第9章　非線形関数と線形化

9.1　スカラー関数と勾配

【定義 9.1 】関数 $\phi\ :\ x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T \in R^n \mapsto \phi(x) \in R^1$ を R^n 上の**スカラー関数**（**scalar function**），**スカラー場**（**scalar field**）あるいは **スカラーポテンシャル**（**scalar potential**）といい，

$$\{x \in R^n \mid \phi(x) = c,\ c \in R^1\}$$

を**等位面**（**equipotential surface**）という．

【定義 9.2 】R^n 上の C^1 級スカラーポテンシャル ϕ において，

$$\mathrm{grad}\ \phi(p) = \begin{pmatrix} \phi_{x_1}(p) \\ \vdots \\ \phi_{x_n}(p) \end{pmatrix}$$

を点 $x = p$ における**勾配**（**gradient**）といい，$-\mathrm{grad}\ \phi(p)$ を**最急降下方向**（**steepest decent direction**）という．

【定義 9.3 】R^n 上の C^1 級スカラーポテンシャル ϕ において，$\mathrm{grad}\ \phi(x) = 0$ を満たす孤立解を**特異点**（**singular point**）といい，非孤立解を**退化特異点**（**degenerate singular point**）という．また，$\mathrm{grad}\ \phi(x) \neq 0$ なる点を**通常点**（**regular point**）という．

【定義 9.4 】R^n 上の点 p を中心とする十分小さいな半径を持つ開球 $U_p = \{||x-p|| < \epsilon\}$ を，p の**開近傍**（**open neighborhood**）という．

【定義 9.5 】関数の定義域上の全域である性質が成立する場合，これを**大域的**（**globaly**）であるといい，特定の点の開近傍上でのみ成立する場合，これを **局所的**（**localy**）であるという．

線形化の本質とは，注目する関数台 X 上の一点 $p \in X$ の開近傍 U_p において，関数 f が微分可能かつ一次微分項が失われていない場合，局所構造がアフィン関数で記述できるという事実にある．逆に，一次微分項が失われている場合，二次以上の微分情報を利用する必要がある．

【定理 9.1 勾配と等位面**】**R^2 上の C^1 級スカラーポテンシャル $\phi(x)$ の等位面と勾配は，通常点において直交する．

【証明】等位面上の通常点 $x = p$ において，$\phi(p) - c = 0$，$\phi_y(p) \neq 0$ と仮定すると，陰関数定理より，$p = (a, f(a))$ を満足する C^1 級関数 f が存在し等位面の接ベクトルは $(\phi_{x_2}(p), -\phi_{x_1}(p))$ となる．したがって，$(\phi_{x_2}(p), \phi_{x_1}(p))\mathrm{grad}\ \phi(p) = 0$． ■

一般に R^n 上のスカラー場においても勾配と等位面において直交性が成立する．この性質によって次のように微分可能曲面の接平面方程式を簡便に記述することができる．R^n 上のスカラー関数 $\phi(x)$ が定める n 次元微分可能曲面 $\{z = \phi(x) \mid x \in R^n\} \subset R^{n+1}$ は，R^{n+1} 上のスカラーポテンシャル $\Phi(x, z) = \phi(x) - z$ の等位面 $\Phi(x, z) = c$ と一致するため，点 $(x, z) = (p, \phi(p))$ における接平面は，勾配 $\mathrm{grad}\ \Phi(p, \phi(p))$ と直交する．よって，接平面方程式は $((x - p)^T | z - \phi(p))\ \mathrm{grad}\ \Phi(p, \phi(p)) = 0$ となる．(図 9.1 参照)

【例示 9.1 微分可能曲面の接平面方程式】R^2 上のスカラーポテンシャル $\phi(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ を考えよう．この時，R^2 上の等位面 $\{x_1^2 + x_2^2 = c\} \subset R^2$ は，同心円となり，勾配 $\mathrm{grad}\ \phi(x_1, x_2) = (2x_1, 2x_2)^T$ は原点を中心とする放射方向になる．他方，スカラーポテンシャルを 2 次元可微分曲面

$$\{z = \phi(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2\} \subset R^3$$

