

三重対角行列に対する共役点の分類¹

川崎英文, 九州大学大学院数理学研究院

KAWASAKI Hidefumi

Graduate School of Mathematics, Kyushu University ²

Abstract

共役点とは変分法における大域的概念であり, 二次の最適性条件において不可欠なものである. 変分問題では未知数は関数 $x(t)$ であるが, n 変数関数 $f(x)$ の最小化問題に対しても共役点理論を展開できることが [5][6] で明らかになった. そこでは, Jacobi 方程式と(狭義)共役点を定義し, それを用いて二次の最適性必要条件と十分条件が与えられた. 本論文の目的は, ある極値問題のクラスに対して共役点の分類を行うことである. それに加えて, 古典的な最短路問題の有限次元版である多くの例を与える.

Key Words

共役点, Jacobi 方程式, 三重対角行列, 最短路問題, Sylvester の判定法, 主小行列式

1 Introduction

共役点とは変分法の基本問題に対して最適性十分条件を与えるために Jacobi により導入された.

$$(SP) \quad \text{Minimize} \quad \int_0^T f(t, x(t), \dot{x}(t)) dt \quad \text{subject to} \quad x(0) = A, x(T) = B,$$

ただし, A, B は R^n の定点で, $T > 0$ は固定時間, f は滑らかな関数とする. 共役点は初期条件 $y(0) = 0$ の下での Jacobi 方程式の自明でない解 $y(t)$ の零点として定義される. Jacobi は, 許容解 $\bar{x}(t)$ が Euler 方程式と強 Legendre 条件を満たし, さらに $[0, T]$ に $t = 0$ の共役点が存在しなければ, $\bar{x}(t)$ は (SP) の弱極小解になることを示した, see [2].

一方, n 変数関数 $f(x)$ の極値問題

$$(P_0) \quad \text{Minimize} \quad f(x), \quad x \in R^n$$

に対する共役点理論が [6] で提唱され, (P_0) に対する Jacobi 方程式が Hesse 行列 $f''(\bar{x})$ の主小行列式が満たす差分方程式に他ならないことが明らかにされた. また, サイズが k の主小行列 $A_k := (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq k}$ の行列式を y_k で表すとき, $y_0 > 0, y_1 > 0, \dots, y_{k-1} > 0$ かつ $y_k \leq 0$ なる番号 $k \geq 1$ を 1 の共役点と定義する. この考察に差分方程式論を適用

¹This research is partially supported by the Grant-in Aid for General Scientific Research from the Japan Society for the Promotion of Science 14340037.

²Hakozaki 6-10-1, Fukuoka 812-8581, Japan (kawasaki@math.kyushu-u.ac.jp).

すると、共役点の分類という考えに到達する。本論文の目的は、目的関数が二変数関数の和

$$f(x) := \sum_{k=0}^n f_k(x_k, x_{k+1}). \quad (1)$$

で表されるような極値問題のクラスに対して、共役点の分類を行うことである。なお、[3][4]で、(1)を含む離散最適制御問題に対して2次の最適性条件が議論されているが、そこでは共役点の分類には手がつけられていないことを注意しておく。

まず第2節で、[6]の共役点理論を簡単に解説する。第3節では、本論文で取り扱う二つの極値問題のクラスを導入する。第4節では、目的関数(1)に対して、差分方程式論を用いて Hesse 行列の主小行列式を計算する。第5節では、第一のクラスに対する共役点の分類を行い、幾つかの例を与える。それらの例は古典的な最短路問題の有限次元版と見なせる。第6節では、もう一つのクラスの極値問題を取り扱う。それは古典的な可変初期点をもつ最短路問題に対応する。ここでも多くの例を与える。

2 準備

本節では、 (P_0) に対して [6] で提示された共役点理論を手短かに説明する。Sylvester の判定法によれば、 n 次対称行列 $A = (a_{ij})$ が正定値であるための必要十分条件は主小行列式 $|A_k|$ が全て正になることである、see e.g. [7].

