) + \left(1 - \frac{\xi}{\eta}\right)f(x) = \frac{\xi}{\eta}\{f(x + \eta) - f(x)\} + f(x)$$

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

$$\dot{f}_+(x) \leq \frac{f(x+\eta) - f(x)}{\eta} \quad (\text{C.16})$$

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

$$f(x - \xi) \leq \frac{\xi}{\eta}f(x - \eta) + \left(1 - \frac{\xi}{\eta}\right)f(x) = \frac{\xi}{\eta}\{f(x - \eta) - f(x)\} + f(x)$$

である. したがって $0 < \xi < \eta$ のとき

$$\frac{f(x) - f(x - \eta)}{\eta} \leq \frac{f(x) - f(x - \xi)}{\xi}$$

となり, $\xi \searrow 0$ とすれば

$$\dot{f}_-(x) \geq \frac{f(x) - f(x - \eta)}{\eta} \quad (\text{C.17})$$

を得る. さらに

$$f(x) = f\left(\frac{(x + \xi) + (x - \xi)}{2}\right) \leq \frac{f(x + \xi) + f(x - \xi)}{2}$$

となり

$$f(x) - f(x - \xi) \leq f(x + \xi) - f(x)$$

である. だから

$$\frac{f(x) - f(x - \xi)}{\xi} \leq \frac{f(x + \xi) - f(x)}{\xi}$$

がわかる. ここで, $\xi \searrow 0$ とすると

$$\dot{f}_-(x) \leq \dot{f}_+(x) \quad (\text{C.18})$$

がわかる. したがって, (C.16) – (C.18) を考慮すれば

$$\frac{f(x) - f(x - \eta)}{\eta} \leq \dot{f}_-(x) \leq \dot{f}_+(x) \leq \frac{f(x + \eta) - f(x)}{\eta} \quad (\text{C.19})$$

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. (C.19) の

$$f_-(x) \leq f_+(x) \leq \frac{f(x + \eta) - f(x)}{\eta}$$

において, $x = x_1, x + \eta = x_2$ とおくと

$$f_-(x_1) \leq f_+(x_1) \leq \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

を得る. 同様に (C.19) の

$$\frac{f(x) - f(x - \eta)}{\eta} \leq f_-(x) \leq f_+(x)$$

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

$$\dot{f}_-(x_1) \leq \dot{f}_+(x_1) \leq \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \leq \dot{f}_-(x_2) \leq \dot{f}_+(x_2) \quad (\text{C.20})$$

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. □

定理 C.6 の証明: $a < c < x < b$ 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 (C.20) より, $k = 1, 2, \dots, n$ 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 $\max_{1 \leq k \leq n} \{x_k - x_{k-1}\} \rightarrow 0 \ (n \rightarrow \infty)$ とすれば

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n \dot{f}_-(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) &\rightarrow \int_c^x \dot{f}_-(t) dt \\ \sum_{k=1}^n \dot{f}_+(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) &\rightarrow \int_c^x \dot{f}_+(t) dt \\ \sum_{k=1}^n \dot{f}_-(x_k)(x_k - x_{k-1}) &\rightarrow \int_c^x \dot{f}_-(t) dt \\ \sum_{k=1}^n \dot{f}_+(x_k)(x_k - x_{k-1}) &\rightarrow \int_c^x \dot{f}_+(t) dt \end{aligned}$$

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. □

定理 C.7 の証明: 必要性: 関数 f が开区間 (a, b) 上で凸ならば, 定理 C.6 により, 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.

十分性: (C.1) が成立したと仮定する. $\forall x, y \in (a, b), x < y, 0 < c < 1$ に対し

$$x_0 = cx + (1 - c)y$$

とおく. (C.1) 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 $x_0 = cx + (1 - c)y$ を代入すると

$$\frac{f(cx + (1 - c)y) - f(x)}{(1 - c)(y - x)} \leq \frac{f(y) - f(cx + (1 - c)y)}{c(y - x)}$$

を得る. 上の不等式の辺々に $c(1 - c)(y - x)$ を掛けと

$$c\{f(cx + (1 - c)y) - f(x)\} \leq (1 - c)\{f(y) - f(cx + (1 - c)y)\}$$

を得る. これを整理すれば

$$f(cx + (1 - c)y) \leq cf(x) + (1 - c)f(y)$$

がわかる. よって, $c = 0, 1$ 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. $\square$

定理 C.9 の証明: 必要性: 関数 f は开区間 (a, b) 上の凸で $x_0 \in (a, b)$ なので, 定理 C.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: $x, y \in (a, b), x < y, 0 \leq c \leq 1$ とし

$$x_0 = cx + (1 - c)y$$

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 (C.2) から $S(x) \leq f(x)$ とである. さらに, S の線型性から

$$\begin{aligned} f(cx + (1 - c)y) &= f(x_0) = S(x_0) = cS(x) + (1 - c)S(y) \\ &\leq cf(x) + (1 - c)f(y) \end{aligned}$$

となる. よって, 関数 f は (a, b) 上の凸である. $\square$

定理 C.12 の証明: $\mathbf{y} \in \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p \rangle =: A$ なので, ある $r \in \mathbb{N}$ と $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r \in A$ があって

