

2023 年 04 月 24 日

方向微分と勾配

新潟工科大学 基礎教育・教養系 竹野茂治

1 はじめに

基礎数理 III の講義では、2 変数関数の偏微分を説明しているが、3 変数のベクトル解析で良く知られている「方向微分」や「勾配」の話は教科書には出てこない。しかし、これらも 2 変数関数を解析する上では重要な道具なので、2 変数関数の場合の「方向微分」や「勾配」についてここにまとめておく。

2 方向微分係数

2 変数関数 $z = f(x, y)$ に対する x 方向の偏微分係数 $f_x(a, b) = (\partial f / \partial x)(a, b)$ の値は、 $(x, y) = (a, b)$ における x 方向の f の変化率、 x 方向の接線の傾きを示す。それは、 $f_x(a, b)$ の定義が、

$$f_x(a, b) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(a + \Delta x, b) - f(a, b)}{\Delta x} \quad (1)$$

だからであり、 (a, b) から $(a + \Delta x, b)$ への x 方向の変化を見ているからである。

同様に、 y 方向の偏微分係数 $f_y(a, b)$ は、その定義

$$f_y(a, b) = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(a, b + \Delta y) - f(a, b)}{\Delta y} \quad (2)$$

より、 $(x, y) = (a, b)$ における y 方向の f の変化率、 y 方向の接線の傾きを示す。

これらに対し、一般の方向の変化率、一般の方向の接線の傾きを示すのが「方向微分係数」である。今、 $\vec{u} = (u_1, u_2)$ を単位ベクトル (長さ 1 のベクトル) とする。平面ベクトルの場合、単位ベクトルは、角 θ ($0 \leq \theta < 2\pi$) を用いて

$$\vec{u} = (\cos \theta, \sin \theta) \quad (3)$$

と表すこともでき、 θ は、 \vec{u} の方位を示す。この \vec{u} 方向の f の変化率を考える。

(a, b) から \vec{u} 方向に長さ Δt だけ離れた点は、 $|\vec{u}| = 1$ より、

$$(a, b) + \vec{u}\Delta t = (a + u_1\Delta t, b + u_2\Delta t) = (a + (\Delta t)\cos\theta, b + (\Delta t)\sin\theta)$$

と書くことができる。よって、

$$\frac{\Delta f}{\Delta t} = \frac{f(a + u_1\Delta t, b + u_2\Delta t) - f(a, b)}{\Delta t} \quad (4)$$

が \vec{u} 方向の平均変化率を表し、 \vec{u} 方向 (角 θ 方向) の (a, b) での方向微分係数は、

$$\frac{\partial f}{\partial u}(a, b) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(a + u_1\Delta t, b + u_2\Delta t) - f(a, b)}{\Delta t} \quad (5)$$

と定義される。

今、合成関数 $g(t)$ を

$$g(t) = f(a + u_1t, b + u_2t) \quad (6)$$

と定めると、(5) は、

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(a + u_1\Delta t, b + u_2\Delta t) - f(a, b)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{g(\Delta t) - g(0)}{\Delta t} = g'(0) \quad (7)$$

となる。一方、(6) の導関数は、偏微分に関する合成関数の微分法により、

$$g'(t) = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} = f_x(a + u_1t, b + u_2t)u_1 + f_y(a + u_1t, b + u_2t)u_2$$

となるので、 $t = 0$ とすれば

$$g'(0) = f_x(a, b)u_1 + f_y(a, b)u_2 \quad (8)$$

となる。ここで、 $\nabla f = \nabla f(x, y)$ (成分が関数のベクトル) を、

$$\nabla f(x, y) = (f_x(x, y), f_y(x, y)) \quad (9)$$

と定めると、(8) は $\nabla f(a, b)$ と \vec{u} との内積となる。よって (3), (5), (7), (8) より、次のことがわかる。

命題 1

$$\frac{\partial f}{\partial u}(a, b) = \nabla f(a, b) \cdot \vec{u} = f_x(a, b) \cos \theta + f_y(a, b) \sin \theta$$

このように、一般の方向の傾きである方向微分係数は、 x, y 方向の傾き $f_x(a, b)$, $f_y(a, b)$ を用いて表されることになるが、それは接平面が $f_x(a, b)$, $f_y(a, b)$ のみで決定することにも対応する。