次の補題は任意の行列式が主小行列式に関して展開できることを示す。

補題 2.1 ([6]) 任意の $n \times n$ 次行列 $A = (a_{ij})$ に対し

$$|A| = \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{\rho \in S(k+1, n)} \varepsilon(\rho) a_{k+1\rho(k+1)} a_{k+2\rho(k+2)} \cdots a_{n\rho(n)} |A_k| \quad (2)$$

ただし $|A_0| := 1$, $\varepsilon(\rho)$ は置換 ρ の符号を表し、 $S(k+1, n)$ は、いかなる $l > k$ に対しても $\{l+1, \dots, n\}$ 上で閉じていないような $\{k+1, \dots, n\}$ 上の置換全体を表す。

この補題を基に、Jacobi 方程式を次のように定義する。任意の n 次行列 $A = (a_{ij})$ に対して、 y_0, \dots, y_n に関する差分方程式

$$y_k = \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{\rho \in S(i+1, k)} \varepsilon(\rho) a_{i+1\rho(i+1)} a_{i+2\rho(i+2)} \cdots a_{k\rho(k)} y_i, \quad k = 1, \dots, n \quad (3)$$

を A に対する Jacobi 方程式と呼ぶ。また、初期条件 $y_0 > 0$ の下での Jacobi 方程式の解 $\{y_i\}$ が存在して $y_0 > 0, y_1 > 0, \dots, y_{k-1} > 0, y_k \leq 0$ が成立するとき、 k は 1 に共役であると言う、see [6].

定理 2.1 ([6]) 任意の n 次対称行列が正定値であるための必要十分条件は 1 の共役点が存在しないことである。また、 $f(x)$ の停留点 \bar{x} が (P_0) の極小解になるための十分条件は Hesse 行列 $f''(\bar{x})$ について、1 の共役点が存在しないことである。

3 三重対角行列に帰着される極値問題

本節では, Hesse 行列が三重対角行列になるような二つの極値問題のクラスを考察する. 最初のクラスは, 両端点が固定された折れ線最短路問題を一般化した極値問題である.

$$(P_1) \quad \text{Minimize } f(x) := \sum_{k=0}^n f_k(x_k, x_{k+1})$$

$$\text{subject to } x := (x_1, \dots, x_n) \in R^n,$$

ただし x_0, x_{n+1} は変数ではなく既知とする. このとき $f(x)$ の Hesse 行列 $f''(x)$ は

$$(k, k) \text{ 成分} = \frac{\partial^2 f_{k-1}(x_{k-1}, x_k)}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2 f_k(x_k, x_{k+1})}{\partial x_k^2}, \quad (4)$$

$$(k, k+1) \text{ 成分} = \frac{\partial^2 f_k(x_k, x_{k+1})}{\partial x_k \partial x_{k+1}}, \quad (5)$$

なる三重対角行列になる.

次に, 可変始点をもつ折れ線最短路問題は次のように一般化される.

$$(P_2) \quad \text{Minimize } f(x) := \sum_{k=0}^n f_k(x_k, x_{k+1})$$

$$\text{subject to } x := (x_0, x_1, \dots, x_n) \in R^{n+1},$$

ここでは, x_0 は変数で, x_{n+1} は既知とする. このときも, Hesse 行列は三重対角行列で, 第一対角成分だけが (P_1) と異なり, $\partial^2 f_0(x_0, x_1)/\partial x_0^2$ となる.

4 三重対角行列の主小行列式

三重対角行列

$$A := \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & b_{n-1} & \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \quad (6)$$

に対する Jacobi 方程式は二階差分方程式

$$y_k - a_k y_{k-1} + b_{k-1}^2 y_{k-2} = 0 \quad (7)$$

になるが, 特に係数 a_k, b_k が定数の場合は解を陽に表すことができ, それを用いて共役点の分類が可能になる. 以下において,

$$a := a_2 = \cdots = a_n, \quad b := b_1 = \cdots = b_{n-1}$$

なる場合を考察する. a_1 を特別扱いするのは, 始点が可変の場合に対応するためである. 最初に, 全く制限的でない二つの仮定を設けることにする.

(A1) $a_1 > 0, a > 0$. (強 Legendre 条件)

(A2) $|b| = 1$.