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^r c_i \mathbf{x}_i, \quad c_i > 0 \ (i = 1, 2, \dots, r), \quad \sum_{i=1}^r c_i = 1$$

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 $\mathbf{y}$ をそれらの凸結合として表せないとする. $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r$ はアファイン従属と仮定する. すると, ある $a_i \in \mathbb{R} \ (i = 1, 2, \dots, r)$ で $a_1 a_2 \cdots a_r \neq 0$ なるものが存在して

$$\sum_{i=1}^r a_i \mathbf{x}_i = \mathbf{0}_n \quad \text{かつ} \quad \sum_{i=1}^r a_i = 0$$

とできる. ただし, $\mathbf{0}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の零ベクトルである. 集合 $\{a_1, a_2, \dots, a_r\}$ 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 $\frac{c_i}{a_i}$ が最小となるもの $a_i \ (i \in \{1, 2, \dots, r\})$ 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

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^r c_i \mathbf{x}_i = \sum_{i=1}^r c_i \mathbf{x}_i - \underbrace{\frac{c_1}{a_1} \sum_{i=1}^r a_i \mathbf{x}_i}_{=0} = \sum_{i=1}^r \left(c_i - \frac{c_1}{a_1} a_i \right) \mathbf{x}_i$$

と書ける. すると $a_i > 0 \ (i \in \{2, 3, \dots, r\})$ のとき, $\frac{c_1}{a_1}$ の最小性から, $\frac{c_i}{a_i} > \frac{c_1}{a_1}$ となる. したがって

$$c_i - \frac{c_1}{a_1} a_i \geq c_i - \frac{c_i}{a_i} a_i = 0$$

となる. $a_i \leq 0 \ (i \in \{2, 3, \dots, r\})$ のときは, 明らかに $c_i - \frac{c_1}{a_1} a_i > 0$ となる. 以上から任意の $i \in \{1, 2, \dots, r\}$ に対して

$$c_i - \frac{c_1}{a_1} a_i \geq 0$$

がわかる. さらに $\left\{ c_i - \frac{c_1}{a_1} a_i \right\}_{i=1, 2, \dots, r}$ 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, $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r$ はアファイン独立となるので, $r \leq k+1$ がわかる. $\square$

定理 C.13 の証明:

$$\delta = \inf \{ \|\mathbf{x}\|_{2,n}; \mathbf{x} \in C \} \geq 0$$

とおく. 点列 $\{\mathbf{x}_k\}_{k=1}^{\infty} \subset C$ を選んで

$$\delta = \lim_{k \rightarrow \infty} |\mathbf{x}_k|_{2,n}$$

となるようにする. $\{\mathbf{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ は有界なので Bolzano-Weirstrass の定理より収束する部分列 $\{\mathbf{x}_{k(j)}\}_{j=1}^{\infty}$ が存在するので, この部分列の収束先を

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \mathbf{x}_{k(j)} =: \mathbf{x}_0$$

とおく. 結果

$$|\mathbf{x}_0|_{2,n} = \lim_{j \rightarrow \infty} |\mathbf{x}_{k(j)}|_{2,n} = \delta$$

となる. 部分集合 C は閉なので $\mathbf{x}_0 \in C$ となる. $\mathbf{0}_n \notin C$ なので $\delta > 0$ がわかる.

(2) $\mathbf{x}_0 \in C$ は $|\mathbf{x}_0|_{2,n} = \delta$ をみたす唯一の点であることを示すために $\mathbf{x}_1 \in C$ で $|\mathbf{x}_1|_{2,n} = \delta$ とする. 部分集合 C の凸性から

$$\frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{x}_1) \in C$$

となる. したがって

$$\left| \frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{x}_1) \right|_{2,n} \geq \delta$$

である. しかし

$$\begin{aligned} 4\delta^2 &\leq |\mathbf{x}_0 + \mathbf{x}_1|_{2,n}^2 \leq |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|_{2,n}^2 + |\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_0|_{2,n}^2 \leq 2\{|\mathbf{x}_1|_{2,n}^2 + |\mathbf{x}_0|_{2,n}^2\} \\ &= 4\delta^2 \end{aligned}$$

より

$$|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|_{2,n}^2 = 0 \Rightarrow \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0$$

である. (C.3) を示すために $\forall \mathbf{x} \in C$ を取る. このとき $(1-c)\mathbf{x}_0 + c\mathbf{x} \in C$ ($0 \leq c \leq 1$) である. したがって

$$|\mathbf{x}_0|_{2,n}^2 \leq |(1-c)\mathbf{x}_0 + c\mathbf{x}|_{2,n}^2 = |\mathbf{x}_0|_{2,n}^2 + c^2|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|_{2,n}^2 + 2c\langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_{2,n}$$

である. 結果

$$0 \leq c|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|_{2,n}^2 + 2\langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_{2,n}$$

がわかる. ここで, $c \rightarrow 0$ とすれば (C.3) がわかる. $\square$

定理 C.15 の証明: 一般性を失うことなく $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ としてよい. 左の仮定から $\mathbf{0} \notin C$ に注意して補題 C.13 を用いると $\mathbf{x}_0 \in C$ があって

$$0 < \delta = |\mathbf{x}_0|_{2,n} = \min\{|\mathbf{x}|_{2,n}; \mathbf{x} \in C\}$$

