

2変数2次関数について

情報工学科 篠埜 功

注意 この資料は講義の範囲外です。2変数2次関数の分類に興味がある人のみ読んでください。2行2列の行列の固有値、固有ベクトル、直交行列による対角化について知っていることが前提です。

1 第1回練習問題1の J の分類

練習問題1の近さの尺度の関数

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (ax_i + b - y_i)^2$$

は、以下のような a, b に関する2変数2次関数だった(第1回練習問題解答2参照)。

$$J = \frac{1}{2} \{5a^2 + 3b^2 + 6ab + 8a + 2b + 5\}$$

授業中に触れたように、2変数2次関数は楕円型、放物型、双曲型の3種類に分類される(教科書 pp. 191-192 参照)。この資料では、上記関数 J が楕円型であることを示す。 J から $\frac{1}{2}$ を除いた部分を $f(a, b)$ とおく。

$$f(a, b) = 5a^2 + 3b^2 + 6ab + 8a + 2b + 5$$

この中の $5a^2 + 3b^2 + 6ab$ の部分(このような式を2次形式という)は、

$$\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

のように行列を使った形で表すことができる(教科書 p.166 式(5.76)参照)。また、 $8a + 2b$ は、

$$\begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

のように行ベクトル、列ベクトルを使って表すことができる。従って、 $f(a, b)$ は以下のように表すことができる。

$$f(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 5$$

上記の式中の行列 $\begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}$ を A とおく。行列 A は対称行列になるように選んである。 a, b の2次の項 (a^2, b^2, ab の項) は必ず対称行列を使って上記のように表すことができる。上記の式を A を使って書くと

$$f(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 5$$

となる。

次に行列 A を直交行列で対角化する。そのために

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

を満たす x, y, λ を求める。ただし、 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 以外のものを求める。この式は単位行列を I と書くと

$$(\lambda I - A) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と書き表される。

$$|\lambda I - A| = 0$$

より

$$(\lambda - 5)(\lambda - 3) - 9 = 0$$

となり、これを解くと

$$\lambda = 4 \pm \sqrt{10}$$

となる。 $\lambda = 4 + \sqrt{10}$ のとき

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 + \sqrt{10} \end{pmatrix}$$

が一つの解として得られ、これを正規化する(長さを1にする)と

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{20 - 2\sqrt{10}}} \begin{pmatrix} 3 \\ -1 + \sqrt{10} \end{pmatrix}$$

が得られる。 $\lambda = 4 - \sqrt{10}$ のとき

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 - \sqrt{10} \end{pmatrix}$$

が一つの解として得られ、これを正規化すると

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{20 + 2\sqrt{10}}} \begin{pmatrix} 3 \\ -1 - \sqrt{10} \end{pmatrix}$$

が得られる。上記2つの単位ベクトルから以下のように行列を作る。

$$U = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}} & \frac{3}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}} \\ \frac{-1+\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}} & \frac{-1-\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}} \end{pmatrix}$$

この行列 U は直交行列になっている。この行列 U を用いると

$$A = U \begin{pmatrix} 4 + \sqrt{10} & 0 \\ 0 & 4 - \sqrt{10} \end{pmatrix} U^T$$

が成立する (U の転置行列を U^T と書いている)。 $\lambda_1 = 4 + \sqrt{10}$, $\lambda_2 = 4 - \sqrt{10}$ とおくと、

$$A = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} U^T$$

と表される。また、

$$U^T A U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

も成立する。

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = U^T \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

とおくと、 U が直交行列であることにより

$$U \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

が成立する。以上より $5a^2 + 3b^2 + 6ab$ の部分は

$$\begin{aligned} 5a^2 + 3b^2 + 6ab &= \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= \left(\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, A \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right) \quad (\text{内積で表記}) \\ &= \left(U \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}, AU \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} \right) \\ &= \left(\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}, U^T A U \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} \right) \quad (\text{教科書 (5.87) 式より}) \\ &= \left(\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} \right) \\ &= \left(\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \lambda_1 a' \\ \lambda_2 b' \end{pmatrix} \right) \\ &= \lambda_1 a'^2 + \lambda_2 b'^2 \end{aligned}$$

と変形できる。($\lambda_1 a'^2 + \lambda_2 b'^2$ を 2 次形式 $5a^2 + 3b^2 + 6ab$ の標準形という。)