強 Legendre 条件が成立しなければ, 直ちに A は正定値でないことが分かる. もし $b = 0$ ならば, 強 Legendre 条件の仮定の下では, 自動的に正定値になる. また, 主小行列式の正負は, 全成分を正数 $|b|$ で割っても保たれるから, $|b| = 1$ としてかまわない. 従って, 次の二階差分方程式を解けばよいことになる.

$$y_k - ay_{k-1} + y_{k-2} = 0, \quad y_1 = a1, \quad y_2 = aa_1 - 1. \quad (8)$$

定理 4.1 差分方程式 (8) の解は, 特性方程式

$$y^2 - ay + 1 = 0 \quad (9)$$

の解 α, β を用いて次のように表される. (a) α, β が相異なる実数の場合,

$$y_k = a_1 \frac{\beta^k - \alpha^k}{\beta - \alpha} - \frac{\beta^{k-1} - \alpha^{k-1}}{\beta - \alpha}. \quad (10)$$

(b) $\alpha = \beta$ の場合,

$$y_k = 1 + (a_1 - 1)k. \quad (11)$$

(c) α, β が虚数の場合, $\alpha = e^{i\theta}$ ($0 < \theta < \pi$) と表すと,

$$y_k = \frac{a_1 \sin k\theta - \sin(k-1)\theta}{\sin \theta}. \quad (12)$$

5 三重対角行列の共役点の分類 : $a_1 = a$ の場合

定理 5.1 (共役点の分類 1) 特性方程式 (9) の解を α, β とするとき, (a) α, β が実数ならば, 共役点は存在しない. (b) $\alpha = e^{i\theta}$ ($0 < \theta < \pi$) のとき, $(k+1)\theta > \pi$ なる最初の番号 k が n 以下ならば, それは第一共役点である.

例 5.1 単位球面の赤道上の 2 点 $A = (1, 0, 0)$ と $B = (\cos T, \sin T, 0)$ を結ぶ折れ線最短路を考察しよう. ただし, 節点 X_1, \dots, X_n は, A, B の間に等間隔に並ぶ n 本の経線 l_1, \dots, l_n 上にとるものとする. 経線を $l_k := \{(\sin \theta \cos k\Delta t, \sin \theta \sin k\Delta t, \cos \theta) : 0 < \theta < \pi\}$ と表すと, ただし $\Delta t := T/(n+1)$, 節点は $0 < \theta_k < \pi$ を用いて $X_k = (\sin \theta_k \cos k\Delta t, \sin \theta_k \sin k\Delta t, \cos \theta_k)$ と表されるから, 折れ線の長さは n 変数関数 $f(\theta_1, \dots, \theta_n)$ として表される. そこで, 赤道と経線 l_k の交点を \bar{X}_k で表すと, 折れ線 $A\bar{X}_1 \cdots \bar{X}_n B$ に対応する θ は $\bar{\theta} := (\pi/2, \dots, \pi/2)$ であり, $\bar{\theta}$ が $f(\theta)$ の停留点であることが容易に分かる. また, $f(x)$ の Hesse 行列は

$$f'' \left(\frac{\pi}{2}, \dots, \frac{\pi}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \begin{pmatrix} 2c & -1 & & & \\ -1 & 2c & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2c \end{pmatrix}$$

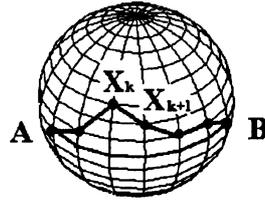


Figure 1: Sphere: fixed endpoint

となる. ただし $c := \cos \Delta t$. Δt が π に等しくない限り $c^2 - 1 < 0$ であるから, 特性方程式は虚数解 $e^{\pm i\Delta t}$ をもち, 定理 5.1 から次の結論を得る. (a) $T < \pi$ のとき, 1 の共役点は存在しない. (b) $T \geq \pi$ のとき, $(k+1)T/(n+1) \geq \pi$ なる最初の番号 k は 1 に共役である. これは古典的な結果に合致する.

