

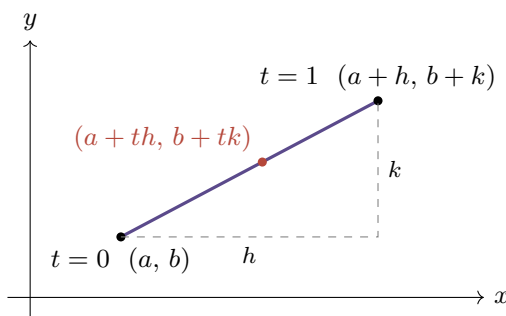
No.4 テイラー展開 (多変数)

この回のゴール

- 1変数のテイラーの定理を線分上に制限して使うことで、2変数のテイラーの定理を導ける.
- $\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^m$ という記法を理解し、2次・3次までの展開を書ける.
- ヘッセ行列を使って2次の項を $\frac{1}{2}\mathbf{v}H\mathbf{v}$ と表せる.
- 具体的な関数のテイラー展開を計算し、近似に使える.

■ 1. 線分に制限して1変数に帰着する

第1章 No.5 では、1変数関数を多項式で近似するテイラーの定理を学んだ. 2変数関数 $f(x, y)$ を点 (a, b) のまわりで多項式近似するには、次のアイデアを使う.



2点 (a, b) と $(a+h, b+k)$ を結ぶ線分上の点は $(a+th, b+tk)$ ($0 \leq t \leq 1$) と表せる. 線分の上だけで f を考えると、 t だけの1変数関数

$$g(t) = f(a+th, b+tk)$$

になる. $g(0) = f(a, b)$, $g(1) = f(a+h, b+k)$ なので、 g に1変数のマクローリンの定理を使えばよい. そのために g の導関数を計算しておく.

合成関数の微分 (No.3 定理1, $x'(t) = h$, $y'(t) = k$) より

$$g'(t) = hf_x + kf_y, \quad g''(t) = h(hf_{xx} + kf_{xy}) + k(hf_{yx} + kf_{yy}) = h^2f_{xx} + 2hkf_{xy} + k^2f_{yy}$$

(右辺は点 $(a+th, b+tk)$ での値. $f_{xy} = f_{yx}$ を使った). これを見やすく書くために、「 f に作用させる操作」を表す記号

$$\left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)f = hf_x + kf_y$$

を導入する. すると $g'(t) = \left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)f$ で、 g'' はこれを2回くり返したもの

$$g''(t) = \left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f = h^2f_{xx} + 2hkf_{xy} + k^2f_{yy}$$

になる. 二項展開と同じ形になっていることに注目しよう. 一般に、 f が C^m 級なら

$$g^{(m)}(t) = \left(h\frac{\partial}{\partial x} + k\frac{\partial}{\partial y}\right)^m f = \sum_{j=0}^m \binom{m}{j} h^j k^{m-j} \frac{\partial^m f}{\partial x^j \partial y^{m-j}}$$

となる (数学的帰納法. 偏微分の順序を交換できることを使う).

■ 2. 2変数のテイラーの定理

定理 1 2変数のテイラーの定理

$f(x, y)$ が, 点 (a, b) と $(a+h, b+k)$ を結ぶ線分を含む開集合で C^{n+1} 級ならば,

$$f(a+h, b+k) = \sum_{m=0}^n \frac{1}{m!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^m f(a, b) + R_{n+1},$$

$$R_{n+1} = \frac{1}{(n+1)!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n+1} f(a+\theta h, b+\theta k) \quad (0 < \theta < 1)$$

と書ける. ($m=0$ の項は $f(a, b)$ そのものとする.)

【証明】 $g(t) = f(a+th, b+tk)$ に第1章 No.5 のマクローリンの定理を $t=1$ で使うと $g(1) = \sum_{m=0}^n \frac{g^{(m)}(0)}{m!} + \frac{g^{(n+1)}(\theta)}{(n+1)!}$ ($0 < \theta < 1$). 第1節で求めた $g^{(m)}$ の式を代入すればよい. $\square$

特によく使うのは, 2次の項まで書いた次の形である.

定理 2 2次までのテイラー展開

f が C^2 級ならば, $0 < \theta < 1$ があって

$$f(a+h, b+k) = f(a, b) + f_x(a, b)h + f_y(a, b)k + \frac{1}{2} \left(f_{xx}h^2 + 2f_{xy}hk + f_{yy}k^2 \right) \Big|_{(a+\theta h, b+\theta k)}.$$

f が C^3 級なら, 2次の項を (a, b) での値にして, 誤差を3次の項で書くこともできる.

係数の「2」と「 $\frac{1}{2}$ 」

2次の項 $\frac{1}{2}(f_{xx}h^2 + 2f_{xy}hk + f_{yy}k^2)$ で, hk の係数は $\frac{1}{2} \cdot 2 = 1$, つまり $f_{xy}hk$ である. $f_{xy}hk$ と $f_{yx}kh$ の2つの項が合わさったもの, と考えると覚えやすい. 3次の項では $\frac{1}{3!}(f_{xxx}h^3 + 3f_{xxy}h^2k + 3f_{xyy}hk^2 + f_{yyy}k^3)$ となる.