$8a + 2b$ の部分は、

$$\begin{aligned}
 8a + 2b &= \begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}} & \frac{3}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}} \\ \frac{-1+\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}} & \frac{-1-\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 8 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}}a' + \frac{3}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}}b' \\ \frac{-1+\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}}a' + \frac{-1-\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}}b' \end{pmatrix} \\
 &= \frac{24}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}}a' + \frac{24}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}}b' + \frac{-2+2\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}}a' + \frac{-2-2\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}}b' \\
 &= \frac{22+2\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}}a' + \frac{22-2\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}}b'
 \end{aligned}$$

以上より、

$$f(a, b) = \lambda_1 a'^2 + \lambda_2 b'^2 + \frac{22+2\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}}a' + \frac{22-2\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}}b' + 5$$

となる。 a' と b' それぞれについて平方完成すると

$$f(a, b) = \lambda_1 \left(a' + \frac{11+\sqrt{10}}{\lambda_1 \sqrt{20-2\sqrt{10}}} \right)^2 + \lambda_2 \left(b' + \frac{11-\sqrt{10}}{\lambda_2 \sqrt{20+2\sqrt{10}}} \right)^2 + \frac{1}{6}$$

が得られる。 $J = \frac{1}{2}f(a, b)$ より

$$J = \frac{\lambda_1}{2} \left(a' + \frac{11+\sqrt{10}}{\lambda_1 \sqrt{20-2\sqrt{10}}} \right)^2 + \frac{\lambda_2}{2} \left(b' + \frac{11-\sqrt{10}}{\lambda_2 \sqrt{20+2\sqrt{10}}} \right)^2 + \frac{1}{12}$$

となる。 $\lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0$ より $\frac{\lambda_1}{2} > 0, \frac{\lambda_2}{2} > 0$ であり、 J は楕円型である。よって

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{11+\sqrt{10}}{\lambda_1 \sqrt{20-2\sqrt{10}}} \\ -\frac{11-\sqrt{10}}{\lambda_2 \sqrt{20+2\sqrt{10}}} \end{pmatrix}$$

のとき、 J は最小値 $\frac{1}{12}$ をとる。 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}$ より、

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}} & \frac{3}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}} \\ \frac{-1+\sqrt{10}}{\sqrt{20-2\sqrt{10}}} & \frac{-1-\sqrt{10}}{\sqrt{20+2\sqrt{10}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{11+\sqrt{10}}{\lambda_1 \sqrt{20-2\sqrt{10}}} \\ -\frac{11-\sqrt{10}}{\lambda_2 \sqrt{20+2\sqrt{10}}} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} \\ \frac{7}{6} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

となる。つまり $a = -\frac{3}{2}$, $b = \frac{7}{6}$ のとき J は最小値 $\frac{1}{12}$ をとる。

補足 結局関数 J は、

$$\frac{\lambda_1}{2}a^2 + \frac{\lambda_2}{2}b^2$$

という楕円型の2変数2次関数を行列 U^T で1次変換(行列 U^T は直交行列なので回転)し、 a 軸方向に $-\frac{3}{2}$ 、 b 軸方向に $\frac{7}{6}$ 、 J 軸方向に $\frac{1}{12}$ 並行移動して得られる関数である。

2 一般の2変数2次関数の分類

ここでは、2変数2次関数の一般形

$$f(x, y) = ax^2 + by^2 + cxy + dx + ey + f$$

の分類を行う。この中の $ax^2 + by^2 + cxy$ の部分(このような式を2次形式という)は、

$$\begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & \frac{1}{2}c \\ \frac{1}{2}c & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

のように行列を使った形で表すことができる(教科書 p.166 式(5.76)参照)。また、 $dx + ey$ は、

$$\begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

のように行ベクトル、列ベクトルを使って表すことができる。従って、 $f(x, y)$ は以下のように表すことができる。

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & \frac{1}{2}c \\ \frac{1}{2}c & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + f$$

上記の式中の行列 $\begin{pmatrix} a & \frac{1}{2}c \\ \frac{1}{2}c & b \end{pmatrix}$ を A とおく。行列 A は対称行列になるように選んである。 x, y の2次の項(x^2, y^2, xy の項)は必ず対称行列を使って上記のように表すことができる。上記の式を A を使って書くと