3 等高線

前節のベクトル $\nabla f(x, y)$ は、ベクトル解析では f の「勾配」と呼ばれている。本節では、 $z = f(x, y)$ のグラフの等高線と勾配との関係を考える。

2 変数関数 $z = f(x, y)$ のグラフは、3 次元空間内の曲面となる。その等高線は、

$$f(x, y) = z_0 \quad (z_0 \text{ は定数}) \tag{10}$$

で定義される曲線である。ただし、関数や z_0 の値によっては曲線にはならない場合もある。

例えば、放物面 $z = x^2 + y^2$ の等高線は、

$$x^2 + y^2 = z_0 \tag{11}$$

より、半径 $\sqrt{z_0}$ ($z_0 > 0$) の円となる。

等高線と勾配とは次の関係が成り立つ。

命題 2

等高線 (10) が滑らかな曲線である場合、その上の各点 (a, b) で、ベクトル $\nabla f(a, b)$ と等高線は垂直になる。

これを以下に説明する。

等高線が滑らかな曲線である場合、 $(x, y) = (a, b)$ の近くでは、(10) の (a, b) での接線が y 軸と平行ではない場合は

$$y = h(x) \quad (12)$$

の形に、そして (10) の (a, b) での接線が x 軸と平行ではない場合は

$$x = \hat{h}(y) \quad (13)$$

の形に表すことができることが知られている。

例えば、(11) の等高線は、点 $(0, \sqrt{z_0})$ を含む部分としては

$$y = \sqrt{z_0 - x^2} \quad (-\sqrt{z_0} < x < \sqrt{z_0})$$

と (12) の形に書けるし、 $(0, -\sqrt{z_0})$ を含む部分としては

$$y = -\sqrt{z_0 - x^2} \quad (-\sqrt{z_0} < x < \sqrt{z_0})$$

と (12) の形に書くことができるが、接線が y 軸に平行になる円の右端と左端の $(\sqrt{z_0}, 0)$, $(-\sqrt{z_0}, 0)$ の内部に含む円の部分を (12) の形に書き表すことはできない。一方で、これらの点を内部に含む円の部分は、(13) の形になら表すことができ、例えば、 $(\sqrt{z_0}, 0)$ の近くでは

$$x = \sqrt{z_0 - y^2} \quad (-\sqrt{z_0} < y < \sqrt{z_0})$$

$(-\sqrt{z_0}, 0)$ の近くでは

$$x = -\sqrt{z_0 - y^2} \quad (-\sqrt{z_0} < y < \sqrt{z_0})$$

のようになる。このように、等高線が滑らかな曲線の場合は、その上の各点 (a, b) を含む部分は、(12) か (13) のいずれかの形で書ける。

命題 2 の説明に戻る。まずは (10) の上の点 (a, b) を含む (10) の部分が (12) の形に書ける場合を考える。この場合は、

$$b = h(a) \quad (14)$$

であり、 (a, b) で等高線 (10) に接するベクトルは、傾きが $h'(a)$ のベクトル、すなわち

$$\vec{v}_1 = (1, h'(a)) \quad (15)$$

となる。命題 2 を示すには、この \vec{v}_1 と $\nabla f(a, b)$ が垂直になることを示せばよい。今、(12) は、(10) を式変形したものなので、 (x, y) が (12) を満たせば (10) を満たし、よって a の近くのすべての x に対して

$$f(x, h(x)) = z_0 \quad (16)$$

が成立することになる。この式の両辺を x で微分すれば、合成関数の微分により

$$\frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dh}{dx} = f_x(x, h(x)) \cdot 1 + f_y(x, h(x))h'(x) = 0$$