とみなすとき，点 $p = (a, b, \phi(a, b))$ における法線ベクトルを求める場合は，上記の曲面を R^3 上の等位面 $\{\Phi(x_1, x_2, z) = x_1^2 + x_2^2 - z = c\} \subset R^3$ とみなして，スカラーポテンシャル $\Phi(x_1, x_2, z)$ の勾配

$$\mathrm{grad}\ \Phi(x_1, x_2, z) = (2x_1, 2x_2, -1)^T$$

を計算することに注意する．よって，点 p における接平面方程式は

$$(x_1 - a, x_2 - b, z - \phi(a, b))\ \mathrm{grad}\ \Phi(a, b, \phi(a, b)) = (x_1 - a, x_2 - b, z - \phi(a, b))\ (2a, 2b, -1)^T = 0$$

から，

$$z = 2ax_1 + 2bx_2 - a^2 - b^2$$

となる．

9.2　ベクトル関数とヤコビ行列

【定義 9.6 】関数 $F \in R^n$ を R^n 空間上の**ベクトル関数**（**vector function**），**ベクトル場**（**vector field**）という．また，$F(x) = 0$ を満足する孤立解を**零点**（**zero point**）という．

【定義 9.7 】R^n 上の C^2 級スカラーポテンシャル ϕ による関数

$$-\mathrm{grad}\ \phi(x)\ :\ R^n \to R^n$$

を**勾配ベクトル場**（**gradient vector space**）という．

【定義 9.8 】R^n 上の C^1 級ベクトル関数 $F(x) = (f_1(x), f_2(x), \ldots, f_n(x))^T$ において，

$$\mathrm{D}F(x)]_{x=p} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \ldots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \ldots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{x=p} = \begin{pmatrix} \mathrm{grad}\ f_1(p)^T \\ \hline \vdots \\ \hline \mathrm{grad}\ f_n(p)^T \end{pmatrix}$$

を点 $x = p$ における**ヤコビ行列**（**Jacobi matrix**）といい，その行列式を**ヤコビ行列式**（**Jacobian**）という．

