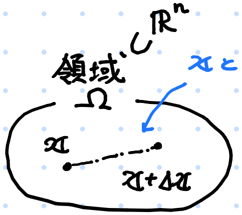
§4-3. Taylor展開, 極値

「偏微分の順序を気にしなくて良い」のには条件が有る。

- 偏微分の順序：xで $\frac{\partial}{\partial x_i}f$ も $\frac{\partial}{\partial x_j}f$ も（全）微分可能 $\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}\right)$ at x.
- C^n級：関数$f(x)$がn回偏微分でき、それらが全て連続なとき、その$f(x)$をC^n級と言う.

テイラーの定理

Th. Taylor：



領域Ωで関数fがC^k級で、かつ、左図の状況の時、

$$f(x+\Delta x) = \sum_{\ell=0}^{k-1} \frac{1}{\ell!}\left(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \cdots + \Delta x_n \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\ell} f(x) + \underbrace{\frac{1}{k!}\left(\quad '' \quad \right)^{k} f(x+\theta\Delta x)}_{\text{剰余項}}, \quad 0 \leq {}^{\exists}\theta \leq 1.$$

例：$x \in \mathbb{R}^3$の場合を具体的に見てみよう.

$$\left(\Delta x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Delta y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \Delta z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\Delta x\Delta y \frac{\partial^2}{\partial x\partial y} + 2\Delta y\Delta z \frac{\partial^2}{\partial y\partial z} + 2\Delta z\Delta x \frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\right)$$

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y} + \Delta z \frac{\partial}{\partial z}\right) f(x) + \frac{1}{2}\left(\quad '' \quad \right)^2 f(x) + \cdots$$

$f_{\circ\circ} := \frac{\partial^2}{\partial\circ\partial\circ} f$

$$= f(x) + \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix}}_{\nabla f} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix}}_{\Delta x\text{と書く.}} + \frac{1}{2}\Delta x^T \underbrace{\begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{yx} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{zx} & f_{zy} & f_{zz} \end{pmatrix}}_{f\text{のHesse行列と言い, }H_f\text{等と書く}} \Delta x + \cdots$$

$$= \underline{f(x) + \nabla f \cdot \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T H_f \Delta x + \cdots}$$

覚え易い表記なので暗記しても良い（しかもxの次元に依らない）.

多変数 Taylor展開を $\overbrace{\text{具体的}}^{\text{1次元の知識で}}$ に納得する.（3次元の例で）

$$f(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) = f(x_1+\Delta x_1,\ x_2+\Delta x_2,\ x_3+\Delta x_3)$$

ズレ Δx_1 について Taylor展開している.

$$= \sum_{k_1=0}^{\infty} \frac{1}{k_1!}\left(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{k_1} f(x_1,\ x_2+\Delta x_2,\ x_3+\Delta x_3)$$

ズレ Δx_2 について Taylor展開している.

$$= \sum_{k_1=0}^{\infty} \frac{1}{k_1!}\left(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{k_1} \left\{ \sum_{k_2=0}^{\infty} \frac{1}{k_2!}\left(\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}\right)^{k_2} f(x_1,\ x_2,\ x_3+\Delta x_3) \right.$$

ズレ Δx_3 について Taylor展開している.

$$= \sum_{k_1=0}^{\infty} \frac{1}{k_1!}\left(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{k_1} \left\{ \sum_{k_2=0}^{\infty} \frac{1}{k_2!}\left(\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}\right)^{k_2} \left[\sum_{k_3=0}^{\infty} \frac{1}{k_3!}\left(\Delta x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}\right)^{k_3} f(\boldsymbol{x}) \right] \right\}$$

これは まとめただけ。

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\sum_{k_1+k_2+k_3=\ell} \frac{1}{k_1!}\frac{1}{k_2!}\frac{1}{k_3!} \left(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{k_1} \left(\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}\right)^{k_2} \left(\Delta x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}\right)^{k_3} f(\boldsymbol{x}) \right]$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!}\left(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \Delta x_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^{\ell} f(\boldsymbol{x})$$

