4.3. 第2変分

局所最適性を判定するために、第2変分を考える.

関数 $x^*(t)$ が (4.1) の汎関数 $J[x]$ を停留させている, i.e., $\delta J[x^*, \delta x] = 0$ をみたすとする.

⇝ Th 4.1 の十分条件より,

$\exists \gamma > 0$ s.t. $\delta^2 J[x^*, \delta x] \geq \gamma \|\delta x\|^2_{c^1}$ for $\forall \delta x$

$\Rightarrow$ $x^*(t)$ は $J[x]$ を局所最適にする孤立局所最適解.

(4.1) の第2変分は, 被積分関数の Taylor 展開の2次の項より,

$$\delta^2 J[x^*, \delta x] = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_f} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \\ \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix} dt$$

となる,

被積分項が $L$ のヘッセ行列の2次形式より,

$L$ のヘッセ行列が正定

$\Rightarrow$ 任意の許容変分 $\delta x$ に対して $\delta^2 J[x^*, \delta x] > 0$

さらに, $\exists \gamma > 0$ s.t. $\delta^2 J[x^*, \delta x] \geq \gamma \|\delta x\|^2_{c^1}$ for $\forall \delta x$ (*)

より, 局所最適性もいえる. ((*) の証明は略)

$\delta \dot{x}$ と $\delta x$ は無関係ではないので, $L$ のヘッセ行列が正定でなくとも局所最適性がいえる場合がある.

以下, 境界条件として $x(t_0)$ と $x(t_f)$ が固定されている固定端点問題を考える.

$\therefore$ $\delta x(t_0) = \delta x(t_f) = 0$

これが後で効いてる

⇝ 任意の微分可能な $n \times n$ 対称行列値関数 $S(t)$ に対して

$$\int_{t_0}^{t_f} \frac{d}{dt}\left(\delta x^T(t)\, S(t)\, \delta x(t)\right) dt = \left[\delta x^T(t)\, S(t)\, \delta x(t)\right]_{t_0}^{t_f} = 0$$

が成り立つ.

ここで, 左辺の被積分項を微分すると,

$$\frac{d}{dt}\left(\delta x^T(t)\, S(t)\, \delta x(t)\right)$$

$$= \left(\frac{d}{dt}\delta x^T(t)\right) S(t)\, \delta x(t) + \delta x^T(t)\left(\frac{d}{dt}S(t)\right)\delta x(t) + \delta x^T(t)\, S(t)\left(\frac{d}{dt}\delta x(t)\right)$$

$$= \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix}^T \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} n & n \end{array} \\ \begin{array}{c} n \\ n \end{array} & \begin{bmatrix} \dot{S} & S \\ S & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix}$$

(注) これはブロック行列

となる.

これを第2変分に加えると、次式を得る。

$$\delta^2 J[x^*, \delta x] = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_f} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \dot{S} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} & S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \\ S + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix} dt$$

次に、被積分項の (1, 1) ブロック以外で平方完成するために
つくるために、以下の2次形式を考える。

$$(Q) := \left\{ \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \delta x + \delta \dot{x} \right\}^T \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \delta x + \delta \dot{x} \right\}$$

$$= \left\{ \delta x^T \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right)^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} + \delta \dot{x}^T \right\} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \left\{ \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \delta x + \delta \dot{x} \right\} \quad \left(\because \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \text{は実対称行列}\right)$$

(Q) は次の4項の和となる。

$$(A) = \delta x^T \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial x}\right)^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \delta x$$

$$(B) = \delta \dot{x}^T \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \delta x = \delta \dot{x}^T \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x}\right) \delta x$$

$$(C) = \delta x^T \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right)^T \delta \dot{x} = \delta x^T \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \delta \dot{x}$$

↑ $S$, $\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}$ が対称

$$(D) = \delta \dot{x}^T \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \delta \dot{x}$$

よって、これを2次形式で表すと、

$$(Q) = \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right)^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) & S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \\ S + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x} \partial x} & \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta \dot{x} \end{bmatrix}$$

となる。したがって、$S(t)$ が

$$\dot{S} + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} = \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right)^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left(S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}}\right) \quad (4.8)$$

を満たせば、

$$\delta^2 J[x^*, \delta x] = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_f} \left\{ \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left( S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) \delta x + \delta \dot{x} \right\}^T \boxed{\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}} \left\{ \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left( S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) \delta x + \delta \dot{x} \right\} dt$$

2次形式の行列に相当

と表せる。したがって、停留解に沿って全ての時刻で

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} > 0$$

が成り立つとき、$\delta^2 J[x^*, \delta x]$ は非負であり、最小値 0 をとるのは、

$$\delta \dot{x} = -\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}\right)^{-1} \left( S + \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \right) \delta x \qquad (4.9)$$

に限る。(4.9) は $\delta x$ の線形微分方程式なので、条件 $\delta x(t_0) = 0$ より
恒等的に $\delta x(t) = 0$

⇝ $\delta^2 J[x^*, \delta x]$ が最小値 0 をとるのは恒等的に $\delta x \equiv 0$ のときに限り、2次変分は正になる。

また、ある定数 $\delta > 0$ に対し、$\delta^2 J[x^*, \delta x] \geq \delta \|\delta x\|_{C^1}^2$ もいえる(証明略)ので、停留点 $x^*$ は、局所孤立最適解になっていることが分かる。

Remark

- 以上のギロンは、微分方程式 (4.8) の解 $S(t)$ が適当な境界条件の下で存在することが前提になっている。
- (4.8) は行列 $S(t)$ に対して2次の項を含む。リッカチ微分方程式と呼ばれる。
  - $\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}$ が正則であることが必要。これは、$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}$ が正定であれば自動的に満たされる。

以上をまとめて、次の定理を得る。

**Th 4.3. (2次の十分条件)**

汎関数 (4.1) に対して、固定端点問題の停留解 $x^*$ が孤立局所最適解であるための十分条件は、以下が成立することである。

(1) 停留解に沿って

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2}(x^*(t), \dot{x}^*(t), t) > 0$$

がすべての時刻 $t$ ($t_0 \leq t \leq t_f$) で成り立つ。(ルジャンドル条件)

(2) 停留解に沿って与えられたリッカチ微分方程式 (4.8) の解が適当な境界条件に対してすべての時刻 $t$ ($t_0 \leq t \leq t_f$) で存在する (発散しない) (ヤコビ条件)

Remark

- ルジャンドル条件、ヤコビ条件の1つのみが成立することは局所最適性の必要条件になる。