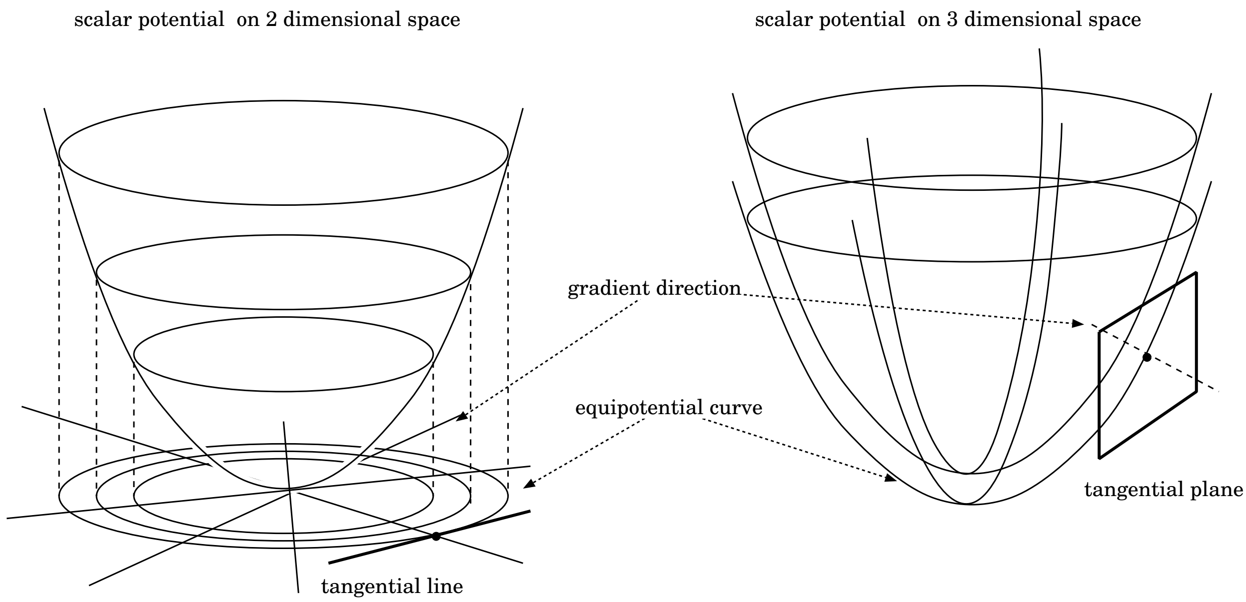

図 9.1: 左は，地形を例とする 2 次元空間上のスカラーポテンシャルを．右は気圧を例とする 3 次元空間上のスカラーポテンシャルの例を示している．3 次元の例においては，スカラーポテンシャルの等位面のみを記述することが限界であることに注意せよ．

【**例示 9.2** 接平面方程式によるヤコビ行列の導出】ベクトル関数

$$F\ :\ x=(x_1,x_2)^T\in R^2\mapsto F(x)=(f(x),g(x))^T\in R^2$$

のヤコビ行列 $\mathrm{D}F(x)]_{x=p}$ を接平面方程式によって求めてみよう．まず，R^2 上のスカラー関数 $f(x)$ の点 $x=p$ における接平面方程式を求めると，

$$(f_{x_1}(p),f_{x_2}(p),-1)(x_1-p_1,x_2-p_2,x_3-f(p))^T=f_{x_1}(p)(x_1-p_1)+f_{x_2}(p)(x_2-p_2)-z+f(p)=0.$$

よって，点 $x=p$ において $f(x)$ は，

$$f(x)\approx f(p)+(f_{x_1}(p),f_{x_2}(p))(x-p)$$

で線形近似される．同様に，

$$g(x)\approx g(p)+(g_{x_1}(p),g_{x_2}(p))(x-p)$$

が成り立つため，

$$\begin{pmatrix} f(x)\\ g(x)\end{pmatrix}\approx\begin{pmatrix} f(p)\\ g(p)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix} f_{x_1}(p) & f_{x_2}(p)\\ g_{x_1}(p) & g_{x_2}(p)\end{pmatrix}(x-p)=F(p)+\mathrm{D}F(x)]_{x=p}(x-p).$$

以上のようにヤコビ行列とは，非線形写像をある確定した点において線形写像によって局所近似した作用素に他ならない．したがって，ヤコビ行列式が正則であれば，非線形写像は局所的に逆写像を持つとわかる．

【定理 9.2 逆写像定理】C^1 級ベクトル関数 $F : R^n \to R^n$ のヤコビ行列式が正則

$$\det \mathrm{D}F(x)]_{x=p} \neq 0$$

ならば，局所的に逆写像

$$x - p \in U_p \mapsto F(p) + (\mathrm{D}F(x)]_{x=p})^{-1}(x-p) \in U_{F(p)}$$

が存在する．

9.3　最急降下法とニュートン法

【定理 9.3 最急降下法】R^n 上の C^2 級スカラーポテンシャル $\phi(x)$ が，

$$\text{grad } \phi(p) = 0, \quad \phi(p) = 0, \quad \phi(x) > 0 \text{ for all } x \ \in U_p$$

を満足する特異点 $x = p$ を持つとき，微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = -\text{grad } \phi(x)$$

の解は p は，局所的に漸近安定である．

【証明】$\phi(x)$ の 2 次項までの級数展開は，

$$\phi(x) = \phi(p) + x^T \text{grad } \phi(p) + \frac{1}{2} x^T \mathrm{D}\text{grad } \phi(x)]_{x=p} x \text{ for all } x \ \in U_p$$