となる. ここで $\mathbf{z} = (1/2)\mathbf{x}_0$, $\mathbf{a} = \mathbf{x}_0/\delta$ とおく. 超平面 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle_{2,n} = 0$ を考える. すなわち

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b = 0, \quad b = -\langle \mathbf{a}, \mathbf{z} \rangle_{2,n}$$

である. $\mathbf{y} = \mathbf{0}_n$ に対して

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} + b = b = -\langle \mathbf{a}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} = -\left\langle \frac{\mathbf{x}_0}{\delta}, \frac{\mathbf{x}_0}{2} \right\rangle_{2,n} = -\frac{|\mathbf{x}_0|_{2,n}^2}{2\delta} = -\frac{\delta}{2} < 0. \quad (\text{C.21})$$

$\mathbf{x} \in C$ に対して (C.3) から

$$0 \leq \langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_{2,n}$$

である. よって

$$0 \leq \langle \delta \mathbf{a}, \mathbf{x} - 2\mathbf{z} \rangle_{2,n}$$

となる. 上の式の両辺を $\delta > 0$ で割れば

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle_{2,n} - \langle \mathbf{a}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle_{2,n} - \left\langle \frac{\mathbf{x}_0}{\delta}, \frac{\mathbf{x}_0}{2} \right\rangle_{2,n} \\ &= \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle_{2,n} - \frac{|\mathbf{x}_0|_{2,n}^2}{2\delta} \\ &= \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle_{2,n} - \frac{\delta}{2} \end{aligned}$$

となる. よって

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} - \mathbf{z} \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - \langle \mathbf{a}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b \geq \frac{\delta}{2} > 0 \quad (\text{C.22})$$

となる. (C.21) と (C.22) より $\langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + b$ は $\mathbf{y} = \mathbf{0}_n$ と C を厳密に分離することが示せた. $\square$

定理 C.18 の証明: $C_j \subset C$ ($j = 1, 2, \dots, q$) なので

$$\bigcup_{j=1}^q C_j \subset C$$

となる. いま $\mathbf{b} \in C = \{\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}; \boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)^\top, \beta_j \geq 0 (j = 1, 2, \dots, p)\}$ を選ぶ. ただし $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p)$ は $n \times p$ 行列である. このとき

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{b}, \quad \boldsymbol{\beta} \geq \mathbf{0}_p$$

なので, 基本解 $\boldsymbol{\beta}^* = (\beta_1^*, \beta_2^*, \dots, \beta_p^*)^\top \in \mathbb{R}^p$ が存在して

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}^* = \mathbf{b}$$

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, $1 \leq j_1 < \dots < j_m \leq p$ は

$$\beta_{j_\ell} > 0 \ (j = 1, 2, \dots, m)$$

で

$$\{\mathbf{a}_{j_1}, \mathbf{a}_{j_2}, \dots, \mathbf{a}_{j_m}\}$$

は線型独立である. よって $\mathbf{b}$ は $\{\mathbf{a}_{j_1}, \mathbf{a}_{j_2}, \dots, \mathbf{a}_{j_m}\}$ で生成された基本錐に含まれるので

$$\mathbf{b} \in \bigcup_{j=1}^q C_j$$

となる. よって

$$C \subset \bigcup_{j=1}^q C_j$$

となる. □

定理 C.19 の証明: 凸性: $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2 \in C$, $0 \leq c \leq 1$ とする. このとき $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}^p$ が存在して

$$\mathbf{c}_1 = \mathbf{A}\beta_1, \quad \mathbf{c}_2 = \mathbf{A}\beta_2$$

となる. ただし $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p)$, $\beta_1 \geq \mathbf{0}_p$, $\beta_2 \geq \mathbf{0}_p$ である. したがって

$$(1-c)\mathbf{c}_1 + c\mathbf{c}_2 = \mathbf{A}((1-c)\beta_1 + c\beta_2)$$

となる. さらに $(1-c)\beta_1 + c\beta_2 \geq \mathbf{0}_p$ である. よって,

$$(1-c)\mathbf{c}_1 + c\mathbf{c}_2 \in C$$

より C は凸集合であることがわかる.

C は閉集合: C_j ($j = 1, 2, \dots, q$) を独立なベクトル

$$\{\mathbf{a}_{j_1}, \mathbf{a}_{j_2}, \dots, \mathbf{a}_{j_\ell}\} \subset \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_p\}$$

によって生成される基本錐とする. $\{\mathbf{c}_k\}_{k=1}^\infty$ は C_j の収束する点列とし, $\mathbf{c}_0 \in \mathbb{R}^n$ に収束するとする.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{c}_k = \mathbf{c}_0.$$

$\mathbf{c}_0 \in C_j$ を示そう. $\{\mathbf{a}_{j_1}, \mathbf{a}_{j_2}, \dots, \mathbf{a}_{j_\ell}\}$ は線型独立なので, 任意の $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_\ell)^\top \in \mathbb{R}^\ell$ に対し

$$\sum_{k=1}^{\ell} u_k \mathbf{a}_{j_k} = \mathbf{0}_n \Rightarrow \mathbf{u} = \mathbf{0}_n$$