例 5.2 円柱面 $x^2 + y^2 = 1$ 上の 2 点 $A = (1, 0, 0)$, $B = (\cos T, \sin T, \gamma)$ を結ぶ折れ線最短路を考察しよう. ただし, $\Delta t := T/(n+1)$ として, 節点 X_1, \dots, X_n は, A, B の間に等間隔に並ぶ n 本の経線 $l_k := \{(\cos k\Delta t, \sin k\Delta t, z) : z \in R\}$ 上にとるものとする. 節点は, $z_k \in R$ を用いて $X_k = (\cos k\Delta t, \sin k\Delta t, z_k)$ と表されるから, 折

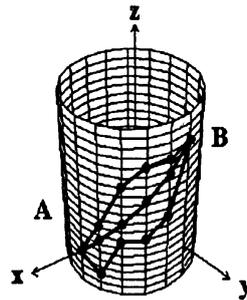


Figure 2: Cylinder: fixed endpoint

れ線 $AX_1 \dots X_n B$ の長さは n 変数関数 $f(z_1, \dots, z_n)$ として表される. そこで, 螺旋 $z(t) = t\gamma/T$ と経線 l_k の交点を \bar{X}_k で表すと, 折れ線 $A\bar{X}_1 \dots \bar{X}_n B$ に対応する $z \in R^n$ は $\bar{z} := (\gamma/(n+1), \dots, n\gamma/(n+1))$ であり, \bar{z} が $f(z)$ の停留点であることは容易に分かる. また, f の Hesse 行列は

$$f''(\bar{z}) = (2 - 2c)(2 - 2c + d)^{-3/2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (13)$$

となる. ただし $c := \cos \Delta t$, $d := \gamma^2/(n+1)^2$. 特性多項式は重解をもつので, 定理 5.1 により, 共役点は存在しない. これは古典的な結果に合致する

例 5.3 一葉双曲面 $x^2 + y^2 - z^2 = 1$ 上の 2 点 $A = (1, 0, 0)$ と $B = (\cos T, \sin T, 0)$ を結ぶ折れ線最短路を考察しよう. ただし, $\Delta t := T/(n+1)$ として, 節点 X_k は曲線 $l_k := \{(\cosh s \cos k\Delta t, \cosh s \sin k\Delta t, \sinh s); s \in R\}$ 上にとる. 節点は $s_k \in R$ を用い

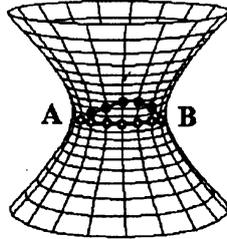


Figure 3: Hyperboloid with one sheet: fixed endpoint

て $X_k = (\cosh s_k \cos k\Delta t, \cosh s_k \sin k\Delta t, \sinh s_k)$ と表されるから, 折れ線 $AX_1 \dots X_n B$ の長さは n 変数関数 $f(s_1, \dots, s_n)$ として表される. そこで, xy 平面と曲線 l_k の交点を \bar{X}_k で表すと, この折れ線に対応する $s \in R^n$ は $\bar{s} := (0, \dots, 0)$ であり, \bar{s} が $f(s)$ の停留点になることは容易に分かる. また, $f(x)$ の Hesse 行列は

$$f''(0, \dots, 0) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \begin{pmatrix} 4-2c & -1 & & & \\ -1 & 4-2c & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 4-2c \end{pmatrix}$$

となる. ただし, $c := \cos \Delta t$. 従って, 特性方程式の解は $2-c \pm \sqrt{(1-c)(3-c)}$ なる相異なる 2 実数となり, 定理 5.1 により, 共役点は存在しない.

6 三重対角行列の共役点の分類: a_1 が一般の場合

本節では, a_1 が一般の場合に共役点を分類し, 可変始点最短路問題を題材に, 様々な例を与える.

定理 5.1 によれば, 第一対角成分 a_1 が a に等しい場合は, 特性方程式が実数解をもてば, 共役点は存在しなかった. 一方, 定理 4.1 によれば, 特性方程式が実数解をもつ場合でも, a_1 の値によっては, 共役点が存在する可能性がある.