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + f$$

となる。

次に行列 A を直交行列で対角化する。そのために

$$A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

を満たす x, y, λ を求める。ただし、 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 以外のものを求める。この式は単位行列を I と書くと

$$(\lambda I - A) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と書き表される。

$$|\lambda I - A| = 0$$

より

$$(\lambda - a)(\lambda - b) - \frac{1}{4}c^2 = 0$$

となり、これを解くと

$$\lambda = \frac{a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + c^2}}{2}$$

となる。

$$\lambda_1 = \frac{a + b + \sqrt{(a - b)^2 + c^2}}{2}$$
$$\lambda_2 = \frac{a + b - \sqrt{(a - b)^2 + c^2}}{2}$$

とおく。 λ_1 については

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}c \\ \lambda_1 - a \end{pmatrix}$$

が1つの解である。これを正規化すると

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}c \\ \lambda_1 - a \end{pmatrix}$$

が得られる。 λ_2 については

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}c \\ \lambda_2 - a \end{pmatrix}$$

が1つの解である。これを正規化すると

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}c \\ \lambda_2 - a \end{pmatrix}$$

が得られる。上記2つの単位ベクトルから以下のように行列を作る。

$$U = \begin{pmatrix} \frac{\frac{1}{2}c}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}} & \frac{\frac{1}{2}c}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}} \\ \frac{\lambda_1 - a}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}} & \frac{\lambda_2 - a}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}} \end{pmatrix}$$

この行列 U は直交行列になっている。この行列 U を用いると

$$A = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} U^T$$

が成立する (U の転置行列を U^T と書いている)。また、

$$U^T A U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

も成立する。

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = U^T \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

とおくと、 U が直交行列であることにより

$$U \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

が成立する。以上より $ax^2 + by^2 + cxy$ の部分は

$$\begin{aligned} ax^2 + by^2 + cxy &= \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \\ &= \left(\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right) \quad (\text{内積で表記}) \\ &= \left(U \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, AU \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right) \\ &= \left(\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, U^T A U \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right) \quad (\text{教科書 (5.87) 式より}) \\ &= \left(\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right) \\ &= \left(\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \lambda_1 x' \\ \lambda_2 y' \end{pmatrix} \right) \\ &= \lambda_1 x'^2 + \lambda_2 y'^2 \end{aligned}$$

と変形できる。 ($\lambda_1 x'^2 + \lambda_2 y'^2$ を 2 次形式 $ax^2 + by^2 + cxy$ の標準形という。)

$dx + ey$ の部分は、

$$\begin{aligned} dx + ey &= \begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\frac{1}{2}c}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}} & \frac{\frac{1}{2}c}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}} \\ \frac{\lambda_1 - a}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}} & \frac{\lambda_2 - a}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} d & e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\frac{1}{2}c}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}}x' + \frac{\frac{1}{2}c}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}}y' \\ \frac{\lambda_1 - a}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}}x' + \frac{\lambda_2 - a}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}}y' \end{pmatrix} \\
&= \frac{\frac{1}{2}cd}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}}x' + \frac{\frac{1}{2}cd}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}}y' \\
&\quad + \frac{e(\lambda_1 - a)}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}}x' + \frac{e(\lambda_2 - a)}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}}y' \\
&= \frac{\frac{1}{2}cd + e(\lambda_1 - a)}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}}x' + \frac{\frac{1}{2}cd + e(\lambda_2 - a)}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}}y'
\end{aligned}$$

以上より、

$$f(x, y) = \lambda_1 x'^2 + \lambda_2 y'^2 + \frac{\frac{1}{2}cd + e(\lambda_1 - a)}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}}x' + \frac{\frac{1}{2}cd + e(\lambda_2 - a)}{\sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}}y' + f$$

となる。 x' と y' それぞれについて平方完成すると

$$\begin{aligned}
&f(x, y) \\
&= \lambda_1 \left(x' + \frac{\frac{1}{2}cd + e(\lambda_1 - a)}{2\lambda_1 \sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2}} \right)^2 + \lambda_2 \left(y' + \frac{\frac{1}{2}cd + e(\lambda_2 - a)}{2\lambda_2 \sqrt{\frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2}} \right)^2 \\
&\quad - \frac{\left\{ \frac{1}{2}cd + e(\lambda_1 - a) \right\}^2}{4\lambda_1 \left\{ \frac{1}{4}c^2 + (\lambda_1 - a)^2 \right\}} - \frac{\left\{ \frac{1}{2}cd + e(\lambda_2 - a) \right\}^2}{4\lambda_2 \left\{ \frac{1}{4}c^2 + (\lambda_2 - a)^2 \right\}} + f
\end{aligned}$$