となる．よって上の主張の対偶を取ると $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^\ell$ で $|\mathbf{u}|_{2,\ell} = 1$ なるものに対して

$$\sum_{k=1}^{\ell} u_k \mathbf{a}_{j_k} \neq \mathbf{0}_\ell$$

となる．よって C_j は凸集合なので，補題 C.18 より

$$\min \left\{ \left| \sum_{k=1}^{\ell} u_k \mathbf{a}_{j_k} \right|_{2,\ell} ; |\mathbf{u}|_{2,\ell} = 1 \right\} =: \epsilon > 0$$

がわかる．したがって ϵ の定義に注意すると $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_\ell)^\top \in \mathbb{R}^\ell$ に対し

$$\left| \sum_{k=1}^{\ell} v_k \mathbf{a}_{j_k} \right|_{2,\ell} = |\mathbf{v}|_{2,\ell} \left| \sum_{j=1}^{\ell} \frac{v_k}{|\mathbf{v}|_{2,\ell}} \mathbf{a}_{j_k} \right|_{2,\ell} \geq \epsilon |\mathbf{v}|_{2,\ell} \quad (\text{C.23})$$

となる． $\mathbf{c}_k \in C_j$ ($k = 1, 2, \dots$) に対して

$$\mathbf{c}_k = \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_k$$

とおけば

$$\{j_1, j_2, \dots, j_\ell\} = \{j \in \{1, 2, \dots, p\}; \beta_j > 0, \boldsymbol{\beta}_k = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)^\top\}.$$

このとき

$$\mathbf{c}_k = \sum_{j=1}^{\ell} \beta_{j_k} \mathbf{a}_{j_k}.$$

(C.23) より

$$\frac{1}{\epsilon} |\mathbf{c}_k|_{2,p} \geq |\boldsymbol{\beta}_k|_{2,p} \quad (k = 1, 2, \dots)$$

となる．よって $\{\mathbf{c}_k\}_{k=1}^\infty$ 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

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \boldsymbol{\beta}_{k_j} =: \boldsymbol{\beta}_0$$

とする．このとき $\boldsymbol{\beta}_0 \geq \mathbf{0}$ で

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_0 = \lim_{j \rightarrow \infty} \mathbf{A}\boldsymbol{\beta}_{k_j} = \lim_{j \rightarrow \infty} \mathbf{c}_{k_j} = \mathbf{c}_0$$

となる． $\boldsymbol{\beta}_0$ の j_k 成分 ($k = 1, 2, \dots, \ell$) 以外は零なので， $\mathbf{c}_0 \in C_j$ 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. $\square$

定理 C.20 の証明: $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^m$ は (1) の解, $\mathbf{y}^* \in \mathbb{R}^n$ は (2) の解とする. このとき

$$0 \leq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{A}^\top \mathbf{y}^* \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{A} \mathbf{x}^*, \mathbf{y}^* \rangle_{2,m} = \langle \mathbf{b}, \mathbf{y}^* \rangle_{2,m} < 0$$

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

$$\mathbf{b} \notin C := \{\mathbf{A}\mathbf{x}; \mathbf{x} \geq \mathbf{0}_n\}$$

となる. C は閉凸集合なので超平面が存在して C と $\mathbf{b}$ を厳密に分離する. すなわち, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^m$ と $c \in \mathbb{R}$ があって

$$\mathbf{z} \in C \Rightarrow \langle \mathbf{a}, \mathbf{z} \rangle_{2,m} + c > 0 \quad (\text{C.24})$$

かつ

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle_{2,m} + c < 0. \quad (\text{C.25})$$

$\mathbf{x} \geq \mathbf{0}_n, c > 0$ とし

$$\mathbf{z} := c\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}(c\mathbf{x}) \in C$$

となる. (C.24) より

$$\langle \mathbf{a}, c\mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_{2,n} + c > 0.$$

$c > 0$ で割って $c \rightarrow \infty$ とすれば

$$0 \leq \langle \mathbf{a}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{A}^\top \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} \quad (\forall \mathbf{x} \geq \mathbf{0}_n)$$

となる. したがって

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{a} \geq \mathbf{0}_n$$

となる. いま $\mathbf{y} = \mathbf{a}$ とおけば, $\mathbf{A}^\top \mathbf{y} \geq \mathbf{0}_n$ となる. (C.24) において $\mathbf{z} = \mathbf{0}_n \in C$ とおけば

$$c > 0$$

となる. さらに, (C.25) より

$$\langle \mathbf{b}, \mathbf{y} \rangle_{2,m} = \langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle_{2,m} < -c < 0$$

となる. よって $\langle \mathbf{b}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} < 0$ 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. $\square$

定理 C.21 の証明: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ が解を持つための必要十分条件は

$$\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A}, -\mathbf{A}] \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{u} \geq \mathbf{0}_n, \mathbf{v} \geq \mathbf{0}_n$$

は解を持つ. これは

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \mathbf{b}, \quad \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} \geq \mathbf{0}_{2n}$$

とした Farkas(1) である. よって

$$\left[\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \text{ は解 } \mathbf{x}^* \text{ を持つ} \right] \Leftrightarrow \left[\text{Farkas (1) が成立} \right] \quad (\text{C.26})$$

となる.