これもまとめただけだが、よく分からない人は、

$\tilde{\partial}_i := \Delta x_i \dfrac{\partial}{\partial x_i}$ として $\ell=3$ のケース等を具体的に計算してみると良い。

実際にやってみると、

$$\frac{1}{3!}\tilde{\partial}_1^3 + \frac{1}{2!1!}\left(\tilde{\partial}_1^2\tilde{\partial}_2 + \tilde{\partial}_1^2\tilde{\partial}_3\right) + \frac{1}{1!2!}\left(\tilde{\partial}_1\tilde{\partial}_2^2 + \tilde{\partial}_1\tilde{\partial}_3^2\right) + \frac{1}{1!1!1!}\left(\tilde{\partial}_1\tilde{\partial}_2\tilde{\partial}_3\right) + \frac{1}{0!3!}\left(\tilde{\partial}_2^3 + \tilde{\partial}_3^3\right) + \frac{1}{0!2!1!}\left(\tilde{\partial}_2^2\tilde{\partial}_3 + \tilde{\partial}_2\tilde{\partial}_3^2\right)$$

$$= \frac{1}{3!}\left\{ \tilde{\partial}_1^3 + 3(\tilde{\partial}_2+\tilde{\partial}_3)\tilde{\partial}_1^2 + 3(\tilde{\partial}_2^2 + 2\tilde{\partial}_2\tilde{\partial}_3 + \tilde{\partial}_3^2)\tilde{\partial}_1 + (\tilde{\partial}_2^3 + 3\tilde{\partial}_2^2\tilde{\partial}_3 + 3\tilde{\partial}_2\tilde{\partial}_3^2 + \tilde{\partial}_3^3) \right\}$$

$$= \frac{1}{3!}\left\{ \tilde{\partial}_1 + (\tilde{\partial}_2+\tilde{\partial}_3) \right\}^3$$

となり、納得できるだろう。

Taylor展開の応用例：近似としての精度

$f(x,y)=\sqrt{x^2+y^2}$ に対して、Taylor展開してみる.

$$f_{xx}=\left(\frac{x}{f}\right)_x=\frac{1}{f}-\frac{x}{f^2}\overset{\frac{x}{f}}{f_x}=\frac{1}{f}-\frac{x^2}{f^3}=\frac{f^2-x^2}{f^3}=\frac{y^2}{f^3},$$

$$f_{xy}=\left(\frac{x}{f}\right)_y=-\frac{x}{f^2}\cdot f_y=-\frac{xy}{f^3}$$ ，等より，

$$f(x+\Delta x,y+\Delta y)=f(x,y)+\nabla f(x)\cdot\Delta x+\frac{1}{2}\Delta x^T H_f\Delta x+\cdots$$

$$=f(x,y)+\frac{1}{f(x,y)}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}\cdot\Delta x+\frac{1}{2}\Delta x^T\frac{1}{f^3}\begin{pmatrix}y^2&xy\\yx&x^2\end{pmatrix}\Delta x+\cdots\quad\sim☆$$

であるので、例えば $\begin{cases}x=3\\y=4\end{cases}$ の時は、☆を用いて

$$\underbrace{f(3+\Delta x,4+\Delta y)}_{\sqrt{3.3^2+3.8^2}=\sqrt{25.33}\simeq 5.03289181280\cdots}=5+\underbrace{\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix}\cdot\Delta x}_{\frac{1}{5}(3\cdot0.3-4\cdot0.2)=\frac{1}{5}(0.9-0.8)=0.02}+\underbrace{\frac{1}{250}\Delta x^T\begin{pmatrix}16&12\\12&9\end{pmatrix}\Delta x}_{(計算は省略)=0.01296}+\cdots$$

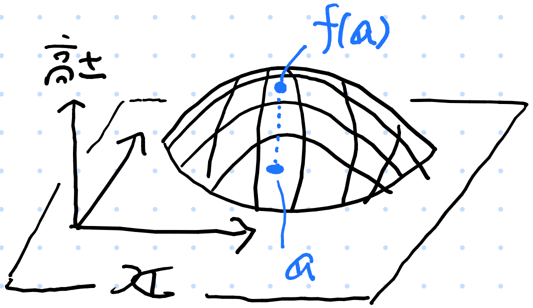
となる。ここで $\begin{cases}\Delta x=0.3,\\\Delta y=-0.2\end{cases}$ として、どうなるか見てみる.