が得られる。

$f(x, y)$ は、 $\lambda_1 > 0$ かつ $\lambda_2 > 0$ 、あるいは $\lambda_1 < 0$ かつ $\lambda_2 < 0$ のとき楕円型、 $\lambda_1 \neq 0$ かつ $\lambda_2 = 0$ 、あるいは $\lambda_1 = 0$ かつ $\lambda_2 \neq 0$ のとき放物型、 $\lambda_1 > 0$ かつ $\lambda_2 < 0$ 、あるいは $\lambda_1 < 0$ かつ $\lambda_2 > 0$ のとき双曲型である。一般には、 λ_1, λ_2 の符号は、それぞれ、正、負、0のいずれもあり得るが、次の節で、直線による近似の問題における $J(a, b)$ では、 $\lambda_1 > 0$ かつ $\lambda_2 > 0$ 、あるいは、特殊な状況において $\lambda_1 > 0$ かつ $\lambda_2 = 0$ であることを示す。つまり、通常楕円型、特殊な状況において放物型であり、双曲型にはならないことを示す。

3 直線での近似における J について

ここでは、直線による近似の問題において、 λ_1, λ_2 の符号を確認する。直線による近似の問題では、直線 $f(x) = ax + b$ と測定データ $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ の近さの尺度は

$$J(a, b) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \{f(x_i) - y_i\}^2$$

であった。これを展開して整理すると

$$J(a, b) = \frac{1}{2}a^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{2}b^2 N + ab \sum_{i=1}^N x_i - a \sum_{i=1}^N x_i y_i - b \sum_{i=1}^N y_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N y_i^2$$

となる。よって、前節の議論における λ は、

$$\lambda = \frac{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{2}N \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{2}N\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2}}{2}$$

である。 λ_1, λ_2 を

$$\lambda_1 = \frac{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{2}N + \sqrt{\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{2}N\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2}}{2}$$

$$\lambda_2 = \frac{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{2}N - \sqrt{\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{2}N\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2}}{2}$$

とおく。まず、 $\lambda_1 > 0$ である。 ($N \geq 1$ は大前提とする。つまり測定データは少なくとも1つはあるとする。) 以下で、 λ_2 の符号を確認するために以下の式の符号を確認する。

$$\left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{2}N \right\}^2 - \left\{ \sqrt{\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{2}N\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2} \right\}^2$$

(この式と λ_2 の符号は同じである。) この式を変形すると、

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{1}{2}N \right\}^2 - \left\{ \sqrt{\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{1}{2}N\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2} \right\}^2 \\ &= \frac{1}{4} \left\{ \sum_{i=1}^N x_i^2 \right\}^2 + \frac{1}{4}N^2 + \frac{1}{2}N \sum_{i=1}^N x_i^2 \\ & \quad - \left\{ \frac{1}{4} \left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right)^2 + \frac{1}{4}N^2 - \frac{1}{2}N \sum_{i=1}^N x_i^2 + \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2 \right\} \\ &= N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left\{ \sum_{i=1}^N x_i \right\}^2 \end{aligned}$$

となる。この式は、 $N = 1$ のときは0である。 $N \geq 2$ のときは

$$\sum_{i < j} (x_i - x_j)^2$$

と等しい。 $\sum_{i < j}$ は、 i が j より小さい、すべての i, j の組み合わせについて足し合わせることを表すものとする。よって、

$$x_1 = \dots = x_N$$

のとき（つまりすべての測定データの x 座標の値が等しいとき）0、それ以外のとき正である。すべての測定データの x 座標の値が等しくなるようなことは実際の実験ではまず起こらない。よって、通常の実験の場合、 λ_1, λ_2 とともに正であり、 $J(a, b)$ は楕円型である。（つまり $J(a, b)$ が最小値をとる (a, b) は一点に定まる。）すべての測定データの x 座標の値が等しいときは、 $\lambda_1 > 0, \lambda_2 = 0$ となり、 $J(a, b)$ は放物型である。（つまり $J(a, b)$ が最小値をとる (a, b) は一つには定まらず、無限に存在する。）