一方 Farkas(2) が成立するとき

$$\tilde{\mathbf{A}}^\top \mathbf{y} \geq \mathbf{0}_n, \quad \langle \mathbf{y}, \mathbf{b} \rangle_{2,n} < 0$$

が解を持つ. これは

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}^\top \\ -\mathbf{A}^\top \end{bmatrix} \mathbf{y} \geq \begin{bmatrix} \mathbf{0}_n \\ \mathbf{0}_n \end{bmatrix}$$

である. よって $\mathbf{A}^\top \mathbf{y} \geq \mathbf{0}_n$ かつ $-\mathbf{A}^\top \mathbf{y} \geq \mathbf{0}_n$ より $\mathbf{A}^\top \mathbf{y} = \mathbf{0}_n$ なので

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{y} = \mathbf{0}_n, \quad \langle \mathbf{y}, \mathbf{b} \rangle_{2,n} < 0$$

は解をもつ.

以上の議論から

1. 「 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ は解 $\mathbf{x}^*$ を持つ」が成立する.
2. $\tilde{\mathbf{A}}^\top \mathbf{y} \geq \mathbf{0}_n, \quad \langle \mathbf{y}, \mathbf{b} \rangle_{2,n} < 0$ 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

$$\text{Farkas (2) が起こらない} \Leftrightarrow \mathbf{b} \in \ker(\mathbf{A}^\top)^\perp$$

である. なせならば $\mathbf{b} \in \ker(\mathbf{A}^\top)^\perp$ ならば

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{y} = \mathbf{0}_n \quad \text{かつ} \quad \langle \mathbf{y}, \mathbf{b} \rangle_{2,n} = 0$$

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. (C.26) より

$$\left[\text{Farkas (1) が起こる} \right] \Leftrightarrow \left[\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \text{ は解 } \mathbf{x}^* \text{ を持つ} \right]$$

なので $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}^*$ と書ける. よって $\forall \mathbf{y} \in \ker(\mathbf{A}^\top)$ に対して

$$\langle \mathbf{y}, \mathbf{b} \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x}^* \rangle_{2,n} = \langle \mathbf{A}^\top \mathbf{y}, \mathbf{x}^* \rangle_{2,n} = 0$$

から $\mathbf{b} \in \ker(\mathbf{A}^\top)^\perp$ がわかる.

以上の議論から

$$\begin{aligned} \text{「}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \text{ は解 } \mathbf{x}^* \text{ を持つ」} &\Leftrightarrow \text{「Farkas(1) が成立」} \\ &\Leftrightarrow \text{Farkas(2) が成立しない} \\ &\Leftrightarrow \mathbf{b} \in \ker(\mathbf{A}^\top)^\perp \end{aligned}$$

より定理は証明された. □

定理 C.24 の証明: まず, 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は凸であるための必要十分条件は $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して, 関数

$$\phi(t) := f(\mathbf{x} + t\mathbf{y}) \quad (t \in \mathbb{R}) \quad (\text{C.27})$$

が凸であることである.

まず, 関数 f は凸とし, 関数 ϕ は凸であることを示す. そのために, $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, 0 \leq c \leq 1, s, t \in \mathbb{R}$ を取り,

$$\mathbf{w} := \mathbf{x} + s\mathbf{y}, \quad \mathbf{z} := \mathbf{x} + t\mathbf{y}$$

とおく. このとき

$$f(c\mathbf{w} + (1-c)\mathbf{z}) \leq cf(\mathbf{w}) + (1-c)f(\mathbf{z}) = c\phi(s) + (1-c)\phi(t) \quad (\text{C.28})$$

となる. また

$$f(c\mathbf{w} + (1-c)\mathbf{z}) = f(\mathbf{x} + \{ct + (1-c)s\}\mathbf{y}) = \phi(ct + (1-c)s) \quad (\text{C.29})$$

となる. よって, (C.28) と (C.29) を考慮すると ϕ は凸関数であることがわかる.

逆を示す. $0 \leq c \leq 1, \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ とする. (C.27) において, $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ は任意だったので, $\mathbf{y}$ と $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ とする. すると

$$\phi(t) = f(\mathbf{y} + t(\mathbf{x} - \mathbf{y}))$$

とおく. 関数 ϕ は凸だから

$$\begin{aligned} f(c\mathbf{x} + (1-c)\mathbf{y}) &= f(\mathbf{y} + c(\mathbf{x} - \mathbf{y})) = \phi(c) \\ &= \phi((1-c) \times 0 + c \times 1) \\ &\leq (1-c)\phi(0) + c\phi(1) \\ &= (1-c)f(\mathbf{y}) + cf(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

となる. よって $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して関数

$$\mathbb{R} \ni t \mapsto \phi(t) = f(\mathbf{x} + t\mathbf{y})$$

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 $\phi(t) = f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{y})$ 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 $\dot{\phi}(t) = \frac{d\phi}{dt} = \langle \nabla f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{y}), \mathbf{y} \rangle_{2,n}$ である. ここで $s=1, t=0$ とおくと

$$\phi(0) + \dot{\phi}(0) \leq \phi(1) \Leftrightarrow f(\mathbf{x}_0) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_0), \mathbf{y} \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{y})$$

となる. 上式に $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ を代入すると

$$f(\mathbf{x}_0) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_0), \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{x})$$

を得る.

