ヘッセ行列

2 変数関数 $f(x,y)$ のヘッセ行列 $H(f)$ は次のように定義される。

$$H(f) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{yx} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{pmatrix} \tag{1}$$

2 変数の偏微分を行う順序で $H(f)$ の成分の場所が決まる。
ヘッセ行列の行列式を Hessian(ヘッシアン) という。

$$|H(f)| = f_{xx} f_{yy} - (f_{xy})^2 \tag{2}$$

極値

関数 $f(x,y)$ の極値 (極大値、極小値) の求め方

1. $f_x(x,y) = f_y(x,y) = 0$ を満たす点 (a,b) を求める。
2. 上の条件を満たす点 (a,b) について $|H(f(a,b))|$ を計算する。
   - $|H(f(a,b))| < 0$ の時、$f(a,b)$ は極値ではない。
   - $|H(f(a,b))| > 0$ の時、$f(a,b)$ は極値である。
3. $f_{xx}(a,b)$ を計算する。
   - $f_{xx}(a,b) > 0$ であれば、$f(a,b)$ は極小値である。
   - $f_{xx}(a,b) < 0$ であれば、$f(a,b)$ は極大値である。

上記条件のどれかが 0 になる場合 ($|H(f(a,b))| = 0$ や $f_{xx}(a,b) = 0$) はこの方法では判定できない。

次の関数の極値を求めよ。

$$z = xy(3-x-y) \tag{3}$$

z の偏導関数 $z_x, z_y, z_{xx}, z_{yy}, z_{xy}$ を求める。

$$z_x = \frac{\partial}{\partial x} xy(3-x-y) = y(3-2x-y) \tag{4}$$

$$z_y = \frac{\partial}{\partial y} xy(3-x-y) = x(3-x-2y) \tag{5}$$

$$z_{xx} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x} xy(3-x-y) = -2y \tag{6}$$

$$z_{yy} = \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y} xy(3-x-y) = -2x \tag{7}$$

$$z_{xy} = \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} xy(3-x-y) = 3-2x-2y \tag{8}$$

$z_x = z_y = 0$ となる座標を求める。これを満たす点は次の 4 つ。

- $y = 0$ かつ $x = 0$ を満たす点 $(0,0)$
- $y = 0$ かつ $3-x-2y = 0$ を満たす点 $(3,0)$
- $3-2x-y = 0$ かつ $x = 0$ を満たす点 $(0,3)$
- $3-2x-y = 0$ かつ $3-x-2y = 0$ を満たす点 $(1,1)$

この 4 点n $(0,0), (3,0), (0,3), (1,1)$ が極値の候補である。
ヘッセ行列式 H は次のような式である。

$$H = z_{xx}z_{yy} - (z_{xy})^2 = (-2y)(-2x) - (3-2x-2y)^2 \tag{9}$$

$H(0,0) = -9 < 0$ であるので点 $(0,0)$ は極値を持たない。
$H(3,0) = -9 < 0$ であるので点 $(3,0)$ は極値を持たない。
$H(0,3) = -9 < 0$ であるので点 $(0,3)$ は極値を持たない。
$H(1,1) = 3 > 0$ であるので点 $(3,0)$ は極値を持つ。$z_{xx}(1,1) = -2 < 0$ であるのでこの点で極大であり、極大値は $z(1,1) = 1$ である。

次の関数の極値を求めよ。

$$z = e^{-x^2-y^2}(2x^2+y^2) \tag{10}$$

z の偏導関数 $z_x, z_y, z_{xx}, z_{yy}, z_{xy}$ を求める。

$$\begin{aligned} z_x =& e^{-x^2-y^2}(-4x^3-2xy^2+4x) = e^{-x^2-y^2}2x(-2x^2-y^2+2) && (11)\\ z_y =& e^{-x^2-y^2}(-4x^2y-2y^3+2y) = e^{-x^2-y^2}2y(-2x^2-y^2+1) && (12)\\ z_{xx} =& e^{-x^2-y^2}(8x^4+4x^2y^2-8x^2-12x^2-2y^2+4) && (13)\\ z_{yy} =& e^{-x^2-y^2}(8x^2y^2+4y^4-4y^2-4x^2-6y^2+2) && (14)\\ z_{xy} =& e^{-x^2-y^2}4xy(2x^2+y^2-3) && (15) \end{aligned}$$

$z_x = z_y = 0$ を満たす点は $(0,0), (0,1), (0,-1), (1,0), (-1,0)$ である。
ヘッセ行列式 $H = z_{xx}z_{yy} - (z_{xy})^2$ を計算する。

- 点 $(0,0)$ の場合
$$H(0,0) = e^{2(-0^2-0^2)}(4 \cdot 2 - 0^2) > 0 \tag{16}$$
である。$z_{xx}(0,0) = 4 > 0$ より点 $(0,0)$ で極小値を持つ。極小値は $z(0,0) = 0$ である。
- 点 $(0,1)$ の場合
$$H(0,1) = e^{2(-0^2-1^2)}(2 \cdot (-4) - 0^2) < 0 \tag{17}$$
であるので極値ではない。
- 点 $(0,-1)$ の場合
$$H(0,-1) = e^{2(-0^2-(-1)^2)}(2 \cdot (-4) - 0^2) < 0 \tag{18}$$
であるので極値ではない。
- 点 $(1,0)$ の場合
$$H(1,0) = e^{2(-1^2-0^2)}((-8) \cdot (-2) - 0^2) > 0 \tag{19}$$
である。$z_{xx}(1,0) = \frac{-8}{e} < 0$ より点 $(1,0)$ で極大値を持つ。極大値は $z(1,0) = \frac{2}{e}$ である。
- 点 $(-1,0)$ の場合
$$H(-1,0) = e^{2(-(-1)^2-0^2)}((-8) \cdot (-2) - 0^2) < 0 \tag{20}$$
である。$z_{xx}(-1,0) = \frac{-8}{e} < 0$ より点 $(-1,0)$ で極大値を持つ。極大値は $z(-1,0) = \frac{2}{e}$ である。