定理 6.1 (共役点の分類 2) 特性方程式 (9) の解を α, β とする. (a) $\alpha < \beta$ が実数の場合, 共役点が存在するための必要十分条件は $a_1 < \alpha$ である. (b) $\alpha = e^{i\theta}$ ($0 < \theta < \pi$)

の場合, k が第一共役点であるための必要十分条件は k が $a_1 \sin k\theta \leq \sin(k-1)\theta$ を満たす最初の番号であることである.

例 6.1 単位球面上の点 $B = (\cos T, \sin T, 0)$ と経線 $l_0 := \{(\sin \theta, 0, \cos \theta) : 0 < \theta < \pi\}$ を結ぶ折れ線最短路を考察する. ただし, 節点 X_1, \dots, X_n は l_0, B の間に等間隔に並ぶ n 本の経線 l_1, \dots, l_n 上にとるものとする. 例 5.1 と同様に, X_k を球面曲座標表示

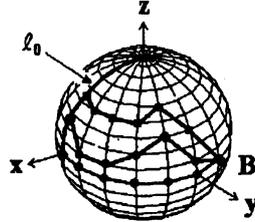


Figure 4: Sphere: variable initial point

しておくと, 折れ線の長さは $n+1$ 変数関数 $f(\theta_0, \dots, \theta_n)$ として表される. 赤道と経線 l_k の交点を \bar{X}_k で表すと, この折れ線に対応する θ は $\bar{\theta} := (\pi/2, \dots, \pi/2)$ であり,

$$f''\left(\frac{\pi}{2}, \dots, \frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \left(\begin{array}{cccc} c & -1 & & \\ -1 & 2c & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & -1 \\ & & -1 & 2c \end{array} \right) \Bigg\}^{n+1}$$

となる. ただし, $c := \cos \Delta t$. 定理 4.1 (c) により, サイズが k の主小行列式は $y_k = \cos k \Delta t$ となり, 次の結論を得る. (a) $T < \pi/2$ のとき, 1 の共役点は存在しない. (b) $T \geq \pi/2$ のとき, $k/(n+1) \geq \pi/2T$ なる最初の番号 k が第一共役点である. これは古典的な結果に合致する.

例 5.2 で, 円柱面上の折れ線最短路問題を考察し, 特性方程式が重解をもつことから, 共役点が存在しないことを示した. ところが, 円柱面であっても, 始点が可変ならば, 共役点をもつことがある.

例 6.2 円柱面 $x^2 + y^2 = 1$ 上の点 $B = (\cos T, \sin T, 0)$ と曲線 $l_0 := \{(\sqrt{1-z_0^2}, 0, z_0); -1 < z_0 < 1\}$ を結ぶ折れ線最短路を考察しよう. ただし, $\Delta t := T/(n+1)$ として, 節点 X_k ($k = 1, \dots, n$) は $l_k := \{(\cos k \Delta t, \sin k \Delta t, z) : z \in R\}$ 上にとるものとする. 例 5.2 と同様に X_k を表示しておくと, 折れ線の長さは $n+1$ 変数関数 $f(z_0, z_1, \dots, z_n)$ になる. 次に, xy 平面と l_k の交点を \bar{X}_k で表すと, 折れ線 $\bar{X}_0 \bar{X}_1 \dots \bar{X}_n B$ に対応する $z \in R^{n+1}$

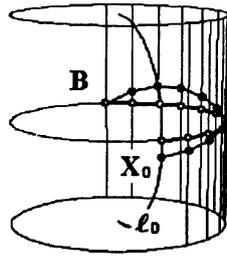


Figure 5: Cylinder: variable initial point

は $\bar{z} := (0, \dots, 0)$ である。また,

$$f''(\bar{z}) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \begin{pmatrix} c & -1 & & & \\ -1 & 2 & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

となる。ただし, $c := \cos \Delta t$. このとき, 特性多項式は重解をもつので, 定理 4.1 (b) から $y_k = 1 + (\cos \Delta t - 1)k$ が得られる。故に, 折れ線が円柱面を何周も回ることを許せば, 十分大きな k は共役点になる。