3. 凸関数 $\phi(t) = f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{y})$ は

$$\ddot{\phi}(t) \geq 0$$

をみたす. このとき

$$\dot{\phi}(t) = \langle \nabla f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{y}), \mathbf{y} \rangle_{2,n}, \quad \ddot{\phi}(t) = \mathbf{y}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}_0 + t\mathbf{y}) \mathbf{y}$$

となる. ただし $\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{i,j=1,2,\dots,n}$ である. $t=0$ とおくと

$$\mathbf{y}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}_0) \mathbf{y} \geq 0 \quad (\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n)$$

がわかる. □

定理 C.28 の証明: 明らかに $\partial f(\mathbf{x})$ は凸集合である. これが閉集合であることを示すために

$$\{\mathbf{r}_k\}_{k=1}^\infty \subset \partial f(\mathbf{x}) \quad \text{かつ} \quad \mathbf{r}_0 = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{r}_k$$

を取る. $\mathbf{r}_k \in \partial f(\mathbf{x})$ ($k=1, 2, \dots$) だから $\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{r}_k, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{y})$$

となる. $k \rightarrow \infty$ とすれば, $\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{r}_0, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{y})$$

となるから $\mathbf{r}_0 \in \partial f(\mathbf{x})$ となる. よって $\partial f(\mathbf{x})$ は閉集合となる. $\square$

定理 C.30 の証明: 凸関数 f のエピグラフ¹² E は凸閉集合なので正の整数 k に対して

$$\mathbf{e}_k := \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ f(\mathbf{x}) - \frac{1}{k} \end{bmatrix} \notin E$$

である. 分離定理 (定理 C.15) よりある超平面

$$\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + d_k \quad (\mathbf{a}_k \in \mathbb{R}^{n+1}, d_k \in \mathbb{R})$$

は $\mathbf{e}_k$ と E を厳密に分離する.

$$\mathbf{a}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_k \\ c_k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_k \in \mathbb{R}^n, \quad c_k \in \mathbb{R}$$

と書くと

$$\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{e}_k \rangle_{2,n} + d_k < 0, \tag{C.30}$$

$$\langle \mathbf{a}_k, \mathbf{z} \rangle_{2,n} + d_k > 0 \quad (\forall \mathbf{z} \in E) \tag{C.31}$$

となる. (C.30) は

$$\langle \mathbf{b}_k, \mathbf{x} \rangle_{2,n} + c_k \left(f(\mathbf{x}) - \frac{1}{k} \right) + d_k < 0 \tag{C.32}$$

となる. $\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ f(\mathbf{y}) \end{bmatrix} \in E$$

なので

$$\langle \mathbf{b}_k, \mathbf{y} \rangle_{2,n} + c_k f(\mathbf{y}) + d_k > 0 \tag{C.33}$$

となる. (C.32) を -1 倍して (C.33) に加わえると $\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$\langle \mathbf{b}_k, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} + c_k \left(f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) + \frac{1}{k} \right) > 0 \tag{C.34}$$

となる. (C.34) に $\mathbf{y} = \mathbf{x}$ を代入すると

$$\frac{c_k}{k} > 0 \quad \Rightarrow \quad c_k > 0$$

¹²epigraph の epi は「上の」という意味の接頭語.

となる. したがって (C.34) は $\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\mathbf{y}) + \frac{1}{k} \geq - \left\langle \frac{\mathbf{b}_k}{c_k}, \mathbf{y} - \mathbf{x} \right\rangle_{2,n} + f(\mathbf{x}) \quad (\text{C.35})$$

を意味する. ここで

$$\mathbf{r}_k = -\frac{1}{c_k} \mathbf{b}_k$$

とおく.

次に $\{\mathbf{r}_k\}_{k=1}^\infty \subset \mathbb{R}^n$ は有界であることを示す. $|\mathbf{r}_k|_{2,n} \neq 0$ ならば (C.35) において

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}_k}{|\mathbf{r}_k|_{2,n}}$$

とおく¹³ と

$$f\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}_k}{|\mathbf{r}_k|_{2,n}}\right) + \frac{1}{k} \geq |\mathbf{r}_k|_{2,n} + f(\mathbf{x})$$

となる. よって $k = 1, 2, \dots$ に対して

$$|\mathbf{r}_k|_{2,n} \leq 1 + \max_{|\mathbf{u}|_{2,n}=1} |f(\mathbf{x} + \mathbf{u})| + f(\mathbf{x}) =: M$$

となる. よって $\{\mathbf{r}_k\}_{k=1}^\infty$ は有界であることがわかる.

Bolzano-Weierstrass の定理より収束する部分列 $\{\mathbf{r}_{k(j)}\}_{j=1}^\infty$ が取れる.

$$\mathbf{r}_0 := \lim_{j \rightarrow \infty} \mathbf{r}_{k(j)}$$

とおく. (C.35) において $k = k_j \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \infty$ とすれば

$$f(\mathbf{y}) \geq \langle \mathbf{r}_0, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} + f(\mathbf{x}) \quad (\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n)$$

を得る. よって $\mathbf{r}_0 \in \partial f(\mathbf{x})$ がわかる. したがって $\partial f(\mathbf{x}) \neq \emptyset$ が示せた.

