

共役関数と劣勾配

関数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ に対して¹

$$f^*(s) = \sup\{s^\top x - f(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\} \quad (1)$$

で定義される関数 $f^* : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ を f の共役関数とよぶ (図 1)². 関数 f が凸ではない場合でも, その共役関数 f^* は凸関数である.

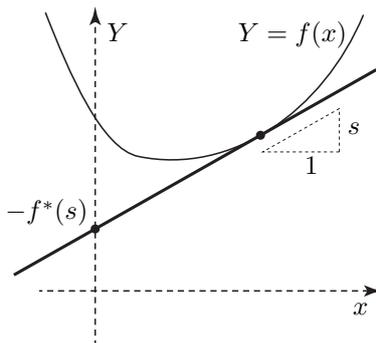


図 1: 共役関数

関数 f から共役関数 f^* への変換のことを, Fenchel 変換とよぶ (Legendre 変換や Fenchel–Legendre 変換とよばれることもある). この変換は, 理工学のさまざまな分野で用いられる重要なものである.

共役関数の定義より, 直ちに次の不等式が得られる.

命題 1 (Fenchel–Young の不等式). 関数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ に対して, 不等式

$$f(x) + f^*(s) \geq \langle s, x \rangle, \quad \forall x, s \in \mathbb{R}^n$$

が成り立つ.

共役関数 f^* の共役関数 $(f^*)^*$ のことを f^{**} とも書き, f の双共役関数とよぶ. $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ が凸関数ならば³,

$$f^{**} = f \quad (2)$$

が成立する.

次に, 関数の勾配を微分可能とは限らない凸関数に対して拡張した概念として, 劣勾配を説明する. 凸関数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ と点 $x \in \mathbb{R}^n$ に対して, 条件

$$f(y) \geq f(x) + \langle s, y - x \rangle, \quad \forall y \in \mathbb{R}^n \quad (3)$$

¹ f は, 凸とは限らないが, 条件 $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) < +\infty\} \neq \emptyset$ を満たすものとする. 命題 1 でも同じことを仮定する.

²実数からなる集合 A の上界の最小値を A の上限といい, $\sup A$ で表す. A が上に有界でないときは, $\sup A = +\infty$ と書く.

³厳密には, f を閉真凸関数とする必要がある.

を満たす $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ を, f の \mathbf{x} における劣勾配とよぶ. また, 劣勾配全体の集合を, f の \mathbf{x} における劣微分とよび, $\partial f(\mathbf{x})$ で表す (図2). つまり,

$$\partial f(\mathbf{x}) = \{\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \langle \mathbf{s}, \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle \ (\forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n)\} \quad (4)$$

である. f が点 \mathbf{x} において微分可能な場合には, $\partial f(\mathbf{x}) = \{\nabla f(\mathbf{x})\}$ が成り立つ.

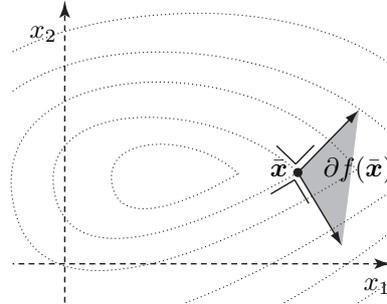


図 2: 劣微分 (点線は関数 f の等高線を表す)

凸関数の共役関数と劣微分との間には, 次の関係がある.

命題 2. 凸関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ を考える⁴. 点 $\mathbf{x}, \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ に対して次の三つの条件は互いに等価である.

- (a) $\mathbf{s} \in \partial f(\mathbf{x})$.
- (b) $f(\mathbf{x}) + f^*(\mathbf{s}) = \langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle$.
- (c) $\mathbf{x} \in \partial f^*(\mathbf{s})$.

証明. まず, (a) と (b) が等価であることを示す. 劣微分の定義 (4) より, (a) は条件

$$\langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \geq \sup_{\mathbf{y}} \{\langle \mathbf{s}, \mathbf{y} \rangle - f(\mathbf{y})\}$$

と等価である. この不等式の右辺に共役関数の定義 (1) を適用することで,

$$\langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \geq f^*(\mathbf{s})$$

が得られる. 一方で命題 1 が成り立つので, (a) と (b) は等価である.

次に, (b) と (c) が等価であることを示す. f は閉真凸関数なので, (2) より (b) は

$$f^*(\mathbf{s}) + f^{**}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle$$

と等価である. この式に, (b) と (a) が等価であることを適用すると, (c) が得られる. \square

命題 2 の (a) と (c) を比べると, ∂f と ∂f^* が「逆関数」の関係にあることがわかる. これが, f と f^* の間の共役関係の本質である.

f をひずみエネルギー関数, x をひずみとしたとき, 命題 2 の (a) は構成則に相当する. つまり, s は応力を表す. また, ひずみエネルギー関数の共役関数 f^* は補ひずみエネルギー関数とよばれる. このとき, 命題 2 の (c) はひずみを応力の関数として表現する式であり, 構成則の逆関数とみなせる.

⁴厳密には, f を閉真凸関数とする必要がある.

演習問題

1) 次のことを示せ.

(a) 関数 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^\top \mathbf{x} + b$ の共役関数は

$$f^*(s) = \begin{cases} -b & (s = \mathbf{a} \text{ のとき}) \\ +\infty & (\text{それ以外のとき}) \end{cases}$$

である.

(b) (線形弾性トラス要素の補ひずみエネルギー) $k > 0$ を定数とすると、2次関数 $f(x) = \frac{1}{2}kx^2$ の共役関数は

$$f^*(s) = \frac{1}{2} \frac{1}{k} s^2$$

である.

k をトラス要素の伸び剛性とすると、 $f(x)$ は伸び x に対するひずみエネルギーを表す. また、 $f^*(s)$ は軸力 s に対する補ひずみエネルギーを表す [3, 4].

(c) $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を正定値対称行列、 $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, $r \in \mathbb{R}$ とするとき、関数 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top Q \mathbf{x} + \mathbf{p}^\top \mathbf{x} + r$ の共役関数は

$$f^*(s) = \frac{1}{2} (s - \mathbf{p})^\top Q^{-1} (s - \mathbf{p}) - r$$

である.

参考文献

- [1] 福島 雅夫 : 『非線形最適化の基礎』. 朝倉書店 (2001).
- [2] J. B. Hiriart-Urruty, C. Lemaréchal: *Convex Analysis and Minimization Algorithms. Volume I.* Springer-Verlag, Berlin (1993).
- [3] 中村 恒善 (編) : 『建築構造力学 図説・演習 II (第2版)』. 丸善 (1994).
- [4] 大崎 純, 本間 俊雄 : 『例題で学ぶ建築構造力学 2 : 不静定構造力学編』. コロナ社 (2013).
- [5] R. T. Rockafellar: *Convex Analysis.* Princeton University Press, Princeton (1970).

(2017年4月, 寒野)