例 5.3 では, 一葉双曲面上の折れ線最短路問題を考察し, 特性方程式の解が異なる実数であることから, 共役点が存在しないことを示した。この曲面についても, 始点をうまく動かすと, 共役点をもつことが示される。

例 6.3 一葉双曲面 $x^2 + y^2 - z^2 = 1$ 上の点 $B = (\cos T, \sin T, 0)$ と初期曲線

$$l_0 := \left\{ \left(\sqrt{1 - \frac{s_0^2}{\gamma^2}}, 0, s_0 \right); -1 < s_0 < 1 \right\} \quad (15)$$

を結ぶ折れ線最短路を考察する。ただし, $\Delta t := T/(n+1)$ として, 節点 X_k ($k = 1, \dots, n$) は経線 l_k 上にとるものとする。例 5.3 と同様に X_k を表示すると, 折れ線の長さは $n+1$ 変数関数 $f(s_0, \dots, s_n)$ になる。 xy 平面と l_k の交点を \bar{X}_k で表すと, 折れ線 $\bar{X}_0 \bar{X}_1 \dots \bar{X}_n B$ に対応する $s \in R^{n+1}$ は $\bar{s} := (0, \dots, 0)$ であり,

$$f''(0, \dots, 0) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \begin{pmatrix} (c + \gamma^2 - 1)/\gamma^2 & -1 & & & \\ -1 & 4 - 2c & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & -1 & \\ & & & -1 & 4 - 2c \end{pmatrix}$$

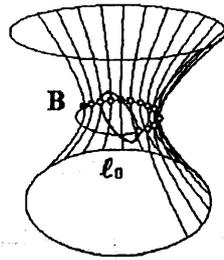


Figure 6: Hyperboloid with one sheet: variable initial point

となる. ただし, $c := \cos \Delta t$. 従って, 例 5.3 と同じく, 特性方程式は 2 つの相異なる実数解 $\alpha < \beta$ をもつ. よって, 定理 6.1 により, 共役点が存在するための必要十分条件は $a_1 < \alpha$, 即ち, $c < 1 - 2\gamma^4 / (2\gamma^2 + 1)$ である. $\Delta t > 0$ が小さくても, γ^2 を十分小さく選んでおけばこの不等式は満たされ, その結果, 共役点が存在する.

円柱面上の折れ線最短路問題 2 では, 始点 X_0 を円柱面の経線ではなくリング上にとった. 次の例では, ある意味でそれより自然な変形を考える. それは, 始点 X_0 を円柱面の経線に沿って動かす可変始点問題である.

例 6.4 設定は例 6.2 と殆ど同じであるが, 始点は $l_0 := \{(1, 0, z) : z \in R\}$ 上を動くものとする. このとき, 折れ線の長さ $f(z_0, \dots, z_n)$ の Hesse 行列は

$$f''(\bar{z}) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (16)$$

となる. 特性多項式は重解をもち, 定理 4.1 (b) により, $y_k \equiv 1$ となるから, 共役点はない.

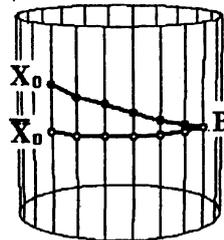


Figure 7: Cylinder: variable initial point

References

- [1] S. Goldberg (1958). *Introduction to difference equations*. John Wiley & Sons, New York.
- [2] I. M. Gelfand and S. V. Fomin (1963). *Calculus of variations*. Prentice Hall.
- [3] R. Hilscher and V. Zeidan (2002). Second order sufficient criteria for a discrete optimal control problem. *J. Differ. Equations Appl.*, **8**, 573–602.
- [4] R. Hilscher and V. Zeidan (2002). Discrete optimal control: second order optimality conditions. *J. Differ. Equations Appl.*, **8**, 875–896.
- [5] H. Kawasaki (2000). Conjugate points for a nonlinear programming problem with constraints, *J. Nonlinear Convex Anal.*, **1**, 287–293.
- [6] H. Kawasaki (2001). A conjugate points theory for a nonlinear programming problem, *SIAM J. Control Optim.*, **40**, 54–63.
- [7] G. Strang (1976). *Linear Algebra and its Applications*. Academic Press, New York, 1976.