■ 3. ヘッセ行列による表示

2次の項は, 行列を使うとすっきり書ける.

定義 1 ヘッセ行列

C^2 級の関数 f に対して, 2次偏導関数を並べた行列

$$H_f(a, b) = \begin{pmatrix} f_{xx}(a, b) & f_{xy}(a, b) \\ f_{yx}(a, b) & f_{yy}(a, b) \end{pmatrix}$$

を, f の (a, b) における**ヘッセ行列**という. シュワルツの定理 (No.1 定理1) より $f_{xy} = f_{yx}$ なので, ヘッセ行列は**対称行列**である.

$\mathbf{v} = {}^t(h, k)$ とおくと、行列の積を計算すれば

$${}^t\mathbf{v}H_f\mathbf{v} = (h \ k) \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} = f_{xx}h^2 + 2f_{xy}hk + f_{yy}k^2$$

となる (このような h, k の 2 次式を **2 次形式** という). また 1 次の項は勾配との内積 $(\nabla f, \mathbf{v})$ である. したがって、点 $\mathbf{p} = {}^t(a, b)$ として

$$f(\mathbf{p} + \mathbf{v}) \approx f(\mathbf{p}) + (\nabla f(\mathbf{p}), \mathbf{v}) + \frac{1}{2} {}^t\mathbf{v}H_f(\mathbf{p})\mathbf{v}$$

と書ける. 1 変数の $f(a+h) \approx f(a) + f'(a)h + \frac{1}{2}f''(a)h^2$ とまったく同じ形で, 「 f' が勾配ベクトルに, f'' がヘッセ行列に」置きかわっただけである. この形は変数がいくつあっても通用する. 次の No.5 では, この 2 次形式の符号を調べて極値を判定する.

■ 4. 計算例

例 1 多項式の展開しなおし

$f(x, y) = x^3 + xy^2$ を点 $(1, 1)$ のまわりで展開する. $x = 1 + h, y = 1 + k$ とおく.

$$f = 2, \quad f_x = 3x^2 + y^2 = 4, \quad f_y = 2xy = 2, \quad f_{xx} = 6x = 6, \quad f_{xy} = 2y = 2, \quad f_{yy} = 2x = 2,$$

$$f_{xxx} = 6, \quad f_{xxy} = 0, \quad f_{xyy} = 2, \quad f_{yyy} = 0$$

(すべて $(1, 1)$ での値). 4 次以上の偏導関数はすべて 0 なので, 剰余項はなく

$$\begin{aligned} f(1+h, 1+k) &= 2 + (4h + 2k) + \frac{1}{2}(6h^2 + 4hk + 2k^2) + \frac{1}{6}(6h^3 + 3 \cdot 2hk^2) \\ &= 2 + 4h + 2k + 3h^2 + 2hk + k^2 + h^3 + hk^2. \end{aligned}$$

$(1+h)^3 + (1+h)(1+k)^2$ を直接展開しても同じ結果になる.

例題 1 マクローリン展開

$f(x, y) = e^x \cos y$ を原点のまわりで 2 次の項まで展開せよ.

【解答】 原点での値は $f = 1, f_x = e^x \cos y = 1, f_y = -e^x \sin y = 0, f_{xx} = 1, f_{xy} = -e^x \sin y = 0, f_{yy} = -e^x \cos y = -1$. よって

$$e^x \cos y \approx 1 + x + \frac{1}{2}(x^2 - y^2).$$

1 変数の展開を組み合わせる

例題 1 は, $e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots$ と $\cos y = 1 - \frac{y^2}{2} + \dots$ を掛けて, 2 次までの項を取り出しても得られる: $\left(1 + x + \frac{x^2}{2}\right)\left(1 - \frac{y^2}{2}\right) = 1 + x + \frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2} + (3 \text{ 次以上})$. 偏導関数を計算するより速いことが多い (第 1 章 No.5 練習問題 1 (3) と同じ考え方).

例題 2 近似値

$f(x, y) = x^y$ の $(1, 1)$ のまわりの 2 次までの展開を使って, $(1.1)^{0.9}$ の近似値を求めよ.

【解答】 $(1, 1)$ での値は

$$f = 1, \quad f_x = yx^{y-1} = 1, \quad f_y = x^y \log x = 0, \quad f_{xx} = y(y-1)x^{y-2} = 0,$$

$$f_{xy} = x^{y-1} + yx^{y-1} \log x = 1, \quad f_{yy} = x^y (\log x)^2 = 0.$$

よって $f(1+h, 1+k) \approx 1+h+hk$. $h=0.1$, $k=-0.1$ とすると $(1.1)^{0.9} \approx 1+0.1-0.01=1.09$. (実際は $1.0896\dots$) 1次近似でさえ 1.1 で、2次の項 hk が精度を上げている.