□

¹³定義から $|\mathbf{b}_k|^2 = c_k^2 |\mathbf{r}_k|^2$ である.

$$\left\langle \frac{\mathbf{b}_k}{c_k}, \frac{\mathbf{r}_k}{|\mathbf{r}_k|_{2,n}} \right\rangle_{2,n} = \left\langle \frac{\mathbf{b}_k}{c_k}, -\frac{\mathbf{b}_k}{c_k |\mathbf{r}_k|_{2,n}} \right\rangle_{2,n} = -\frac{|\mathbf{b}_k|_{2,n}^2}{c_k^2 |\mathbf{r}_k|_{2,n}} = -|\mathbf{r}_k|_{2,n}$$

になることに注意する.

定理 C.34 の証明: 任意の $\mathbf{y}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$, $0 \leq c \leq 1$ に対し

$$\begin{aligned}
f^\vee(c\mathbf{y} + (1-c)\mathbf{w}) &= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle c\mathbf{y} + (1-c)\mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \right) \\
&= \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left(c \{ \langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \} \right. \\
&\quad \left. + (1-c) \{ c \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \} \right) \\
&\leq c \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \right) \\
&\quad + (1-c) \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \right) \\
&= cf^\vee(\mathbf{y}) + (1-c)f^\vee(\mathbf{w})
\end{aligned}$$

がわかる. したがって 関数 $f^\vee$ は凸である.

(2). 任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y}) \geq \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n}$$

であった. ここで, $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ と $c > 0$ に対し

$$\mathbf{x} = \frac{c\mathbf{y}}{|\mathbf{y}|_{2,n}}$$

とおく. このとき

$$f^\vee(\mathbf{y}) \geq \left\langle \frac{c\mathbf{y}}{|\mathbf{y}|_{2,n}}, \mathbf{y} \right\rangle_{2,n} - f\left(\frac{c\mathbf{y}}{|\mathbf{y}|_{2,n}}\right) \geq c|\mathbf{y}|_{2,n} - \max_{|\mathbf{u}|_{2,n}=c} f(\mathbf{u}).$$

となることがわかる. したがって

$$\frac{f^\vee(\mathbf{y})}{|\mathbf{y}|_{2,n}} \geq c - \frac{1}{|\mathbf{y}|_{2,n}} \max_{|\mathbf{u}|_{2,n}=c} f(\mathbf{u})$$

となる. ここで

$$\liminf_{|\mathbf{y}|_{2,n} \rightarrow \infty} \frac{f^\vee(\mathbf{y})}{|\mathbf{y}|_{2,n}} \geq c > 0$$

を得る. 最後に $c \rightarrow \infty$ とすれば, (2) がわかる.

(3) まず, $f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y}) \geq \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n}$ から

$$f(\mathbf{x}) \geq \max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} - f^\vee(\mathbf{y}) \right) = (f^\vee)^\vee(\mathbf{x}) \quad (\text{C.36})$$

となる. よって

$$f(\mathbf{x}) \geq (f^\vee)^\vee(\mathbf{x})$$

がわかる.

次に, 上の不等号の逆向きを示す. f は凸関数なので, 定理 C.30 から $\partial f(\mathbf{x}) \neq \emptyset$ であることがわかる. よって, $\mathbf{r} \in \partial f(\mathbf{x})$ を取れる. すると $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(\mathbf{z}) \geq f(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{r}, \mathbf{z} - \mathbf{x} \rangle_{2,n}$$

となる. 上の式を書きかえると

$$\langle \mathbf{r}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \geq \langle \mathbf{r}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{z})$$

を得る. したがって

$$\langle \mathbf{r}, \mathbf{x} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle \mathbf{r}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{z}) \right) = f^\vee(\mathbf{r}) \quad (\text{C.37})$$

がわかる. さらに, (C.37) から

$$(f^\vee)^\vee(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} - f^\vee(\mathbf{y}) \right) \geq \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle_{2,n} - f^\vee(\mathbf{r}) = f(\mathbf{x}) \quad (\text{C.38})$$

がわかる. よって, (C.36) と (C.38) から $(f^\vee)^\vee = f$ がわかる. $\square$

定理 C.35 の証明: (1) $\Rightarrow$ (2) の証明. 任意の $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) = f^*(\mathbf{y}) \geq \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{z})$$

となる. 上の式の最左辺と最右辺から $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$f(\mathbf{z}) \geq \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} + f(\mathbf{x})$$

を得る. よって

$$\mathbf{y} \in \partial f(\mathbf{x})$$

が示せた.

(2) $\Rightarrow$ (1) の証明. $\mathbf{y} \in \partial f(\mathbf{x})$ のとき, $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$f(\mathbf{z}) \geq \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} - \mathbf{x} \rangle_{2,n} + f(\mathbf{x}) \Rightarrow \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \geq \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{z})$$

となる. よって

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{x}) \geq \max_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} \left(\langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle_{2,n} - f(\mathbf{z}) \right) = f^\vee(\mathbf{y}) \quad (\text{C.39})$$

から

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} \geq f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y})$$

を得る. Fenchel-Young の不等式 (C.5) から

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} \leq f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y}) \quad (\text{C.40})$$

である. よって, (C.39) と (C.40) を合わせると

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{2,n} = f(\mathbf{x}) + f^\vee(\mathbf{y})$$

が示せた.

