戸田昭彦（広島大学）

（参考16）2変数の凸関数の性質：

任意の2点間$(u_0,v_0)-(u_0+\Delta u, v_0+\Delta v)$を結ぶ線分上で$f(u,v)$が狭義の意味で上に凸の曲線となるためには，$F(t)=f(u_0+t\Delta u, v_0+t\Delta v)$について$0\le t\le 1$で$F''(t)<0$であればよい。ただし，

$$F'(t)=\frac{\mathrm{d}F}{dt}=\frac{\partial f(u_0+t\Delta u, v_0+t\Delta v)}{\partial u}\Delta u+\frac{\partial f(u_0+t\Delta u, v_0+t\Delta v)}{\partial v}\Delta v$$

$$F''(t)=\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}t^2}=\frac{\mathrm{d}}{dt}\left(\frac{\mathrm{d}F}{dt}\right)=\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}(\Delta u)^2+2\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}(\Delta u)(\Delta v)+\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}(\Delta v)^2$$

（広義の意味で上に凸となる条件式は$F''(t)\le 0$であり，$F''(t)=0$は直線的に変化する向きを表す。）

そこで，任意の(u,v)とΔu, Δvについて，以下の不等式が成立する。

$$\Delta F_2(\Delta u,\Delta v)=\frac{\partial^2 f(u,v)}{\partial u^2}(\Delta u)^2+2\frac{\partial^2 f(u,v)}{\partial u\partial v}(\Delta u)(\Delta v)+\frac{\partial^2 f(u,v)}{\partial v^2}(\Delta v)^2<0$$

このとき，任意の(u,v)で以下が成り立つ。

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)<0 \qquad \left(\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}\right)^2-\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)<0$$

(左の2式から，$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)<0$ も同時に成立する。)

下に凸となる関数でも同様に，$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)>0$, $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)>0$, $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}\right)^2-\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)<0$

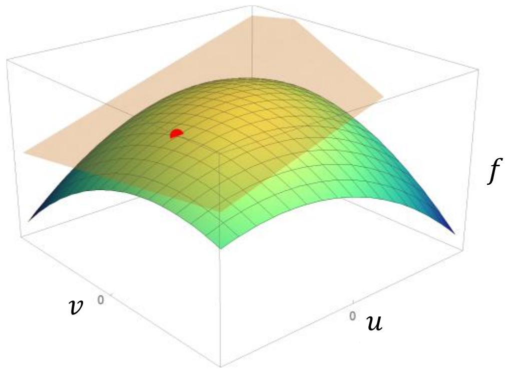
また，n変数の上に凸の関数$f(u_1,\cdots,u_n)$の場合にも以下について同様に考えればよい。

→ 定符号の二次形式 $\sum_{i,j=1}^{n}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u_i\partial u_j}\right)\Delta u_i\Delta u_j<0$，つまりヘッセ行列式 $\left|-\frac{\partial^2 f}{\partial u_i\partial u_j}\right|>0$

また，この曲面の(u_0,v_0)での接平面は，次式の通り。

$$f(u,v)=f(u_0,v_0)+(u-u_0)\frac{\partial f(u_0,v_0)}{\partial u}+(v-v_0)\frac{\partial f(u_0,v_0)}{\partial v}$$

・狭義の上に凸の曲面 $f(u,v)=-u^2+uv-v^2$ と接平面の例



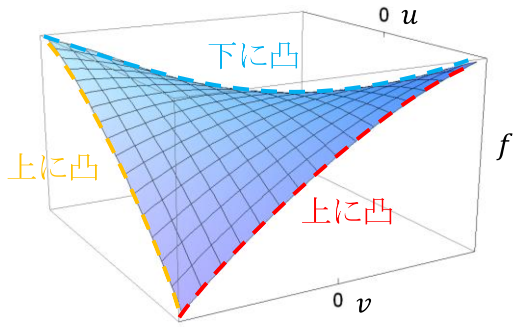
$$\frac{\partial f}{\partial u}=-2u+v \qquad \frac{\partial f}{\partial v}=-2v+u$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}=-2<0 \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial v^2}=-2<0 \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}=1>0$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}\right)^2-\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)=-3<0$$

・$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)<0$，$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)<0$でも上に凸の曲面にならない例

$f(u,v)=-u^2+4uv-v^2$ のとき，

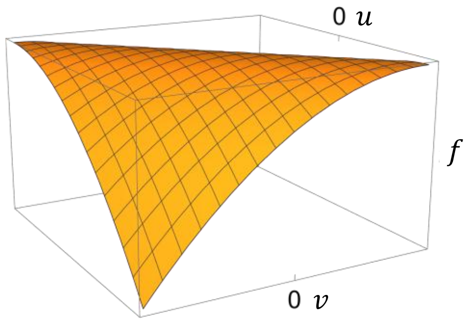


$$\frac{\partial f}{\partial u}=-2u+4v \qquad \frac{\partial f}{\partial v}=-2v+4u$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}=-2<0 \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial v^2}=-2<0 \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}=4>0$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}\right)^2-\left(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}\right)\left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right)=12>0$$

・広義の上に凸の曲面の例（直線的に変化する向きがある）



$f(u,v)=-u^2+2uv-v^2$ のとき，

$$\frac{\partial f}{\partial u}=-2u+2v \qquad \frac{\partial f}{\partial v}=-2v+2u$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial u^2}=-2<0 \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial v^2}=-2<0 \qquad \frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v}=2>0$$

$$(\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v})^2-(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2})(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2})=0$$