となるので、 $x = a$ とすると (14) より

$$f_x(a, h(a)) + f_y(a, h(a))h'(a) = f_x(a, b) + f_y(a, b)h'(a) = 0$$

となる。(15) より、この式は

$$\nabla f(a, b) \cdot \vec{v}_1 = 0 \quad (17)$$

を意味するので、これで $\nabla f(a, b) \perp \vec{v}_1$ が示されたことになる。

次は、(12) ではなく、代わりに (13) と書けた場合を考える。この場合

$$a = \hat{h}(b) \quad (18)$$

であり、

$$\frac{dx}{dy} = \hat{h}'(y)$$

は x の y に関する傾きを意味するので、 (a, b) で $x = \hat{h}(y)$ に接するベクトルは

$$\vec{v}_2 = (\hat{h}'(b), 1) \quad (19)$$

となる。 b の近くの任意の y に対して、(13) の x, y は (10) を満たすので、

$$f(\hat{h}(y), y) = z_0 \quad (20)$$

が成り立つ。この式の両辺を y で微分すると

$$f_x(\hat{h}(y), y)\hat{h}'(y) + f_y(\hat{h}(y), y) = 0$$

となり、 $y = b$ とすると (18) より、

$$f_x(\hat{h}(b), b)\hat{h}'(b) + f_y(\hat{h}(b), b) = f_x(a, b)\hat{h}'(b) + f_y(a, b) = \nabla f(a, b) \cdot \vec{v}_2 = 0$$

となり、よって $\nabla f(a, b) \perp \vec{v}_2$ が言える。

すなわち、(12), (13) いずれの場合も、等高線に接するベクトルと ∇f とは垂直となり、これで命題 2 が示されたことになる。

例えば $z = x^2 + y^2$ の場合、

$$\nabla f = (f_x, f_y) = (2x, 2y)$$

となり、これは原点からその点までの位置ベクトルの 2 倍のベクトルで、等高線 (11) の円に対して半径方向となるので、円とは明らかに垂直になる。

4 勾配の意味

前節で、勾配 $\nabla f(x, y)$ は、グラフの等高線に垂直なベクトルであることがわかったが、本節では勾配 $\nabla f(x, y)$ の意味をより明らかにする。

命題 1 で方向微分係数は勾配と方向ベクトルとの内積で表現されることがわかったが、 $\nabla f(a, b)$ と方向ベクトル \vec{u} のなす角を α ($0 \leq \alpha \leq \pi$) とすると、 \vec{u} は単位ベクトルなので、

$$\frac{\partial f}{\partial u}(a, b) = |\nabla f(a, b)| |\vec{u}| \cos \alpha = |\nabla f(a, b)| \cos \alpha \quad (21)$$

と書ける。 α 、すなわち \vec{u} の方向を変化させると、(21) は $\alpha = 0$ 、すなわち $\nabla f(a, b)$ と \vec{u} が同じ向きのおきに最大値 $|\nabla f(a, b)|$ を取り、 $\alpha = \pi$ 、すなわち $\nabla f(a, b)$ と \vec{u} が逆向きのおきに最小値 $-|\nabla f(a, b)|$ を取る。

命題 3

$\nabla f(a, b) \neq \vec{0}$ のとき、 $(x, y) = (a, b)$ で $f(x, y)$ は $\nabla f(a, b)$ の方向に最も大きく増加し、その変化率 (方向微分係数) は $|\nabla f(a, b)|$ となり、その逆方向に最も大きく減少し、その変化率 (方向微分係数) は $-|\nabla f(a, b)|$ となる。

命題 2 より $\nabla f(a, b)$ に垂直な方向には $f(x, y)$ は変化せず (等高線の方)、命題 3 より $\nabla f(a, b)$ の方向には最も激しく変化することになる。この事実是最急降下法などの数値計算でも利用されている。

結局、勾配 ∇f は以下のようなベクトルになる。

- 方向 = f が最も大きく変化する方向で、等高線に垂直な方向
- 向き = f の増加方向
- 大きさ = その方向の f の変化率 (接線の傾き)

「勾配」という名前も、この性質に由来する。

5 最後に

方向微分係数と勾配は、 n 変数関数にも拡張される。 $f(x_1, \dots, x_n) = f(\vec{x})$ の n 次元の勾配は、

$$\nabla f(\vec{x}) = (f_{x_1}(\vec{x}), \dots, f_{x_n}(\vec{x}))$$

の n 次元ベクトルとして定義され、 n 次元単位ベクトル \vec{u} に対する f の \vec{u} 方向の方向微分係数は、

$$\frac{\partial f}{\partial u}(\vec{x}) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(\vec{x} + \vec{u} \Delta t) - f(\vec{x})}{\Delta t} = \nabla f(\vec{x}) \cdot \vec{u}$$

となる。これも命題 2、命題 3 と同様の性質を持つことが前と同様にして示される。

勾配は $n = 3$ の 3 次元空間ベクトル、3 変数スカラー関数 (スカラー場) に対して考えることが多いが、2 次元の場合の本稿の内容も知っていると、それなりに有益だろうと思う。