(1) $\Leftrightarrow$ (3) も同様に示すことができる. $\square$

定理 C.37 の証明: ① $\varphi^\leftarrow(0) = 0$ の証明: $\varphi(0) = 0$ かつ $\varphi(t) > 0$ ($t > 0$) だから

$$\{y \geq 0; \varphi(y) \leq 0\} = \{0\}$$

となる. このことから $\varphi^\leftarrow(0) = 0$ がわかる.

② $\varphi^\leftarrow$ 単調性の証明: $x_1 < x_2$ とすると

$$\varphi(y) \leq x_1 \Rightarrow \varphi(y) \leq x_2$$

である. よって

$$\{y \in \mathbb{R}; \varphi(y) \leq x_1\} \subset \{y \in \mathbb{R}; \varphi(y) \leq x_2\}$$

となるので

$$\varphi^\leftarrow(x_1) = \sup\{y \in \mathbb{R}; \varphi(y) \leq x_1\} \leq \sup\{y \in \mathbb{R}; \varphi(y) \leq x_2\} = \varphi^\leftarrow(x_2)$$

がわかる.

③ $\varphi^\leftarrow(\infty) = \infty$ の証明: 背理法で証明するために, $\varphi^\leftarrow(\infty) < \infty$ と仮定する. 背理法の仮定から, $y \geq 0$ を

$$\varphi^\leftarrow(\infty) < y < \infty$$

をみたすように取れる. するとすべての $x \geq 0$ に対して

$$\varphi(x) \leq y$$

となる. ここで, $x \rightarrow \infty$ とすると

$$\varphi(\infty) \leq y$$

となり, $\varphi(\infty) = \infty$ と矛盾する. よって, $\varphi^\leftarrow(\infty) = \infty$ が示せた.

④ $\varphi^\leftarrow$ 右連続性の証明: これを示すために, $x \geq 0$ を固定し, $0 \leq x < x_n, x_n \downarrow x (n \rightarrow \infty)$ とする. $\varphi^\leftarrow$ は単調増加だから

$$\varphi^\leftarrow(x) \leq \varphi^\leftarrow(x_n) \downarrow \varphi^\leftarrow(x+0)$$

である. 仮に

$$\varphi^\leftarrow(x) < \varphi^\leftarrow(x+0) \quad (\text{C.41})$$

と仮定して矛盾を導こう. (C.41) から, ある $y \geq 0$ があって

$$\varphi^\leftarrow(x) < y < \varphi^\leftarrow(x+0) \quad (\text{C.42})$$

とできる. すると $\forall n \in \mathbb{N}$ に対して

$$y < \varphi^\leftarrow(x_n) = \sup\{y \geq 0; \varphi(y) \leq x_n\}$$

と φ の単調増加性から

$$\varphi(y) \leq x_n$$

が成り立つ. ここで, $n \rightarrow \infty$ とすると

$$\varphi(y) \leq x$$

を得る. よって

$$y \in \{s \geq 0; \varphi(s) \leq x\} \Rightarrow y \leq \sup\{s \geq 0; \varphi(s) \leq x\} = \varphi^\leftarrow(x)$$

から

$$y \leq \varphi^\leftarrow(x)$$

となる. これは (C.42) と矛盾する. よって, $\varphi^\leftarrow$ は右連続であることが示せた. $\square$

定理 C.38 の証明: $x \leq \varphi(\varphi^\leftarrow(x))$ を示す. $\varphi(\varphi^\leftarrow(0)) = 0$ なので, $x > 0$ に対して示せばよい.

$$\varphi^\leftarrow(x) = \inf\{y > 0; \varphi(y) > x\}$$

とも表現できることに注意する. これより

$$\forall y > \varphi^\leftarrow(x) \Rightarrow \varphi(y) \geq x$$

である. $y \downarrow \varphi^{\leftarrow}(x)$ とすると, φ の右連続性より

$$\varphi(\varphi^{\leftarrow}(y)) = \lim_{y \downarrow \varphi^{\leftarrow}(x)} \varphi(y) \geq x \quad (\text{C.43})$$

がわかる. また, (C.43) から, 直ちに

$$\varphi(\varphi^{\leftarrow}(x) - \epsilon) \leq x$$

がわかる. のこりの不等式も同様に示せばよい. □

定理 C.41 の証明: $y \geq 0$ に対して, (C.43) から

$$xy - \Phi(x) \leq \Phi^{\vee}(y)$$

がわかる. したがって

$$\sup_{x \geq 0} \{xy - \Phi(x)\} \leq \Phi^{\vee}(y)$$

を得る. $x = \varphi^{\leftarrow}(y)$ とおくと (C.9) から

$$xy = y\varphi^{\leftarrow}(y) = \Phi(\varphi^{\leftarrow}(y)) + \Phi^{\vee}(y)$$

となるので

$$\Phi^{\vee}(y) = \sup_{x \geq 0} \{xy - \Phi(x)\}$$

がわかる. □