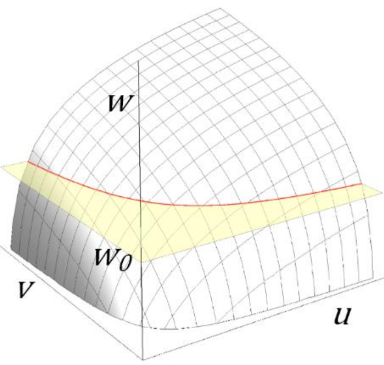
$\therefore F''(t)=-2(\Delta u+\Delta v)^2\le 0$ から，$\Delta u+\Delta v=0$ の向きで $F''(t)=0$

補1）$w=f(u,v)$曲面に関するw一定の断面上での曲線$v(w_0,u)$の凹凸，$(\partial^2 v/\partial u^2)_w$の正負

$$\Delta f=f_u\Delta u+f_v\Delta v+\frac{1}{2}f_{uu}(\Delta u)^2+f_{uv}\Delta u\Delta v+\frac{1}{2}f_{vv}(\Delta v)^2 \qquad f_u=(\frac{\partial f}{\partial u})_v \qquad f_{uu}=(\frac{\partial^2 f}{\partial u^2})_v \qquad f_{uv}=(\frac{\partial^2 f}{\partial u\partial v})$$

$\Delta f=0$を保つ微小変化$(\Delta u,\Delta v,0)$時の関係を$\Delta v=A\Delta u+B(\Delta u)^2$とおくと，等式$\Delta f=0$における$\Delta u,(\Delta u)^2$の係数について各々以下が成り立つ。

$$\begin{cases} f_u+f_vA=0 \\ f_vB+\frac{1}{2}f_{uu}+f_{uv}A+\frac{1}{2}f_{vv}A^2=0 \end{cases}$$



$$A=(\frac{\partial v}{\partial u})_w=-\frac{f_u}{f_v}=-(\frac{\partial v}{\partial w})_u(\frac{\partial w}{\partial u})_v$$

$$\therefore \quad B=\frac{1}{2}(\frac{\partial^2 v}{\partial u^2})_w=-\frac{1}{2f_v}(f_{uu}+2f_{uv}A+f_{vv}A^2)$$

$$=-\frac{1}{2}(\frac{\partial v}{\partial w})_u[(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2})_v+2(\frac{\partial^2 w}{\partial u\partial v})(\frac{\partial v}{\partial u})_w+(\frac{\partial^2 w}{\partial v^2})_u(\frac{\partial v}{\partial u})_w^2]$$

そこで，$f(u,v)$が，1)u,vと共に単調に変化し，2)上（あるいは下）に凸となる曲面となるとき，f_v，f_u，$f_{uu}+2f_{uv}A+f_{vv}A^2$の符号が一定となり，$A$と$B$の正負，すなわち断面曲線$v(w_0,u)$の形状が以下のように一意的に決まる。なお，ある状態で一意的な値をとる熱力学的な状態量の関数としては単調変化を前提として構わないであろう。

	$w=f(u,v)$曲面の形状	$v(w_0,u)$曲線の形状
a）	下に凸の曲面でvと共に単調増加	上に凸の曲線（$B<0$）
	上に凸の曲面でvと共に単調減少	同上
	下に凸の曲面でvと共に単調減少	下に凸の曲線（$B>0$）
	上に凸の曲面でvと共に単調増加	同上
b）	u,vに対する依存性が同じ	単調減少（$A<0$）
	u,vに対する依存性が逆	単調増加（$A>0$）

上図の$w=f(u,v)$や本文中の$S(U,V)$は，上に凸の曲面で，両変数の単調増加関数なので，断面曲線は下に凸の単調減少関数となる。

参考15の$H(S,p)$は，$(\frac{\partial^2 H}{\partial S^2})_p>0$，$(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2})_S<0$ なので，$(\frac{\partial^2 S}{\partial p^2})_H$の正負，断面曲線$S(p,H_0)$の凹凸は不定となる（本文参照）。

補2）粒子数N（物質量n）の関係する2階の偏微分係数について（参考17B）

示量性の変数による熱力学関数U, S, H, Fなどについては，粒子数N（物質量n）の増減に伴い，例えばエントロピーには$S(U, V, N) = Ns(\frac{U}{N}, \frac{V}{N})$の関係が成り立つ（参考14）。そこで$S(U, V, N)$の$N$に関する偏微分係数は$s(u, v)$の$u, v$に関する偏微分係数で決まる。このため$S(U, V, N)$（超）曲面の凸性を決める2階の偏微分係数についても，$s(u, v)$のu, vに関する2階の偏微分係数で表される。つまり，$S(U, V, N)$（超）曲面の凸性を決める微小変化の2次の項$\Delta S_2(\Delta U, \Delta V, \Delta N)$は，新たな特性の要請なしに，$s(u, v)$曲面の狭義の凸性を表す以下の$\Delta s_2(\Delta u, \Delta v)$により，

$$\Delta s_2(\Delta u, \Delta v) = (\frac{\partial^2 s}{\partial u^2})_v \Delta u^2 + 2(\frac{\partial^2 s}{\partial u \partial v})\Delta u \Delta v + (\frac{\partial^2 s}{\partial v^2})_u \Delta v^2 \ (< 0 \text{ for } \ \Delta u \neq 0 \text{ or } \Delta v \neq 0)$$

$\Delta S_2(\Delta U, \Delta V, \Delta N) = \frac{1}{N}\Delta s_2(\Delta U - u\Delta N, \Delta V - v\Delta N) \leq 0$と表される広義の凸性を有する。