これらより、

真値	Taylor展開の 0次項まで	1次項まで	2次項まで
5.032891…	5	5.02	5.03296

この場合、Taylor展開の2次まで計算すると近似精度がだいぶ良い。

Taylor展開と極値の関係：高さが $f(x)$ の曲面を考えて



← f が平らなら f の勾配 $= 0$ と言っているだけ…

・f が a で極値をとる $\Rightarrow \nabla f(a) = 0$ 〃

・f が a で極小 $\Leftrightarrow \nabla f(a) = 0$，かつ，ヘッセ行列 H_f が正定値

$\Leftrightarrow \nabla f(a) = 0$，かつ，$H_f$ の固有値が全て正．

極大については，$\nabla f = 0$ & H_f が負定値 / $\nabla f = 0$ & H_f の $^{\forall}$固有値 < 0.

解説：a で f が極小

$\overset{\mathrm{d}}{\Leftrightarrow} f(a+\Delta a) - f(a) > 0$ for $^{\forall}\Delta a$ s.t. $\|\Delta a\| < {}^{\exists}r$．に対し，$f(a+\Delta a) = f(a) + \nabla f(a)\cdot\Delta a + \frac{1}{2}\Delta a^T H_f \Delta a + \cdots$ (Taylor展開) より，

$\Leftrightarrow \nabla f(a)\cdot\Delta a + \frac{1}{2}\Delta a^T H_f \Delta a + \cdots > 0$ for $^{\forall}\Delta a$ s.t. $\|\Delta a\| < {}^{\exists}r$.

$\nabla f \neq 0$ だと上の式は絶対に成立しないので．

$\Leftrightarrow \nabla f(a) = 0$ and $\frac{1}{2}\Delta a^T H_f \Delta a + \cdots > 0$ for $^{\forall}\Delta a$ s.t. $\|\Delta a\| < {}^{\exists}r$.

$\Leftrightarrow \nabla f(a) = 0$ and 行列 H_f が正定値

$\Leftrightarrow \nabla f(a) = 0$ and H_f の $^{\forall}$固有値 > 0 （H_f が対称行列ならば，正定値 $\Leftrightarrow$ $^{\forall}$固有値 > 0）

行列の正定値性／$\forall$固有値符号の調べ方（実対称行列に対して）

Th. シルベスターの判定定理（Sylvester criterion）: $n \times n$ 実対称行列 A に対して、

左上角からとった $k \times k$ 部分行列の行列式

$$\begin{cases} A \text{ が正定値} \iff \text{全ての小行列式 } D_1, D_2, \cdots, D_n \text{ が正.} \\ \quad \text{負} \quad \text{〃} \iff {}^{\forall}D_{\text{奇数}} < 0, \ {}^{\forall}D_{\text{偶数}} > 0. \end{cases}$$

（2×2 の H_f に対して）

→ 教 p.96 Th 4.3.4 はこれを書いている.

これを H_f に対して用いれば f の極値性を示せる.

例： $A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 5 & 3 \\ 2 & 3 & 6 \end{pmatrix}$ という対称行列に対して、

$D_1 = 4 > 0,$

$D_2 = \begin{vmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 5 \end{vmatrix} = 20 - 1 = 19 > 0,$

$D_3 = \begin{vmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 5 & 3 \\ 2 & 3 & 6 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & -5 & -10 \\ -1 & 2 & -3 \\ 2 & 3 & 6 \end{vmatrix} = (+5) \begin{vmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -2 & 3 \\ 2 & 3 & 6 \end{vmatrix} = 5 \cdot \begin{vmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & -2 & 3 \\ 0 & 7 & 0 \end{vmatrix} = 5 \cdot (-1) \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 7 & 0 \end{vmatrix} = -35 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 70 > 0,$

となり、${}^{\forall}D_i > 0$ である為 Sylvester の判定定理により A は正定値なことが判明する.