コラム：ニュートン法と2次近似

関数の最小値を数値的に探すとき、「現在の点のまわりで f を2次式で近似し、その2次式の最小点に移る」ことをくり返す方法がある. これがニュートン法 (の最適化版) で、ここで学んだ勾配とヘッセ行列がそのまま使われる. 方程式を解くためのニュートン法は分野「数値解析」第2章 No.2, 最適化での使われ方は分野「最適化」で扱う.

■ 練習問題

1. 次の関数を原点のまわりで2次の項まで展開せよ.

$$(1) e^{x+2y} \quad (2) \frac{1}{1-x-y} \quad (3) e^y \log(1+x)$$

2. $\sin x \cos y$ を原点のまわりで3次の項まで展開せよ.

3. $f(x, y) = x^2 y$ を点 $(1, 2)$ のまわりで、 $h = x - 1$, $k = y - 2$ について2次の項まで展開せよ. また、剰余項 (3次の項) も求めて、展開が f に一致することを確認せよ.

4. $f(x, y) = x^3 - 3xy + y^3$ の点 $(1, 1)$ における勾配 ∇f とヘッセ行列 H_f を求めよ.

5. $e^x \cos y$ を原点のまわりで3次の項まで展開せよ.

6. (考えてみよう) f は $\mathbb{R}^2$ 全体で C^2 級で、2次偏導関数 f_{xx} , f_{xy} , f_{yy} がすべてつねに0であるとする. 定理2 ($(a, b) = (0, 0)$) を使って、 f は1次式 $f(x, y) = c_0 + c_1 x + c_2 y$ であることを示せ.

■ 練習問題の解答

1. (1) $e^u = 1 + u + \frac{u^2}{2} + \cdots$ に $u = x + 2y$ を代入して, $1 + x + 2y + \frac{1}{2}(x + 2y)^2 = 1 + x + 2y + \frac{1}{2}x^2 + 2xy + 2y^2$.
 (2) $\frac{1}{1-u} = 1 + u + u^2 + \cdots$ に $u = x + y$ を代入して, $1 + x + y + x^2 + 2xy + y^2$.
 (3) $\left(1 + y + \frac{y^2}{2}\right)\left(x - \frac{x^2}{2}\right)$ の 2 次までをとって, $x - \frac{1}{2}x^2 + xy$.

2. $\left(x - \frac{x^3}{6}\right)\left(1 - \frac{y^2}{2}\right)$ の 3 次までをとって, $x - \frac{x^3}{6} - \frac{xy^2}{2}$.

3. (1, 2) で $f = 2$, $f_x = 2xy = 4$, $f_y = x^2 = 1$, $f_{xx} = 2y = 4$, $f_{xy} = 2x = 2$, $f_{yy} = 0$. よって 2 次までは $2 + 4h + k + \frac{1}{2}(4h^2 + 2 \cdot 2hk) = 2 + 4h + k + 2h^2 + 2hk$. 3 次偏導関数は $f_{xxy} = 2$ だけが 0 でなく, 3 次の項は $\frac{1}{6} \cdot 3f_{xxy}h^2k = h^2k$. 合わせて $2 + 4h + k + 2h^2 + 2hk + h^2k$ で, $(1+h)^2(2+k)$ を展開したものと一致する.

4. $f_x = 3x^2 - 3y$, $f_y = -3x + 3y^2$ より $\nabla f(1, 1) = {}^t(0, 0)$. $f_{xx} = 6x$, $f_{xy} = -3$, $f_{yy} = 6y$ より $H_f(1, 1) = \begin{pmatrix} 6 & -3 \\ -3 & 6 \end{pmatrix}$. (勾配が **0** なので, この点は No.5 で扱う「停留点」である.)

5. 原点での 3 次偏導関数は $f_{xxx} = 1$, $f_{xxy} = 0$, $f_{xyy} = -1$, $f_{yyy} = 0$. 例題 1 と合わせて

$$e^x \cos y \approx 1 + x + \frac{1}{2}(x^2 - y^2) + \frac{1}{6}(x^3 - 3xy^2).$$

$(x^2 - y^2, x^3 - 3xy^2)$ は $(x + iy)^2, (x + iy)^3$ の実部である. $e^x \cos y$ は e^{x+iy} の実部だからで, 分野「複素関数論」第 2 章とつながっている.)

6. 定理 2 で $(a, b) = (0, 0)$, $(h, k) = (x, y)$ とすると, 2 次の項の偏導関数はすべて 0 なので $f(x, y) = f(0, 0) + f_x(0, 0)x + f_y(0, 0)y$. $c_0 = f(0, 0)$, $c_1 = f_x(0, 0)$, $c_2 = f_y(0, 0)$ とおけばよい. ($\mathbb{R}^2$ 全体で考えているので, 原点と (x, y) を結ぶ線分はいつも定義域に含まれる. 定義域が「穴あき」だと, この議論はそのままでは使えない.)