となるため，仮定を代入すると

$$\phi(x) = \frac{1}{2} x^T \mathrm{D} \text{ grad}\phi(x)]_{x=p} x > 0.$$

よって，D grad$\phi(x)]_{x=p}$ は正定値行列より，勾配ベクトル場 $-$grad $\phi(x)$ の平衡点 p におけるすべての固有値は負となる．■

【定理 9.4 ニュートン法】R^n 上の C^1 級ベクトル関数 $F(x)$ が

$$\det \mathrm{D}F(x)]_{x=p} \neq 0$$

を満足する零点 $x = p$ を持つとき，漸化式

$$x_{n+1} = x_n - \mathrm{D}F(x)]_{x=x_n}^{-1} F(x_n)$$

の解 p は，局所的に超安定である．

9.4 特異点判別とヘッセ行列

【定義 9.9 】 R^n 上の C^2 級スカラー関数 $\phi(x)$ において，

$$\mathrm{H}\phi(x)]_{x=p} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}_{x=p} = \mathrm{D}\ \mathrm{grad}\ \phi(x)]_{x=p}$$

を点 $x = p$ における**ヘッセ行列**（**Hess matrix**）といい，その行列式を**ヘッセ行列式**（**Hessian**）という．

【定理 9.5 特異点判別】 C^2 級スカラー関数 $\phi : R^2 \to R^1$ のヘッセ行列が正則であり，

$$\det \mathrm{H}\phi(x)]_{x=p} > 0$$

ならば，特異点 p は極大もしくは極小となり，

$$\det \mathrm{H}\phi(x)]_{x=p} < 0$$

であれば，極値とはならない．また，非正則であれば，極値の判別はできない．

【証明】 $\mathrm{H}\phi(x)]_{x=p} = \mathrm{D}\ \mathrm{grad}\ \phi(x)]_{x=p}$ から，ヘッセ行列は $\phi(x)$ の勾配ベクトル場のヤコビ行列を意味する．よって，その実固有値を α および β とする．(章末問題 9.2 参照）このとき，

$$\det \mathrm{H}\phi(x)]_{x=p} = \alpha\beta$$

より，正であれば 2 つの固有値は同符号，負であれば異符号となる．同符号の場合は，特異点 p は漸近安定もしくは不安定となり，スカラー関数は極大もしくは極小となる．他方，異符号の場合は，サドル型不安定となるため，極値ではない．零固有値を持つ場合は，特異点近傍の固有空間上は中立（リアプノフ安定）となるため，退化特異点を含めてより複雑な状況となる． ■

章末問題

【問題 9.1 】 4 次元空間上の 3 次元超曲面 $w = e^{x^2+y^2+z^2}$ の点 $(x, y, z) = (a, b, c)$ における接平面方程式を求めよ．

【問題 9.2 】 線形化された勾配ベクトル場の固有値は，任意の点で実固有値しかもたないことを示せ．

【問題 9.3 】 $\frac{d\phi(x)}{dt}$ を求める事で解析的に定理 9.3 を示せ．(ヒント : $\phi(\cdot)$ は軌道 $x(t)$ の関数である事に注意せよ.)

【問題 9.4 】 定理 9.3 において，$\phi(x) \geq 0$ と仮定するといかなる結果になるか答えよ．

【**問題 9.5** 】定理 9.4 を示せ．

【**問題 9.6** 】3 次元以上の C^2 級スカラー関数の特異点をヘッセ行列式を用いて簡明に分類できるであろうか？理由を述べて答えよ．

【**問題 9.7** 】3 次方程式 $x^3 - 3x = 2a$ において，$|a| \ll 1$ であるとき，$x \approx -\frac{2a}{3}$ は良い近似解となることを，本章で学んだ知識を用いて説明せよ．